

蒙特卡罗短时临界动力学中的普适性研究*

王 磊¹⁾ 顾德炜²⁾ 应和平¹⁾ 季达人¹⁾

¹⁾ 浙江大学近代物理中心, 浙江大学物理系, 杭州 310027)

²⁾ 杭州成人科技大学, 杭州 310012)

(1999 年 4 月 25 日收到, 1999 年 5 月 28 日收到修改稿)

以一种新的临界动力学 Monte Carlo 方法研究了统计模型在临界区域的有限体积标度理论的普适性. 通过在三角点阵上模拟 Ising 模型和 3 态 Potts 模型的临界动力学的短时行为, 从一阶磁矩的幂指数行为和二阶磁矩、累积量的标度关系中确定了新的动力学临界指数 θ 和临界指数 $\approx 2\beta/\nu$. 采用 Heat-bath 迭代方法开展了具体模拟计算, 所得的结果与正方点阵上相关模型的结果完全一致, 从而证实了短时动力学在临界区域中存在的普适性和标度关系.

PACC: 7540G; 7510H; 7540M

1 引 言

近年来, 临界动力学的重要进展之一是发现统计自旋系统在远离平衡态的早期临界弛豫过程中存在普适性并呈现新的标度行为^[1, 2], 从而突破了过去长期认为动力学过程只有长时区域指数弛豫和代数弛豫两个普适标度区的概念, 这称之为临界现象短时动力学理论. 新的普适标度区为一与初始条件相联系的早期演化区, 它意味着可以利用动力学蒙特卡罗模拟(Dynamic Monte Carlo)方法来研究统计物理中的一个极其重要的领域——统计自旋系统的相变和临界现象. 该现象在表面和低维凝聚态物理中一直是人们关注的问题, 对于相关物理性质扮演着十分重要的作用. 我们知道, 测量处于临界状态的平衡或非平衡统计系综的临界指数是该领域中重要而有趣的课题, 但关于它们的精确求解却往往非常困难. 因此, 数值模拟是研究统计模型临界现象和计算临界指数的重要方法. 由于在临界点系统的自关联长度以 $\xi_l = L^\nu$ 发散(L 是空间点阵的长度, ν 是动力学临界指数), 这种临界慢化现象使得数值模拟过程变得困难. 庆幸的是, 临界短时动力学理论可使我们避开临界慢化困难, 更加有效和方便地研究临界现象和计算相关临界指数. 更有意义的是已经发现短时动力学理论不仅可以计算动力学临界指数, 而且可以计算静力学临界指数, 其结果和在平衡态下的计算结果是一致的, 同时, 短时动力学理论还可

以确定统计自旋系统的临界温度. 因此, 该理论提供了一种系统且自洽的研究临界现象的有效方法.

1998 年 Zheng 的综述文献[3]总结了关于二维统计模型短时动力学研究的近期发展, 以及所采用的方法和计算结果. 短时动力学标度理论揭示了统计自旋系统存在一个磁化强度 $M(t) \sim m_0 t^\theta$ 的初始增加的弛豫过程, 然后, 它将先后以 $M(t) \sim t^{-\beta/\nu}$ 幂指数律和 $M(t) \sim e^{-t/\xi_l}$ 的指数律衰减而趋于零. 同时, 该理论与 Ordering dynamics^[4]和 Damage Spreading^[5]等临界过程紧密相关, 亦可用于自旋玻璃弛豫和磁系统的界面生长过程, 及分子动力学中的有关课题. 该理论还超越了平衡态下长时临界区域的标度理论, 可引入与临界初始条件相关的普适函数^[6]. 实际上, 已经有许多人利用短时动力学理论计算了 Ising 模型, Potts 模型, 量子 XY 模型和二维 $SU(2)$ 格点规范模型的各种临界指数^[7-10]. 所采用的方法主要有两种: 一种是根据物理量的幂指数关系计算临界指数^[7], 另一种是由标度关系进行标度拟合来计算^[2, 11]. 本文着重讨论第二种方法, 通过动力学蒙特卡罗模拟计算得到了二维三角点阵 Ising 和 Potts 模型的动力学和静力学临界指数(θ , $\approx 2\beta/\nu$). 从而验证了这两种模型在短时临界区域存在普适性和标度律.

