

S=1 伊辛模型临界温度的 METROPOLIS 动力学标度计算^{*}

刘策军 严尚维 宋 钢 李伟昌 宋 清

(华南农业大学理学院, 广州 510642)

摘要 考察了平方晶格上自旋 $S=1$ 伊辛模型的两种组态按时序 metropolis 动力学规则随时间的演化, 并分析给出两组态之间的 Damage 量。采用动力学有限尺寸标度计算技术, 得到了模型的临界点。与其它平衡相变理论解结果进行了比较。

关键词 $S=1$ 伊辛模型; 临界温度; metropolis 动力学; 有限尺寸标度计算技术
中图分类号 O 414.2

统计模型的相变研究, 包括 Damage Spreading 方法, 已经应用于几个不同的统计模型中, 并取得较好结果 (Barber et al, 1988; Grassberger, 1995; 刘策军等, 1994; Liu et al, 1996)。

统计模型研究中, 研究最多的是纯自旋 $-1/2$ 伊辛模型, 理论上它最先被严格求解并表明有相变存在, 并可用来描述铁磁相变、格气及 DNA 的融化等 (Baxter, 1982)。混合自旋模型是伊辛模型的一种推广, 它由自旋 $-1/2$ 和自旋 -1 在晶格上相间排列形成, 可作为单轴亚铁磁体模型 (Schofield et al, 1980; 1981), 并得到进一步的推广研究 (唐坤发等, 1988; 刘策军, 1995)。而作为纯自旋 $S=1$ 伊辛模型, 最早由 Fox 等 (1973) 提出, 并得到模型的临界温度的低温级数解、重正化群解 (Fields et al, 1975) 和同普适类等标度变换解 (刘策军等, 1996)。

本文从动力学相变的角度考察自旋 $S=1$ 伊辛模型, 让模型的两种初始组态按同一 Metropolis 动力学随时间演化, 分析给出两者在相同热噪声条件下的 Damage 量。采用动力学有限尺寸标度计算技术 (Neumann et al, 1988), 得到了本文模型的临界温度值。最后与其它平衡相变理论解结果进行了比较。有限尺寸标度计算技术 (finite size scaling technique) 是统计物理学中用蒙特卡罗方法确定统计模型相变的临界点和临界指数的一种有效的计算工具。

1 模型和计算方法

为明确起见, 以平方晶格上自旋 $S=1$ 伊辛模型研究, 考虑一个二维的线度为 L 的平方晶格, 共有 $N=L \times L$ 个自旋格点。各格点自旋以 S_i 代表, 其取值为 $S_i=1, 0, -1$ 。系统的一个自旋组态是

$$C=\{S_i\}, \quad i=1, 2, \dots, N. \tag{1}$$

1996-03-21 收稿

^{*} 华南农业大学校长基金资助课题

系统的哈密顿量由组态 C 决定为

$$H(C) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j, \quad (2)$$

上式 $J > 0$ 为铁磁耦合常数, $S_i = 1, 0, -1$, $\langle ij \rangle$ 表示对最近邻自旋对求和。

考察系统随时间的演化, 令 t 时刻系统的自旋组态 $C(t) = \{S_i(t)\}$ 按下面的时序 Metropolis 动力学规则随时间演化(刘策军等, 1994): 在每一时间间隔 $\Delta t = 1/N$, 从 N 个自旋中随机选取一个自旋 i 并重新随机确定该点自旋值为 $S_i'(t)$ 。这时, 组态中除处于 i 点自旋变成 $S_i'(t)$ 外, 其余各点自旋值保持不变, 记此刻新的组态为 C' :

若 $H(C') \leq H(C)$, 则取 $C(t + \Delta t) = C'$;

若 $H(C') > H(C)$, 则取新态的几率为

$$P = \exp\left[-\frac{H(C') - H(C)}{K_B T}\right] \quad (3)$$

以上 K_B 和 T 分别是玻耳兹曼常数和系统的绝对温度。此时再取一个 $[0, 1]$ 之间均匀分布的随机数 $Z(t)$, 若 $P \geq Z(t)$, 则 C' 被确定, 否则系统仍保持原态不变。不断重复上述过程, 系统随之随时间演化。这里以 N 次随机选取组成一个时间单位, t 增加 1, 即一个 MCS。

为研究动力学相变, 考察两种不同的初始组态 ($t=0$) $C^A(0)$ 和 $C^B(0)$, 它们均按以上的 Metropolis 规则随时间演化, 而且在相同的热噪声环境下进行, 即每一时刻随机选取的格点、自旋取值和随机数 $Z(t)$ 均相同。这样, 两个组态 $C^A(t)$ 和 $C^B(t)$ 演化过程中在系统相空间中的轨迹是相关的, 如两者一旦相会, 则永远合二为一。

