## 简单系统模拟：Q2R规则

- **Q2R**规则是**Vichniac**在**1984** 年针对完全封闭二维类**Ising**模型元胞自动机提出来的，体系与外界没有能量交换。
- 针对一维正方晶格，$s_i$**=0 or 1**， 自旋平行排列交互作用为**-J**，相反时为**J**。每个自旋在并联同时**flip**时必须满足能量不变规则。
- 这一条件不易满足，因为一个自旋翻转会影响其近邻。如：
- 时刻 **t:**　　**0—1—0—0—1—0—0—1—1—0=3J**
- 时刻**t+1:**　**0—1—1—1—1—1—1—0—0—0=-5J**
- 可以看到，这种同时翻转导致系统能量变化了。怎么办？

- 办法是分两步进行，这已经违反元胞自动机的规则了。可见法律是可以改变的。
- 先固定偶数位自旋，按规则翻转奇数位自旋；再固定奇数位自旋，翻转偶数位自旋。如左侧按位置0计(每一步都不能改变能量)：
- 时刻 t:　　0—1—0—0—1—0—0—1—1—0=3J
- 时刻t+1/2:　0—1—0—1—1—1—0—0—1—0=2J　固定偶数位
- 时刻t+1:　　0—1—0—1—1—1—1—0—1—0=3J　固定奇数位
- 可以看到，t时刻的能量与t+1时刻能量相同。
- 挺好玩吧！

- 对于二维或者高维，采取同样方法。还可以推广到**Potts**模型及其它模型。例如，对于二维晶格，另外定义奇偶点阵$b_{ij}(t)=0$ *or* **1**，自旋翻转只发生在 $b_{ij}=1$的格点，因此有：

- $s_{ij}(t+1)=1-s_{ij}(t)$ **if** $b_{ij}(t)=1$且$(s_{i-1,j}+s_{i+1,j}+s_{i,j-1}+s_{i,j+1})=2$；否则 $s_{ij}(t+1)=s_{ij}(t)$。同时，$b_{ij}(t+1)=1-b_{ij}(t)$。

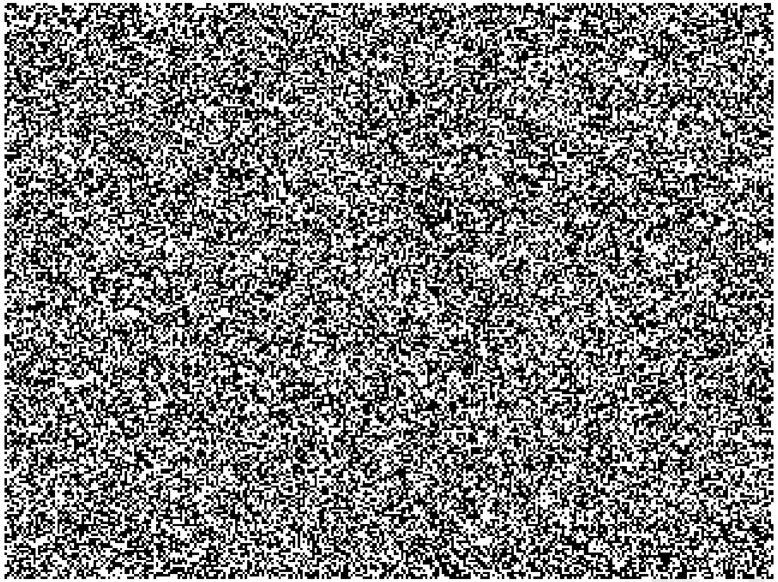
- 利用这种元胞自动机规则同样可以研究**Ising**模型的一切性质。

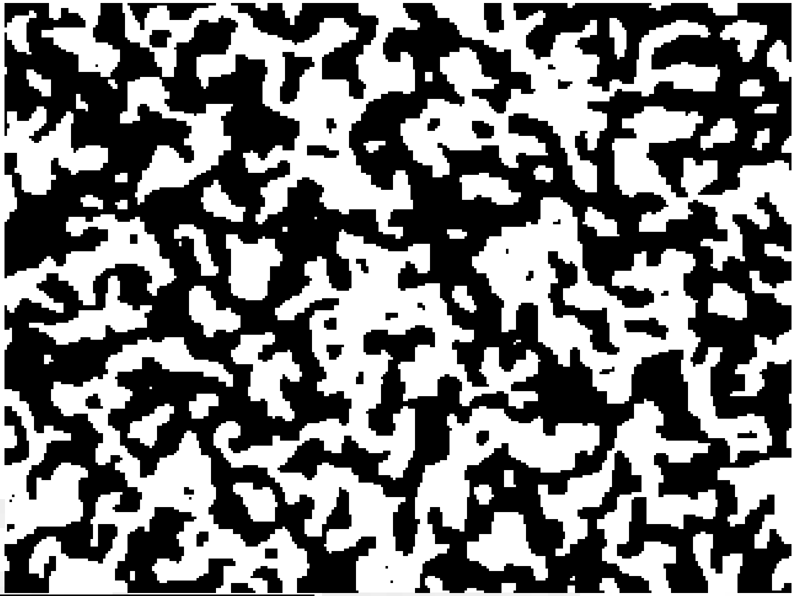
- 问题是这种奇偶代数在动力学演化空间中不是各态历经的。存在的问题是模拟未必能够得到体系整体能量最低状态。例如下列闭合一维链：**1001(t)→1100(t+1)→0110(t+2)→0011(t+3)→1001(t+4)**，满足能量守恒，但是**0111**也是同样能量态，却无法被访问。