2 模型与方法

本文考虑二维三角点阵的 q 态 Potts 模型, 其

哈密顿量可表达成

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \quad \sigma = 1, \dots, q, \quad (1)$$

$\langle ij \rangle$ 代表格点的最近邻求和, σ_i 是定义在 i 格点上自旋变量, 自旋总数为 $L \times L$, 采用周期性边界条件. 众所周知, 平衡态下该模型在临界温度点 $K_c = J/T_c = \frac{1}{q} \ln(\sqrt{q} + 1)$ 存在二阶连续相变^[14], 磁化强度 M 表征其相变序参数. 并且, 各种临界指数的结果都与正方点阵上 q 态 Potts 模型的临界指数是一样的, 具有临界普适性. 我们将仅考虑 $q=2$ 和 $q=3$ 的情况($q=2$ 相应于 Ising 模型), 以验证在短时临界动力学弛豫过程中仍然存在这种普适性.

考虑初始处在高温态, 且存在非常小的磁化强度的一个具有 $O(N)$ 对称性的自旋系统, 通过淬火把它降温到临界温度上, 让系统由初态 $M(0) \sim 0$ 向平衡态 $M=0$ 演化, 这个过程是一个动力学 A 模型^[12] 弛豫过程. Janssen, Schaub 和 Schmittmann^[1] 利用展开到双圈近似下的重整化群方法讨论了这个过程, 发现除了熟知的长时区域的普适性外, 在弛豫的早期阶段存在另一种普适性, 称之为临界初始增加. 这种临界增加具有特征时间 $t_0 \sim m_0^{-z/\nu}$, m_0 是初始磁化强度, x_0 是描述临界动态系统一个新的独立的临界指数.

对于有限体积系统早期演化的普适行为, Diehl 和 Rithschel^[13] 用重正化群分析得到临界点附近的动力学标度关系

$$M^{(k)}(t, \tau, L, m_0) = b^{-k\beta/\nu} M^{(k)}(b^{-z}t, b^{1/\nu}\tau, b^{-1}L, b^{x_0}m_0). \quad (2)$$

这里 $M^{(k)}$ 是磁化强度的 k 阶矩, $\tau = (T - T_c)/T_c$ 是约化温度, L 是空间点阵长度, b 是标度变换因子, m_0 是初始磁化强度. β, ν 和 z 是标准平衡态下的临界指数, x_0 是 m_0 的反常标度量纲.

对于足够大的点阵 ($L \rightarrow \infty$), 令 $\tau = 0$, $b = t^{1/z}$, 在 m_0 很小 ($m_0 \rightarrow 0$) 的情况下, 从 (2) 式可以得到一阶磁矩的幂指数关系,

$$M(t) \sim m_0 t^\theta, \quad \theta = (x_0 - \beta/\nu)/z, \quad (3)$$

$M(t)$ 定义为

$$M(t) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i(t) \right\rangle \quad q = 2;$$

$$M(t) = \frac{3}{2N} \left\langle \sum_i (\delta_{\sigma_i(t), 1} - \frac{1}{3}) \right\rangle \quad q = 3.$$

这里, $N = L \times L$ 为点阵上的自旋总数, $\langle \dots \rangle$ 是对所有初始组态的平均.

我们还可定义系统的自关联函数 $A(t, t')$,

$$A(t, t') = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i(t') S_i(t + t') \right\rangle, \quad (4)$$

其中

$$A(t, t' = 0) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i(0) S_i(t) \right\rangle \quad q = 2;$$

$$A(t, t' = 0) = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i (\delta_{\sigma_i(0), \sigma_i(t)} - \frac{1}{3}) \right\rangle \quad q = 3.$$

当取 $m_0 = 0$, Janssen 等人用级数展开得到 $A(t, t')$ 在临界点的指数行为^[11]

$$A(t, t' = 0) \equiv A(t) \sim t^{-\lambda}, \quad \lambda = d/z - \theta. \quad (5)$$