为表现这种关联程度, 引入一个称之为 Damage 的量(Barber et al., 1988; Grassberger, 1995), 其意义为两组态 $C^A(t)$ 和 $C^B(t)$ 中对应位置不同态的自旋格点数占总自旋格点数的比例, 记成 $D(t)$ 。对本文 $S=1$ 伊辛模型, S_i 取 $1, 0, -1$ 三个值, 与伊辛模型 (S_i 取 ± 1 两个值) 不同。考虑到每个格点有 6 种可能的 Damage: $(1, -1)$ 、 $(-1, 1)$ 、 $(1, 0)$ 、 $(0, 1)$ 、 $(-1, 0)$ 、 $(0, -1)$ 。通过分析, 不难给出本文 $S=1$ 模型的 $D(t)$ 可写成以下形式:

$$D(t) = D_1(t) + D_2(t), \quad (4)$$

其中

$$D_1(t) = \frac{1}{N} \sum_i |S_i^A(t) - S_i^B(t)|, \quad (5)$$

上式求和对 $S_i^A(t)$ 或 $S_i^B(t)$ 中总有一值为零的自旋格点进行;

$$D_2(t) = \frac{1}{2N} \sum_i |S_i^A(t) - S_i^B(t)|, \quad (6)$$

上式求和中各自旋值均不为零。

显然, $D(t)$ 有赖于系统尺寸 L 、温度 T 、时间 t 、初始条件 $C^A(0)$ 和 $C^B(0)$ 以及热噪声。当系统的两个初始组态 $C^A(0)$ 和 $C^B(0)$ 随时间 t 的增加而不断演化时, 这个 Damage 量随时间 t 也在不断变化, 称为 Damage Spreading。

2 动力学有限尺寸标度技术

对每个样本 S , 计算不同时刻的由(4)式定义的 $D_S(t)$, $t = 1, 2, 3, \dots$, 然后考察以下两个量,

$$\tau_1(L, S, t) = \frac{\sum_t t D_S(t)}{\sum_t D_S(t)}, \tag{7}$$

$$\tau_2(L, S, t) = \frac{\sum_t t^2 D_S(t)}{\sum_t D_S(t)}, \tag{8}$$

τ_1 和 τ_2 有赖于系统尺寸 L 、温度 T 和具体计算的每个样本。(7)和(8)求和总是可以停止的, 因为当某时刻 $D_S(t)$ 等于零时, 此后时刻的 $D_S(t)$ 永远保持为零。

为讨论 τ_1 和 τ_2 的有限尺寸标度形式, 引入一个比率量 R , 其定义是 (Neumann, 1988):

$$R = \tau_2 / \tau_1^2. \tag{9}$$

在温度趋于高温相和低温相之间的临界点 T_c 时, 大尺寸 L 条件下, τ_1 存在下列标度形式

$$\tau_1 \sim U(L) f_1[V(L)(T - T_c), S] \tag{10}$$

其中 $U(L)$ 和 $V(L)$ 在 $T = T_c$ 处与系统尺寸 L 有关。对于连续相变, $U(L)$ 和 $V(L)$ 随 L 按幂函数定律变化。 τ_2 则为下面标度形式

$$\tau_2 \sim U^2(L) f_2[V(L)(T - T_c), S], \tag{11}$$

于是, R 具有下面形式

$$R \sim f_3[V(L)(T - T_c), S], \tag{12}$$

对多个样本平均, 则有

$$\langle R \rangle \sim g[V(L)(T - T_c)]. \tag{13}$$

从(13)式看出, 在大尺寸 L 条件下, 不同尺寸的系统所计算出的与温度 T 有关的曲线 $\langle R \rangle$, 在温度 T 趋于 T_c 时, 将不依赖于系统尺寸 L , 从而在临界点 T_c 处相交于一点。实际计算中, 由于系统尺寸 L 有限, 故相交点会有些分散。

本文的计算是在华南农业大学计算中心日本产 FACOM M340S 中型机上完成。为节省计算时间, 与以往工作一样, 仅计算从高温相趋近 T_c 时的 $\langle R \rangle$ 值, 从而确定临界温度。

3 计算结果和分析

计算取下面初始条件进行 (Barber et al, 1988): $t = 0$ 时, 组态 $C^A(0)$ 和 $C^B(0)$ 均无规选取且相互独立。

图 1 为平方晶格上 $S = 1$ 伊辛模型由本文方法得到的 $\langle R \rangle - T$ 动力学有限尺寸标度数值计算结果。图中的 T 以 J/K_B 为单位。计算中取 $L = 10, 20$ 和 40 大小的晶格进行。用来平均的样本数分别选取 1 000、800 和 500 个。取周期边界条件。