## 简单系统模拟：退火规则

- 如果点阵状态离散，例如$s_i$=0或1，退火规则的意思是说一个格位的状态服从其近邻位大多数状态。
- 退火规则中最著名的还是算**Vichniac**规则。在二维空间，每个格位的**updating**决定其**Moore**邻居状态($s_i$=0, 1)之和：
- $Sum_{ij}(t)$:  0 1 2 3 4 5 6 7 8 9
- $s_{ij}(t+1)$:  0 0 0 0 1 0 1 1 1 1
- 与大多数普通规则不同，$Sum_{ij}(t)$=4, 5的两个位置赋值规则作了交换，从而令人诧异地展示了畴长大过程。

# 非线性物理：元胞自动机

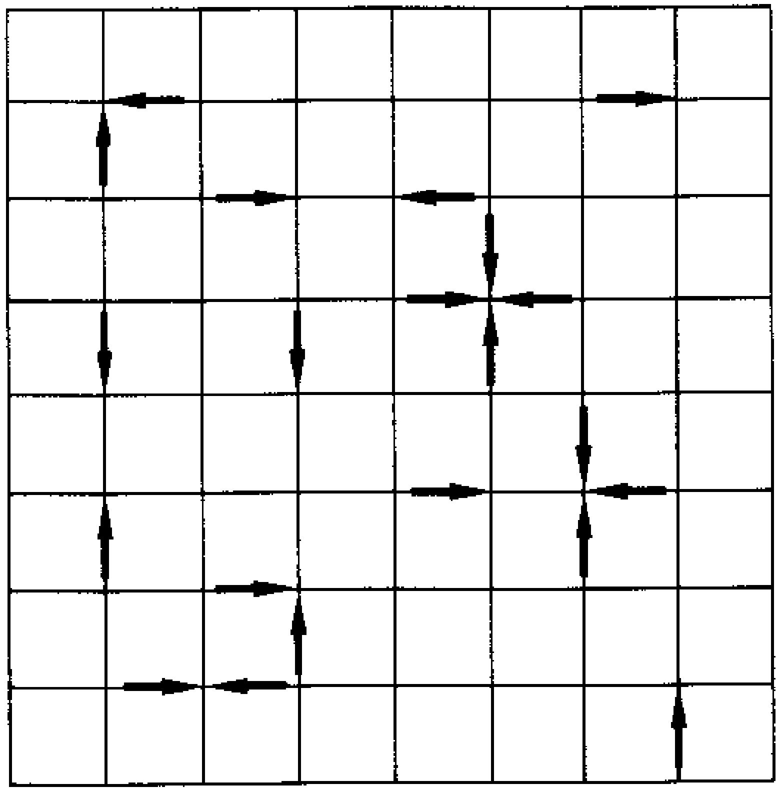


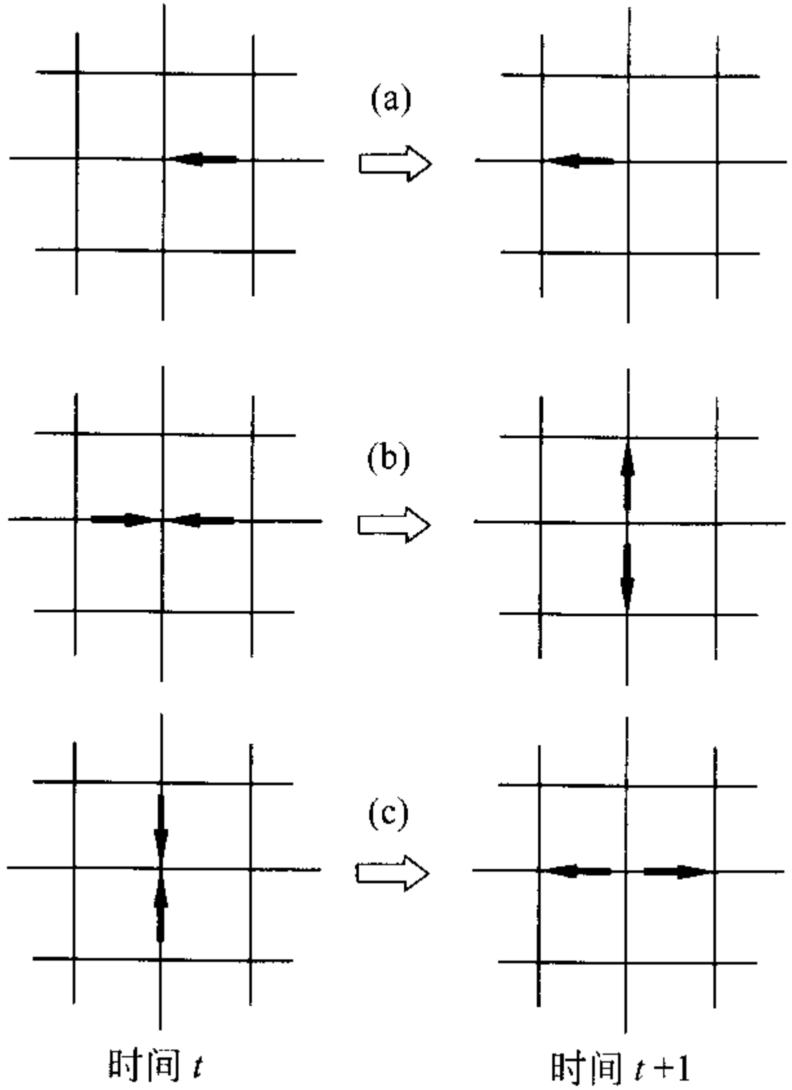