同样, 对于 $m_0 = 0$ 可以引进一个含时的累积量 $U(t, L)$,

$$U(t, L) = 1 - \frac{M^{(4)}(t)}{\chi(M^{(2)}(t))^2}, \quad (6)$$

并得到关于累积量的一个普适的有限点阵标度关系^[2]

$$U(t, L) = U(b^{-z}t, b^{-1}L). \quad (7)$$

临界指数可很容易地根据时空标度因子来获得. 也就是说对两套不同点阵, 把其中大点阵的累积量 $U(t, L)$ 对 Monte Carlo 迭代时间 t 和点阵的线性长度 L 进行重新标度: $t' = b^{-z}t$, $L' = b^{-1}L$, 然后把重新标度后的累积量的结果拟合到小点阵累积量的曲线上. 如果拟合后的数据能够重叠贴合在小点阵累积量的曲线上, 那么 z 就是所要求的最佳值. 这种方法称之为整体标度拟合法.

对于二阶矩, 令 $m_0 = 0$, 通过简单的标度分析^[7] 同样存在标度关系

$$M^{(2)}(t, L) = b^{-2\beta/\nu} M^{(2)}(b^{-z}t, b^{-1}L), \quad (8)$$

临界指数 $2\beta/\nu$ 同样可以由整体标度拟合法从标度因子 $b^{-2\beta/\nu}$ 来获得.

3 模拟结果

我们的计算是在相变温度点 $K_c = 0.4407$ (Ising) 和 $K_c = 0.6995$ (Potts) 处进行的, 计算采用的是热浴 (Heat-bath) 算法和 Metropolis 算法. 这两种算法结果在统计误差范围内是一致的, 因此我们的计算结果不对这两种算法进行区分, 有关的数据仅对 Heat-bath 算法给出. 点阵的大小为 $L \times L$, 采用周期性边界条件. 样本抽样对 50 000 个独立的组态平均, 统计误差根据对不同初始组态和模拟迭代选不同的随机数序列来分组进行估计.

首先研究系统从 m_0 很小 ($m_0 \sim 0$) 随机态下出发的磁化强度的演化. 我们计算了 $L = 128$ 三角点阵的 Ising 和 Potts 模型, 分别从 $m_0 = 0.04, 0.02, 0.01$ 开始演化的一阶磁矩 $M(t)$, 计算结果显示与 (3) 式一致的幂指数律和平行性. 因此我们根据 $M(t)$ 的双对数曲线的斜率获得临界指数 θ . 我们用最小二乘法算出了对应不同的 m_0 的斜率, 即临界指数 θ 结果列在表 1 中. 并外推到 $m_0 = 0$ 给出计算值. 图 1、图 2 以双对数坐标分别画出了两种模型从不同初始磁化强度 m_0 开始随 Monte Carlo 时间 t 演化的 $M(t)$ 曲线. 图 3 是 Potts 模型在不同 $L \times L$ 点阵上的 $A(t)$ 以双对数坐标画出的随 Monte Carlo 时间 t 变化的曲线. 从图中可以看出 $L = 32$ 点阵的有限体积效应很显著, 为了减小误差, 我们仅采用 $t < 50$ 范围内的数据用于测量 θ 的值. 而对于其他点阵, 所取的范围是 $t < 200$.

表 1 $L = 128$ 三角点阵 Ising ($q = 2$) 和 Potts ($q = 3$) 模型对应不同初始磁化强度 m_0 的 θ 值, 及外推至 $m_0 = 0$ 处该临界指数的计算值

m_0	0.04	0.02	0.01	0.00
$q = 2$	0.183(4)	0.183(3)	0.183(3)	0.191(2)
$q = 3$	0.101(1)	0.083(1)	0.082(1)	0.076(1)

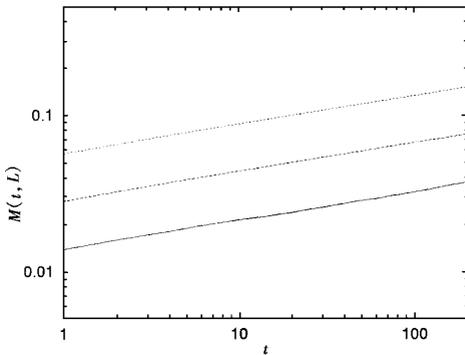


图 1 双对数坐标下 Ising 模型从不同初始磁化强度 m_0 开始随 Monte Carlo 时间 t 演化的 $M(t)$ 曲线, 从上至下分别对应于 $m_0 = 0.01, 0.02, 0.04$

