

# 三维随机点阵三态矢量 Potts 模型的 Monte Carlo 模拟\*

季达人 张剑波 应和平

浙江近代物理中心, 浙江大学物理系, 杭州 310027

1991 年 7 月 12 日收到

在三维随机格点阵上对三态矢量 Potts 模型进行了 Monte Carlo 数值模拟, 构造了  $N \times N \times N$  ( $N = 8, 10, 12$ ) 三种不同大小点阵, 分别计算了该自旋系统的能量密度、磁化强度、比热和磁化率等的温度曲线. 结果表明该自旋系统在  $\beta_c \approx 0.16$  处存在着能表征一阶  $Z(3)$  对称破缺相变的能量热滞图和比热陡峰, 磁化强度的跃变规律亦支持该结论, 从而显示出该模型在随机点阵上的相变行为与正方点阵的已有结果的相似性.

PACC: 7510H; 0550

## 一、引 言

自从引入格点规范理论<sup>[1]</sup>作为研究量子色动力学非微扰效应的一种有效手段以来, 通常作为凝聚态和统计物理研究对象的各种自旋系统已愈来愈成为研究粒子理论的重要途径之一. Midgal 和 Polyakov 首先注意并开始了关于二维  $SU(N) \times SU(N)$  手征模型与四维格点规范理论相似性的研究<sup>[2]</sup>, 发现了一系列的对应关系. 我们在二维随机点阵上的一些工作讨论和证实了两者之间的这种相似性<sup>[3]</sup>. 进而,  $(3+1)$  维  $SU(N)$  格点规范理论与三维  $Z(N)$  自旋系统由于具有相同的整体对称性, 后者在研究有限温度 QCD 理论方面起着十分积极和重要的作用.

Yaffe 和 Svetitsky<sup>[4]</sup> 根据  $Z(3)$  自旋模型存在整体  $Z(3)$  对称性破缺相变, 和  $SU(3)$  规范理论的有限温度解除禁闭相变也来源于整体  $Z(3)$  对称性的自发破缺, 提出了两者之间应该存在相同的热力学过程; 并且从三维  $Z(3)$  模型无表征二阶相变的固定点存在, 而存在由数值计算得到的一个  $Z(3)$  对称破缺的一阶相变点<sup>[5]</sup> 等结果预计,  $SU(3)$  规范理论对应地有一个有限温度下从禁闭态到夸克-胶球等离子态的一阶相变点. 在较小点阵上的对  $SU(3)$  规范理论的数值研究结果与 Yaffe 和 Svetitsky 的预计一致<sup>[6]</sup>, 进而在较大点阵上的计算也肯定了这种结论<sup>[7]</sup>. 但是, 困惑的是关于  $SU(3)$  格点规范理论的高精度数值计算, 发现在相变区域附近的关联长度随点阵的增大而增加的发散趋势, 强烈地显示出支持二阶相变的倾向<sup>[8]</sup>. 但关于序参数和能量密度的计算结果

\* 国家自然科学基金资助的课题.

显示存在着亚稳态,支持至少存在“弱一阶”(weakly first-order)相变<sup>[9]</sup>.

从这些已有的研究结果中,可以发现存在着如下两个焦点:其一是关于三维自旋模型与四维规范场论对应关系的普适性的进一步探讨;其二是哪一类物理量(是能量密度,序参数等“bulk”量,还是关联长度量)能更好地揭示该相变特性? Gavai 和 Karsch 的工作<sup>[10]</sup>对三维三态 Potts 模型作了高精度的 Monte Carlo 模拟,同时计算了这两类物理量,结果证实相变点附近亚稳态的存在和关联长度又为有限( $\xi_c = 10$ )的可靠结果.而 Karsch 等人<sup>[11]</sup>则进一步研究了该模型在亚稳态下的性质.因此,一般认为,关于“弱一阶”相变,至少还是应该根据“bulk”量的结果来判别之.

基于这样的研究现状,并注意到至今为止这方面的工作基本上都是在三维正规(立方)点阵上进行的,在随机格点阵上相应的研究将会有怎样的结果?这也是一件有兴趣和有意义的工作.因此,我们构造了三维随机点阵,并对三态矢量 Potts 模型进行了 Monte Carlo 模拟,进一步探讨了三维  $Z(3)$  自旋系统与  $SU(3)$  规范理论的对应关系的普适性.