## 简单系统模拟：HPP规则

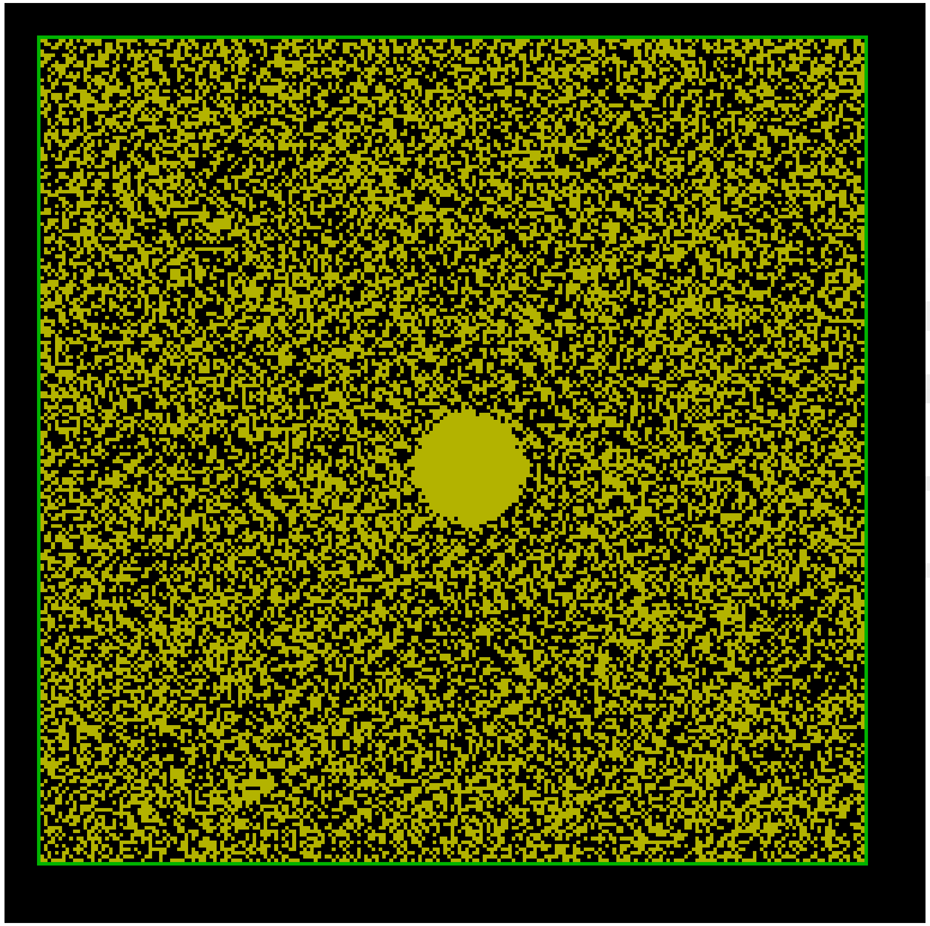
- **HPP**由**Hardy, de Pazzis, Pomeau**三人在**1976**年提出的一种规则点阵方法，来模拟分子动力学过程。格点状态为**0 or 1**，表示格点是否为粒子占据，具有排它性，粒子运动沿格点主方向进行。
- **HPP**规则模拟粒子之间弹性碰撞，服从局部动量和能量守恒。但粒子相互作用演化是完全确定的，过程也是严格时间反演的。
- 格位状态表示为***s(r, t)*=(ESWN)**，东南西北。例如***s(r, t)*=(1011)**表示此时有**3**个粒子沿东、西和北方向进入到此格位。
- 两个粒子碰撞的表达：**(1010)→(0-10-1), (0101)→(-10-10)**