然后我们从完全随机态 ($m_0 = 0$) 下出发来计算点阵大小为 $L = 32, 64, 128$ 的 Potts 模型的自关联函数 $A(t)$ 随时间的演化. 根据 (6) 式, 用计算 θ 的同样方法可得到 λ 的值. 从所得结果发现, 有限体积对 λ 的值有一定的影响, 因此把 $\lambda(L)$ 数据通过外推到 $L \rightarrow \infty$ 极限, 从而得到用于确定临界指数 z 的计算

值 $\lambda = 0.837(1)$. 有了 θ 和 λ 的值, 就可得到动力学临界指数 z 的值: $z = 2.196(8)$. 接着从完全随机态 ($m_0 = 0$) 下出发的磁化强度的演化来计算点阵大小为 $L = 16, 32, 64, 128$ 的 Potts 模型的二阶磁矩 $M^{(2)}(L, t)$, 用整体标度拟合法估计最佳的标度因子 $2^{-2\theta/\nu}$. 图 4 给出了 Potts 模型的二阶磁矩随 Monte Carlo 时间 t 变化的曲线. 重新标度后的二阶磁矩在图中用 $\diamond, +$ 和 \square 符号来表示. 为清楚起见, 仅选了等距的一些数据点.

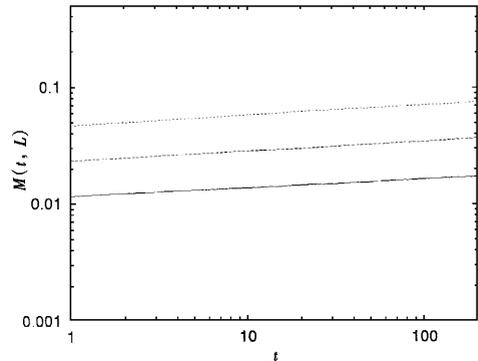


图 2 双对数坐标下 Potts 模型从不同初始磁化强度 m_0 开始随 Monte Carlo 时间 t 演化的 $M(t)$ 曲线, 从上至下分别对应于 $m_0 = 0.01, 0.02, 0.04$

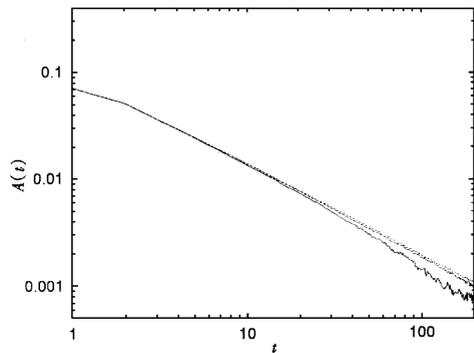


图 3 双对数坐标下 Potts 模型的自关联函数 $A(t)$ 随 Monte Carlo 时间 t 演化的曲线. 从上至下分别对应于 $L = 128, 64, 32$ 点阵, 右下端曲线显示对于 $L = 32$ 点阵出现明显的有限体积效应

对于 Ising 模型, 我们计算了点阵大小为 $L = 16, 32, 64, 128$, 从完全随机态 ($m_0 = 0$) 出发的系统演化的二阶磁矩 $M^{(2)}(L, t)$ 和累积量 $U(L, t)$. 用

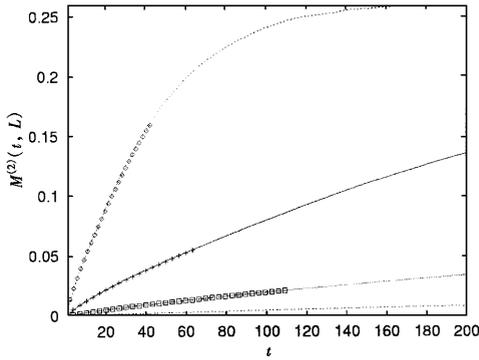


图4 Potts 模型的二阶矩 $M^{(2)}(t, L)$ 随 Monte Carlo 时间 t 演化的双对数曲线(从上至下分别对应 $L=16, 32, 64, 128$ 点阵) ('◇' 对应 $32 \rightarrow 16$; '+' 对应 $64 \rightarrow 32$; '□' 对应 $128 \rightarrow 64$, 分别标出了以(8)式重新标度后的二阶矩 $M^{(2)}(t, L)$ 数据)