## 二、模型与随机点阵的构造

三态矢量 Potts 模型的哈密顿量由下式表示:

$$\hat{H} = -\frac{1}{T} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \cos(\theta_i - \theta_j), \quad (1)$$

其中约化温度  $T$  包括了近邻耦合常数因子;  $\{J_{ij}\}$  给出随机格点近邻相互作用权重(以下将给出详细定义);  $\theta_i$  为定义在每个格点上的  $Z(3)$  型自旋变量:  $\theta_i = 2k\pi/3 (k = 0, 1, 2)$ ; 求和  $\langle i, j \rangle$  遍及点阵的最近邻自旋对,其满足的条件在构造随机点阵时确定.(1)式所示的矢量 Potts 模型与标准的三态 Potts 模型的等价性可从下式理解:

$$H = -\frac{3}{2} \beta \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} = -\beta \sum_{\langle ij \rangle} [2 \cos(\theta_i - \theta_j) + \text{常数项}], \quad (2)$$

其中自旋变量  $\sigma_i$  取值为  $\sigma_i = 0, 1, 2$ , 而  $\theta_i = \exp\left\{i \frac{2\pi\sigma_i}{3}\right\}$ .

随机点阵的构造主要步骤为,在一个单位正方体内,随机均匀地给出  $N^3 (N = 8, 10, 12)$  个格点(自旋)的分布,同时加入周期性边界条件,然后开始构造单形(四面体),即格点分别被联结成一个个大小不等的四面体,其条件是各个四面体的四顶点所构成的每个外接球面内必须没有其他任何格点的存在.可以证明<sup>[12]</sup>,这样构成的四面体能没有重叠地布满整个空间,每个格点可作为若干个四面体的顶点,相应地连接各个四面体的四个顶点(两两相连),构成广义近邻链,定义在每个格点上的自旋变量,从而被定义了近邻相互作用耦合.最后按照文献[12],给每条近邻链规定一个相应的权重因子(即(1)式中的  $J_{ij}$ ): 原点阵的对偶点阵上垂直于某链的对偶链长度  $B_{ij}$  除以该链本身长度  $L_{ij}$ , 即  $J_{ij} = B_{ij}/L_{ij}$  (称为自然权重因子).

### 三、Monte Carlo模拟与计算结果

Monte Carlo 模拟分别在上述构造的三种随机点阵上 (分别对应 512, 1000 和 1728 个自旋变量), 对以 (1) 式表示的三态 Potts 模型进行了数值研究. 计算中采用了上述的“自然权重”  $\{J_{ij}\}$  和适用于分立变量模拟的 Heat-bath 迭代方法. 在我们的模拟过程中, 还采用了“淬火”近似条件: 在每一步 MC 迭代中, 仅改变格点上的自旋变量  $\{\theta_i\}$  组态而不变化点阵位置  $\{\mathbf{x}_i\}$  组态. 关于此近似的有效性, 我们在以往的工作中有所讨论<sup>[3,13]</sup>. 它并不影响我们目前所研究的自旋系统的相变特性.

首先, 我们计算了该自旋系统的能量密度和比热的温度曲线, 分别由以下二式定义:

$$\langle E \rangle = \langle E(\beta) \rangle = \frac{1}{2N_s} \left\langle \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \cos(\theta_i - \theta_j) \right\rangle, \quad (3)$$

$$\langle C \rangle = \langle C(\beta) \rangle = -\beta^2 \{ \langle E^2(\beta) \rangle - \langle E(\beta) \rangle^2 \}, \quad (4)$$

其中  $N_s$  为某点阵自旋近邻总数,  $\langle \dots \rangle$  表示其 MC 迭代平均,  $\beta = 1/T$ . 计算区域为  $\beta = (0.0, 0.32)$ , 其步长为  $\Delta\beta = 0.02$ , MC 迭代总数为 10000 次, 最初的 3000 次为初始化迭代过程, 使系统达到平衡态 (以  $\{\theta_i, i = 1, N^3\}$  表示), 余下的 7000 次作为 MC 迭代平均值计算的有效迭代数.  $\langle E \rangle$  和  $\langle C \rangle$  的数值结果分别示于图 1 和图 2.