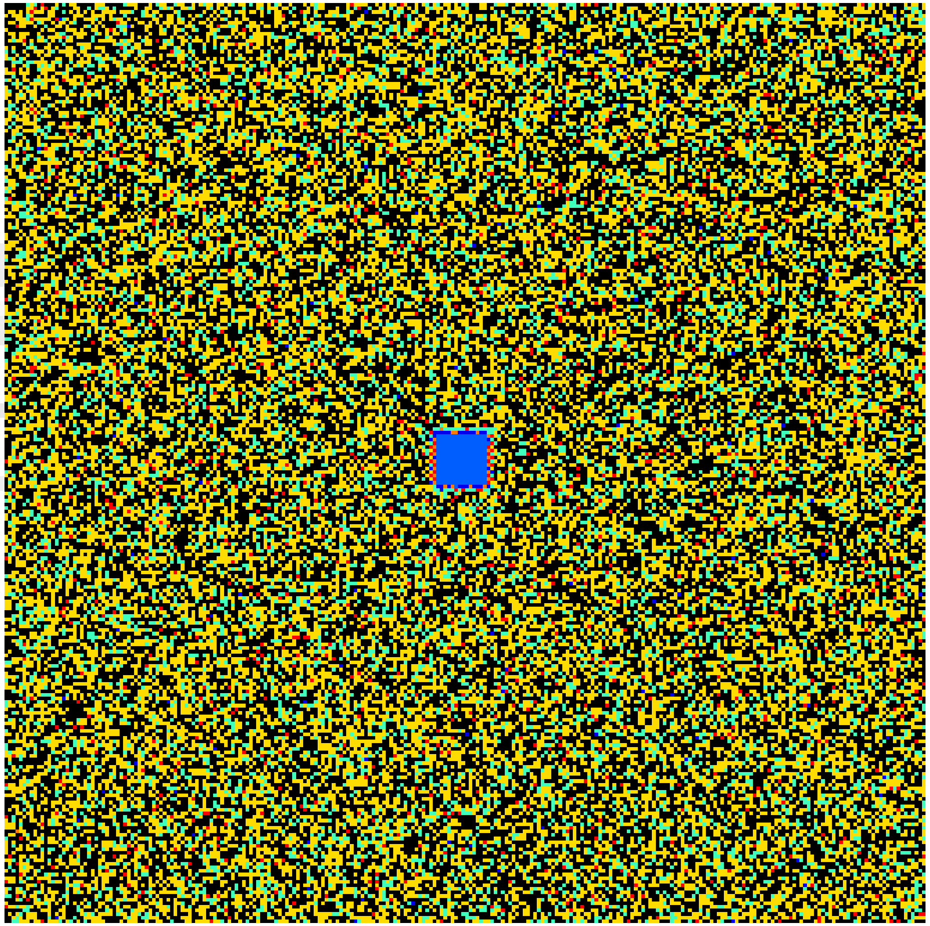
- 格位状态和部分**HPP**规则如下：



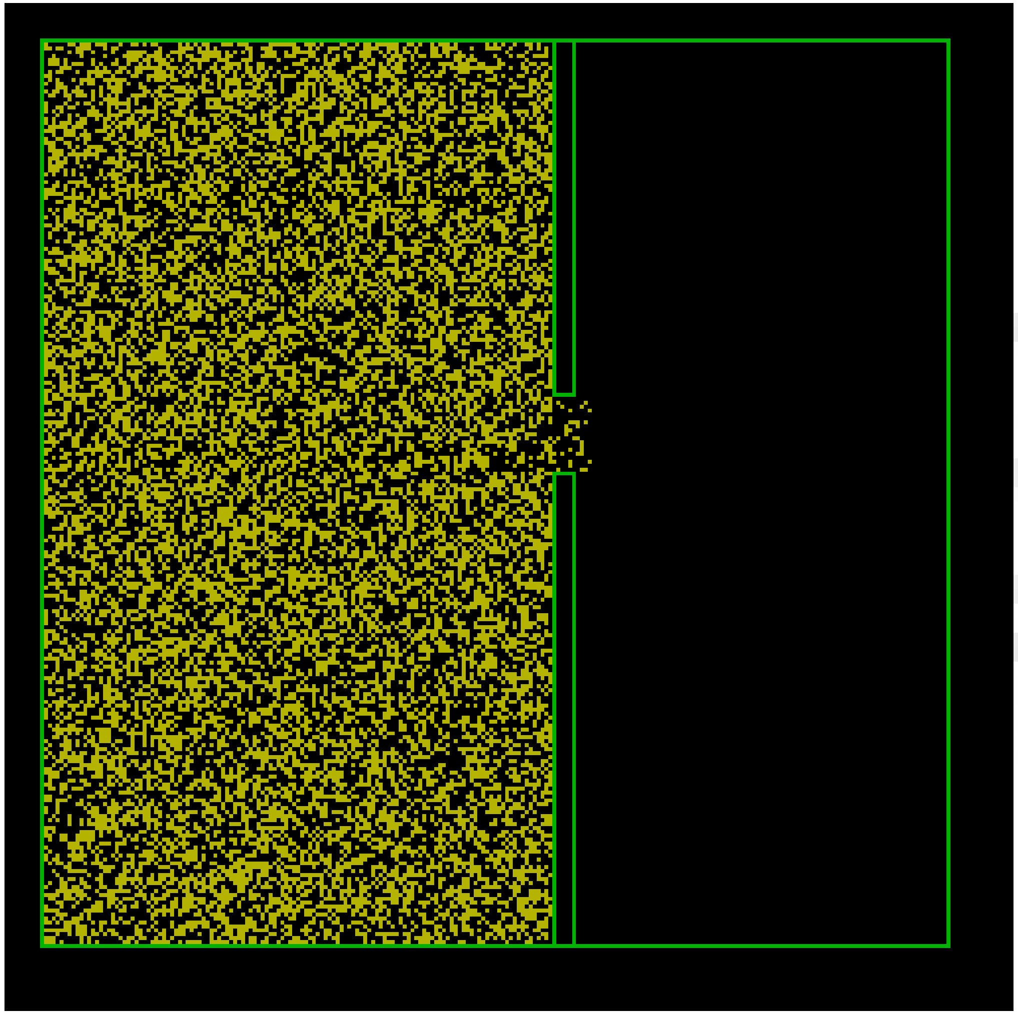