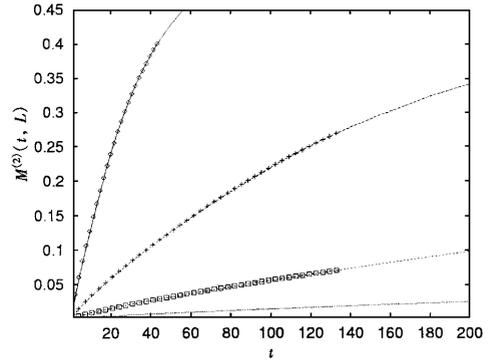


图6 Ising 模型的二阶矩 $M^{(2)}(t, L)$ 随 Monte Carlo 时间 t 演化的双对数曲线(从上至下分别对应 $L=16, 32, 64, 128$ 点阵) ('◇' 对应 $32 \rightarrow 16$; '+' 对应 $64 \rightarrow 32$; '□' 对应 $128 \rightarrow 64$, 分别标出了以(8)式重新标度后的二阶矩 $M^{(2)}(t, L)$ 数据)

整体标度拟合法分别估计出了最佳的标度因子 $2^{-2\beta/\nu}$ 和 2^{-z} . 得到了 z 的值以后, 可以根据二阶矩的标度关系(5)式来计算临界指数 $2\beta/\nu$. 并发现 $16 \leftrightarrow 32, 32 \leftrightarrow 64$ 和 $64 \leftrightarrow 128$ 三套格点拟合的结果在误差范围内是一致的. 如同 Potts 模型, 重新标度前后的 Ising 模型的二阶磁矩和累积量也分别在图 5 和图 6 中以曲线及◇, + 和□符号给出.

表2 三角点阵上 Ising($q=2$) 和 Potts($q=3$) 模型的临界指数 $\theta, 2\beta/\nu$ 和 z 的计算值(本表的右边列出了这两种模型在正方点阵上相应的临界指数的值^[3])

	三角点阵			正方点阵		
	θ	$2\beta/\nu$	z	θ	$2\beta/\nu$	z
$q=2$	0.19(2)	0.25(2)	2.15(2)	0.19(1)	0.24(15)	2.15(3)
$q=3$	0.07(1)	0.26(2)	2.19(1)	0.07(3)	0.26(7)	2.19(8)

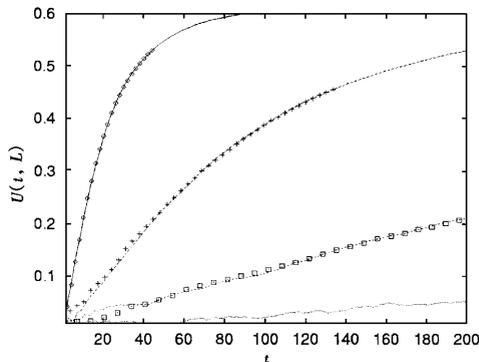


图5 Ising 模型的累积量 $U(t, L)$ 和二阶矩随 Monte Carlo 时间 t 演化的双对数曲线(从上至下分别对应 $L=16, 32, 64, 128$ 点阵) ('◇' 对应 $32 \rightarrow 16$; '+' 对应 $64 \rightarrow 32$; '□' 对应 $128 \rightarrow 64$, 分别标出了以(7)式重新标度后的 $U(t, L)$ 数据)

综合以上所得到的结果, 我们把 Ising 模型和 Potts 模型各个临界指数 $\theta, 2\beta/\nu$ 和 z 在表 2 中列出. 作为比较, 我们也列出了这两种模型在正方点阵上相应的临界指数的值(见文献[3]的表 1 和表 2).