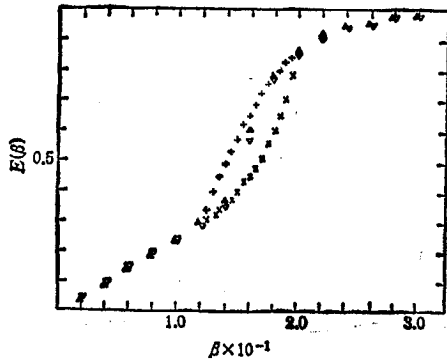


图 1 能量密度  $\langle E \rangle$  的温度曲线和热滞圈  $\blacktriangle$  为  $\beta^2$ ;  
 $\blacktriangledown$  为  $10^2$ ;  $\times$  为  $\rightarrow$ ;  $+$  为  $\leftarrow$

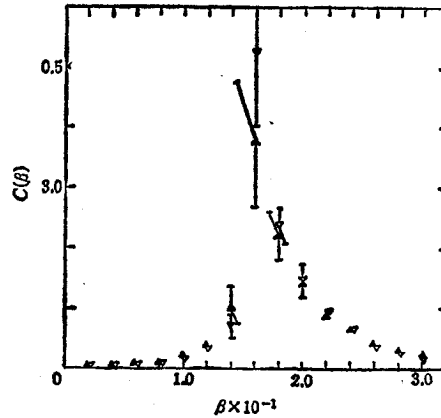


图 2 比热的温度曲线 并显示在两种不同格点阵上峰值的变化趋势; 符号说明同图 1

可以看出, 在  $\beta = 0.16$  附近, 存在一个十分明显随体积增加而迅速变陡的比热峰, 显示出热力学极限下 ( $N \rightarrow \infty$ ) 比热峰发散的趋势, 表现了一阶相变存在的可能性. 为获得进一步的信息, 我们以  $\beta = 0.12$  和  $\beta = 0.20$  组态分别作为无序和有序的初始组态进行了降温 ( $\beta$  增加) 和升温 ( $\beta$  减少) 跑动. 计算中取了  $\Delta\beta = 0.005$  和 MC 迭代数为 500 次, 发现存在一个能量热滞图 (图 1), 证实了亚稳态的存在迹象.

其后, 我们还测量了表征  $Z(3)$  对称破缺的磁化强度  $M(\beta)$  及相应的磁化率  $\chi(\beta)$  曲线<sup>[13]</sup>.

$$\langle M \rangle = \langle M(\beta) \rangle = \frac{1}{N_t} (M_x^2(\beta) + M_y^2(\beta))^{1/2}, \quad (5)$$

$$M_x(\beta) = \left\langle \sum_i \cos \theta_i \right\rangle, \quad M_y(\beta) = \left\langle \sum_i \sin \theta_i \right\rangle, \quad (6)$$

$$\langle \chi \rangle = \langle \chi(\beta) \rangle = \beta \{ \langle M^2(\beta) \rangle - \langle M(\beta) \rangle^2 \}, \quad (7)$$

其中  $N_t$  为每一点阵的总自旋数,  $N_t = N^3$ . 计算结果分别由图 3 和图 4 给出. 在  $\beta_c = 0.16$  附近, 比较  $N_t = 8^3, 10^3, 12^3$  三种点阵的  $M(\beta)$  曲线发现, 该热力学量存在一个从  $M(\beta) = 0^+$  到  $M(\beta) = 1^-$  的跃变, 相应的  $\chi(\beta)$  曲线也存在一个迅速变陡的尖峰, 这些与前面所得的存在一阶相变的迹象符合. 可以基本确定该系统存在一阶  $Z(3)$  对称破缺相变的性质.

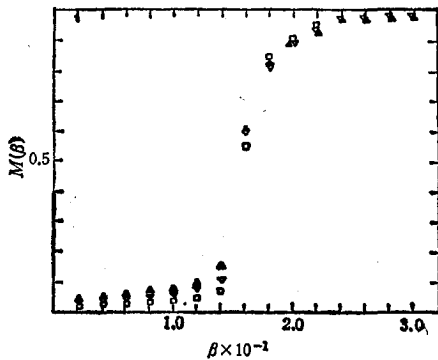


图 3 三种不同点阵上  $\langle M \rangle$  曲线的跃变行为;  
□ 为  $12^3$ ; 其余符号说明同图 1

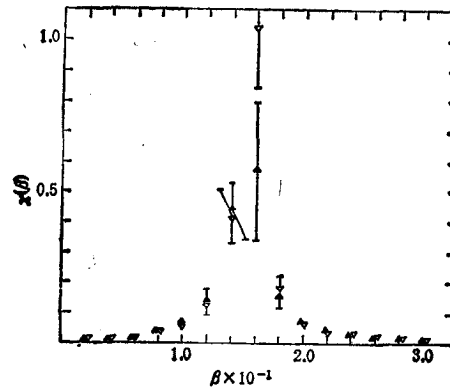


图 4 相应的磁化率变化的温度曲线及其受有限  
体积效应的影响 符号说明同图 1

## 四、讨 论

我们在三维随机点阵上 ( $N_t = 8^3, 10^3, 12^3$ ) 对三态矢量 Potts 模型进行了 Monte Carlo 模拟. 计算结果显示该自旋系统存在一个以“亚稳态”和序参数跃变为表征的一阶相变特性. 这与在三维立方格点上的 Monte Carlo 研究结果一致.