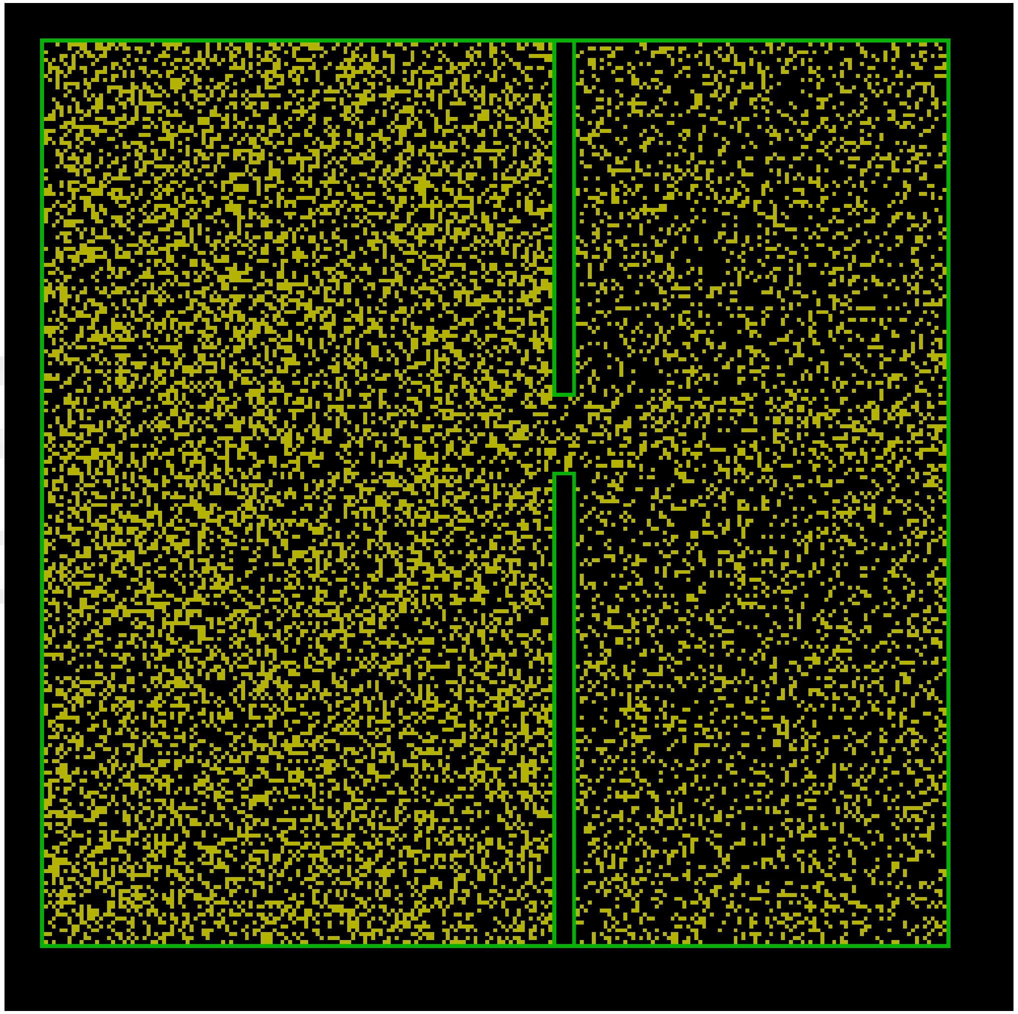
- 部分演化情况：冲击波问题(有各向异性，与实际不符)，改进后的结果。