4 讨 论

本文讨论了三角点阵上自旋系统在短时区域的普适性问题. 我们利用数值模拟方法研究了从完全随机态出发的二维三角点阵的 Ising 和 Potts 模型的临界弛豫过程, 并用一阶磁矩 $M(t, L)$ 的指数律计算了它们的临界指数 θ . 再根据 Potts 模型的 θ 以及由自关联指数律求得的 λ 计算临界指数 z . 从累积量 $U(t, L)$ 和二阶矩 $M^{(2)}(t, L)$ 的标度关系我们又分别算出了 Ising 模型的临界指数 z 和两种模型的 $2\beta/\nu$. 我们得到的临界指数在统计误差范围内与正方点阵的相关结果完全一致(表 2), 数值模拟过程中幂指数线性关系结果表明二维三角点阵 Ising 和 Potts 模型在短时动力学过程中仍然满足临界标度律和普适性. 短时动力学蒙特卡罗模拟的优点是克服了通常在临界温度点做蒙特卡罗模拟时产生的临界慢化困难. 通过动力学模拟可以计算得到统计模型的动力学和静力学临界指数(如 θ, z, β 和 ν 等), 从而研究各种模型在临界区域存在普适性和标度律等临界性质. 我们将应用该方法对有关量

子自旋系统开展深入研究.

- [1] H. K. Janssen , B. Schaub , B. Schmittmann , *Z. Phys.* , **B73** (1989) , 539.
- [2] Z. B. Li , L. Schülke , B. Zheng , *Phys. Rev. Lett.* , **74**(1995) , 3396.
- [3] B. Zheng , *Int. J. Mod. Phys.* , **B12**(1998) , 1419.
- [4] A. J. Bray , *Advances in Physics* **A3**(1994) , 357.
- [5] P. Grassberger , *Physica* , **A214**(1995) , 547.
- [6] B. Zheng , *Phys. Rev. Lett.* , **77**(1996) , 679.
- [7] K. Okano , L. Schülke , K. Yamagishi , B. Zheng , *Nucl. Phys.* , **B485** [FS I (1997) , 727.
- [8] L. Schülke , B. Zheng , *Phys. Lett.* , **A204**(1995) , 295.
- [9] H. P. Ying , H. J. Luo , L. Schülke , B. Zheng , *Mod. Phys. Lett.* , **B12**(1998) , 1237.
- [10] K. Okano , L. Schülke , B. Zheng , *Phys. Rev.* , **D57**(1998) , 226.
- [11] Z. B. Li , L. Schülke , B. Zheng , *Phys. Rev.* , **E53**(1996) , 2940.
- [12] D. C. Hohenberg , B. J. Halperin , *Rev. Mod. Phys.* , **49**(1977) , 435.
- [13] H. W. Diehl , U. Ritschel , *J. Stat. Phys.* , **73**(1993) , 1.
- [14] R. J. Baxter , *Exactly solved Models in Statistical Mechanics* , Academic Press , New York , 1982.

A MONTE CARLO STUDY FOR THE UNIVERSALITY IN SHORT-TIME CRITICAL DYNAMICS

WANG LEI¹⁾ GU DE-WEI²⁾ YING HE-PING¹⁾ JI DA-REN¹⁾

¹⁾ *Zhejiang Institute of Modern Physics , Zhejiang University , Hangzhou 310027*

²⁾ *Hangzhou Science and Technology University for Adult , Hangzhou 310012*

(Received 25 April 1999 ; revised manuscript received 28 May 1999)

ABSTRACT

We have studied the finite size scaling and universality of the spin models on the two-dimensional triangle lattice by using the Monte Carlo simulations for the short-time critical dynamics. Our investigation shows that the power-law behavior of the magnetization, the second magnetic moment and the auto-correlation, as well as their finite size scaling relations, can be used to estimate the critical exponents θ , z and β/ν . The results of $\theta = 0.191(2)$, $z = 2.153(2)$ and $2\beta/\nu = 0.252(2)$ for Ising model, and $\theta = 0.076(1)$, $z = 2.191(1)$ and $2\beta/\nu = 0.266(2)$ for Potts model are identical with those for the corresponding models on the square lattice. So the universality proposal in the short-time critical dynamics is verified numerically.

PACC : 7540G ; 7510H ; 7540M