附记 最近我们还完成了三维随机点阵 XY 模型的 Monte Carlo 模拟研究, 发现该系统存在一个二阶相变点, 并以有限体积标度假设推算了相变点位置<sup>[11]</sup>. 比较两类自旋系统 (Potts 和 XY) 的热力学特性曲线, 从已有的结果来看, 有限体积效应对于一阶和二阶临界区域行为的影响有所不同. 对于前者, 引入了周期性边界条件而消除了比热尖峰的发散和减弱了序参数跃变行为; 对于后者, 由于一般的 Monte Carlo 模拟方法的动力学临界指数  $Z > 2$ , 增加体积则引起时间关联长度增加和热力学涨落加强, 从而引起的临界点随体积漂移现象显著.

本研究结束之前, 曾与中国科学院高能物理研究所吴济民老师进行了讨论, 得知他们小组以变分累积展开的解析方法研究了三维立方格点三态 Potts 模型. 直接计算能量密度曲线, 发现在临界点上存在一个较小的有限能隙的跳变事实, 显示该系统具有“弱一阶”相变行为. 我们在有限体积下三维随机点阵的数值计算结果与他们的结论符合.

最后,虽然我们的结果反映出存在一阶  $Z(3)$  对称破缺相变和亚稳态性质,但仍没有直接验证该相变为“弱一阶”相变,直接在较大点阵上测量出关联长度在临界点附近存在较大值但结果有限 ( $\xi_c \approx 10$ ).这是一个值得我们继续去做的工作.

感谢本系计算机室提供的帮助. 计算工作是在 Micro VAX-II 机上完成的.

- [1] K. G. Wilson, *Phys. Rev.*, **D10**(1974), 2445.
- [2] A. A. Migdal, *JETP(Sov. Phys.)*, **42**(1976), 413; 743; A. M. Polyakov, *Phys. Lett.*, **B87**(1979), 87.
- [3] W. Z. Li and J. B. Zhang, *Phys. Lett.*, **B200**(1988), 125; W. Z. Li, H. P. Ying and J. B. Zhang, *Chin. Phys. Lett.*, **4**(1987), 497; **6**(1989), 149.
- [4] L. G. Yaffe and B. Svetitsky, *Phys. Rev.*, **D26**(1982), 963.
- [5] H. W. J. Blote and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.*, **43**(1979), 799.
- [6] J. Kogut *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 869; T. Celik, J. Engels and H. Satz, *Phys. Lett.*, **B129**(1983), 323.
- [7] A. Kennedy, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 87; N. Christ and A. E. Terrano, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 111.
- [8] P. Bacilieri *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 1545.
- [9] F. R. Brown, *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **61**(1988), 2058.
- [10] R. V. Gavai and F. Karsch, *Nucl. Phys.*, **B322**(1989), 738.
- [11] F. Karsch and A. Potkos, Preprint, CERN-TH. 5696/90.
- [12] N. H. Christ, R. Friedberg and T. D. Lee, *Nucl. Phys.*, **B210**(1982), 310; 337.
- [13] J. B. Zhang and D. R. Ji, *Phys. Lett.*, **A151**(1990), 469; H. P. Ying, J. B. Zhang and D. R. Ji, Submitted to *Chin. Phys. Lett.*.
- [14] D. R. Ji *et al.*, Preprint. ZIMP-9103.

## MONTE CARLO SIMULATION OF THE THREE-STATE VECTOR POTTS MODEL ON A THREE-DIMENSIONAL RANDOM LATTICE

JI DA-REN    ZHANG JIAN-BO    YING HE-PING

*Zhejiang Institute of Modern Physics, Department of Physics Zhejiang University, Hangzhou 310027*

(Received 12 July 1991)

### ABSTRACT

We have performed a numerical simulation of the three-state vector Potts model on a three-dimensional random lattice. The averages of energy density, magnetization, specific heat and susceptibility of the system in the  $N \times N \times N$  ( $N=8, 10, 12$ ) lattices were calculated. These results show that this spin system exhibits an energetic thermal hysteresis diagram and a sharp peak of specific, which could show that the system experiences phase transition with 1st order  $Z(3)$  symmetry breaking, this conclusion is supported by the law of the jump of magnetization. These results obtained on the random lattice were consistent with those obtained on the three-dimensional cubic lattices.

**PACC:** 7510H; 0550