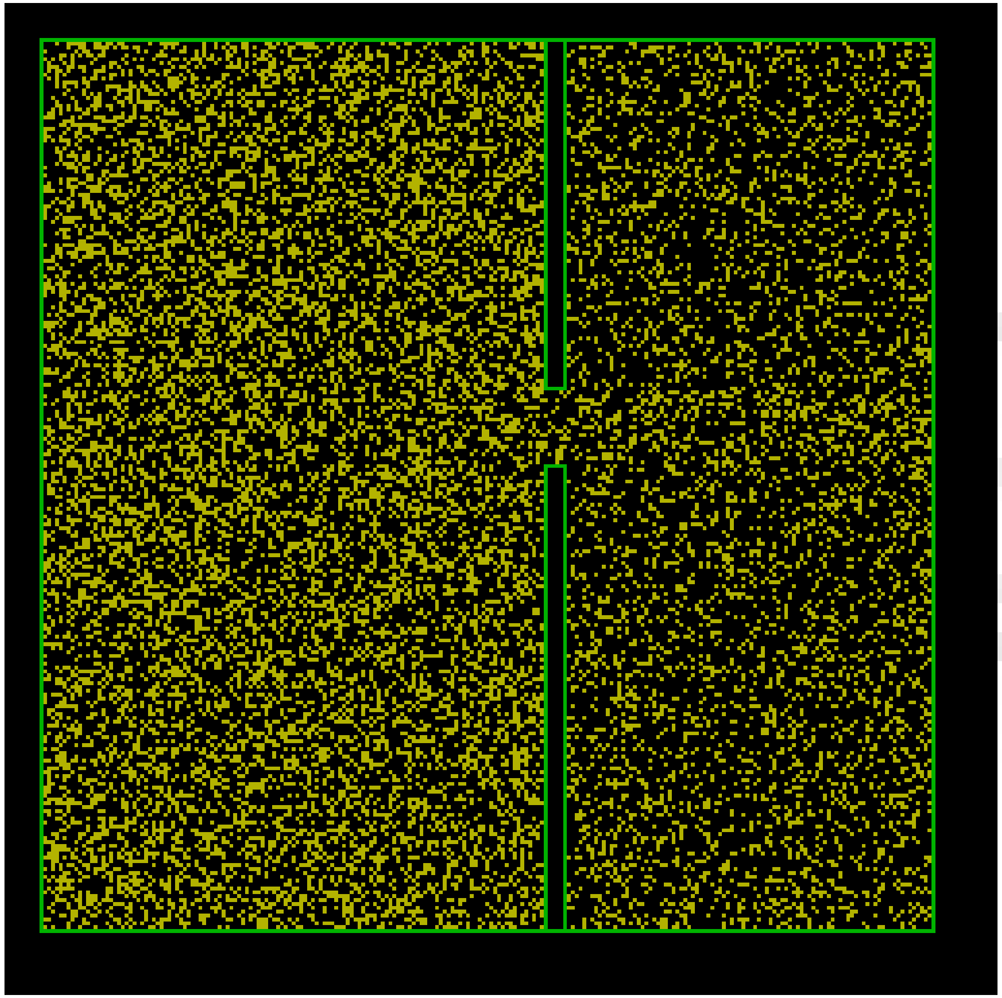
- 严格的时间反演对称性：

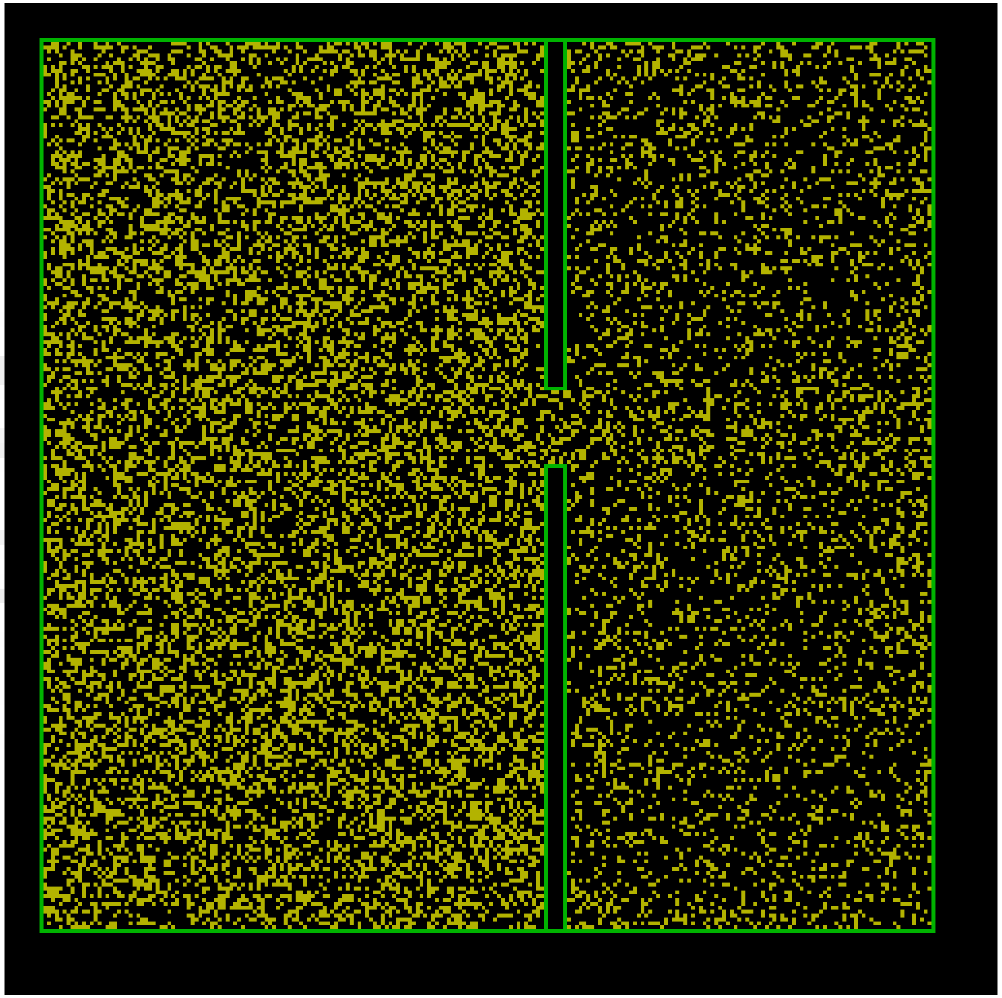




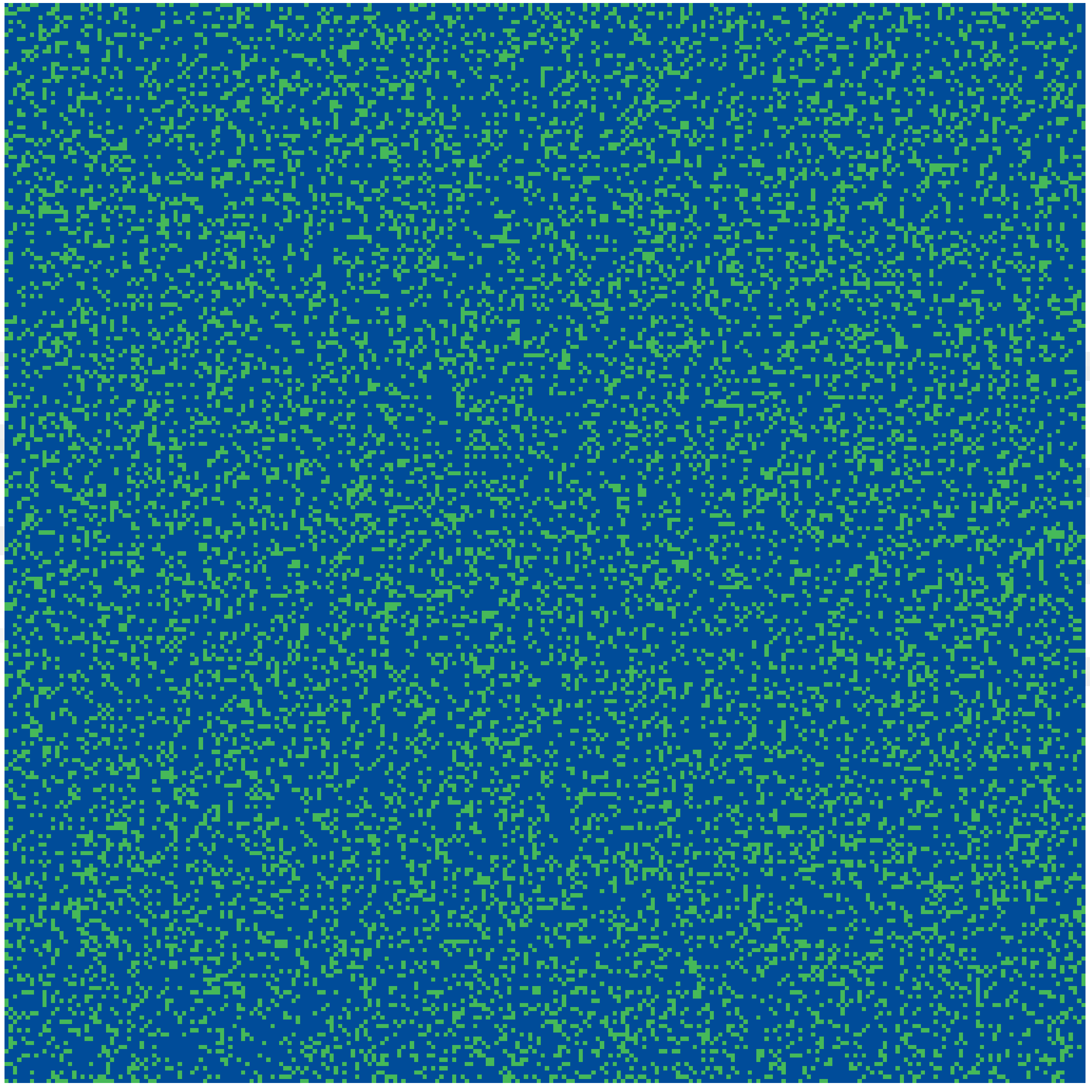
# 非线性物理：元胞自动机

- 时间反演对称性破缺(右边只有一个粒子位置与左边不同)：

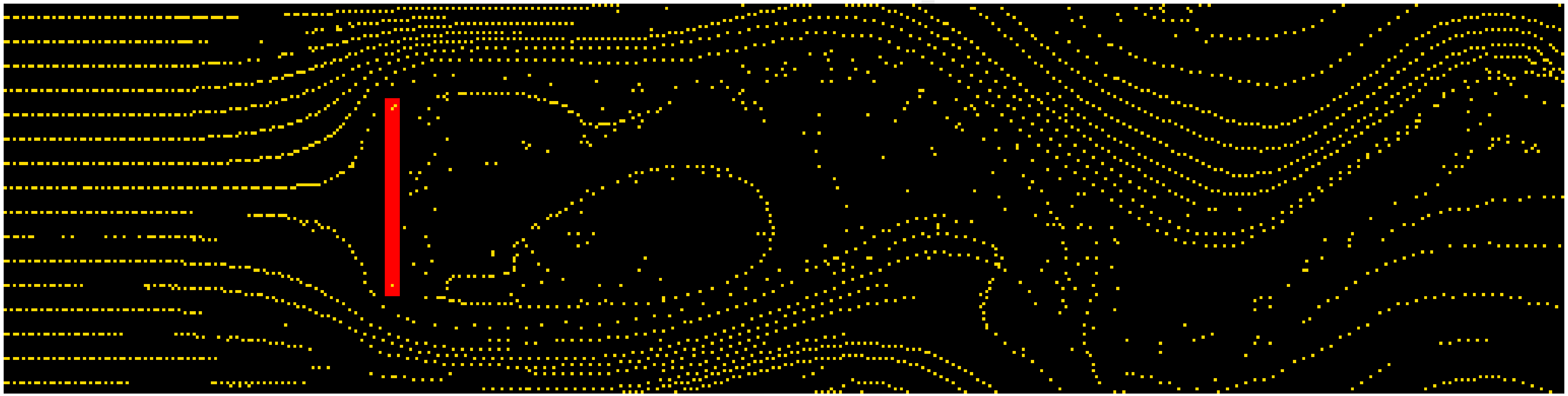




- 发展到更广泛的规则点阵气元胞自动机(LGCA)的DLA模拟：



- **LGCA的von Karman Street模拟：**



- LGCA的下雪过程模拟：