从图 1 可定出模型的临界点为

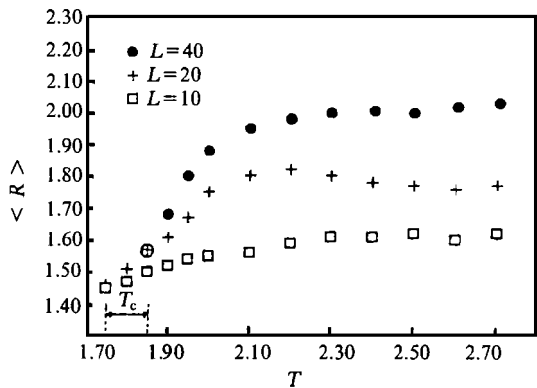


图 1 比率 $R = \langle \tau_2 / \tau_1^2 \rangle$ 随 T 的变化关系
 $L = 10, 20$ 和 40 的系统在 $\frac{K_B T}{J} = 1.80 \pm 0.05$ 内相交

$$\frac{K_B T_C}{J} \simeq 1.75 - 1.85. \quad (14)$$

为了能与以前结果比较, (14)式改写成

$$\frac{J}{K_B T_C} \simeq 0.541 - 0.572. \quad (15)$$

Fox 等(1973)的低温级数解是

$$\frac{J}{K_B T_C} \simeq 0.592 \quad (16)$$

Field 等(1975)的实空间重正化群解是

$$\frac{J}{K_B T_C} \simeq 0.800. \quad (17)$$

同普适类等标度变换解(刘策军等, 1996):

$$\frac{J}{K_B T_C} \simeq 0.661. \quad (18)$$

比较(15)~(18)式可见, $S=1$ 伊辛模型临界温度的 Metropolis 动力学标度计算结果与其它平衡相变理论解结果十分接近。由于 $S=1$ 伊辛模型数学上没有得到其严格解, 所以, 本文的结果使我们对该模型发生相变的温度精确值所处的范围有更全面的认识, 具有一定的理论上的意义。

参 考 文 献

- 刘策军. 1995. Unionjack 晶格上混合自旋模型临界温度与自旋耦合作用的关系. 华南师范大学学报, 2: 35 ~ 39
- 刘策军, 陈代森. 1996. 一种复杂的混合自旋模型. 暨南大学学报, 17(1): 24 ~ 29
- 刘策军, 胡嘉桢. 1994. 混合自旋模型的动力学相变. 计算物理, 11(4): 439 ~ 443
- 唐坤发, 胡嘉桢. 1988. 推广伊辛自旋模型的临界温度曲线. 物理学报, 37(1): 132 ~ 134
- Baxter R J. 1982. Exactly solved models in statistical mechanics. London: Academic press 39 ~ 48
- Barber M N, Derrida B. 1988. Dynamical phase transitions in the two-dimensional ANNNI model, J Stat Phys, 51: 877 ~ 881
- Liu Cejun, Hu Jiazhen. 1996. Dynamical phase transitions in the disordered 2D XY model commun. Theor Phys 25(2): 179 ~ 182
- Fox P F, Guttman A J. 1973. Low temperature critical behaviour of the Ising model with spin $S > 1/2$. J Phys C, 6: 913 ~ 915
- Fields J N, Fogel M B. 1975. Real-space renormalization on a 3-D Ising model. Physical A, 80: 411 ~ 416
- Grassberger P. 1995. Damage Spreading in the Ising model with Glauber dynamics. J Phys A, 28: L67 ~ L69
- Neumann A U, Derrida B. 1988. Finite size scaling study of dynamical phase transitions in two dimensional models: Ferromagnet, symmetric and no symmetric spin glasses. J de Physique, 49: 1647 ~ 1650
- Schofield S L, Bowers R G. 1980. Renormalisation group calculation on a mixed-spin system in two dimensions. J Phys A, 13: 1137 ~ 1141
- Schofield S L, Bowers R G. 1981. High-temperature series expansion analyses of mixed-spin model. J Phys A, 14: 2163 ~ 2169

METROPOLIS DYNAMICAL FINITE SIZE SCALING CALCULATION OF CRITICAL TEMPERATURE IN THE $S=1$ ISING MODEL

Liu Cejun Yan Shangwei Song Gang Li Weichang Song Qing

(Faculty of Science, South China Agr. Univ., Guangzhou, 510642)

Abstract

The evolution of the Damage between two configurations submitted to the same sequential metropolis dynamics for the Spin-1 Ising model on a square lattice is studied. Using the dynamical finite size scaling techniques the transition temperature for the model is determined and is in contrast with other solutions.

Key words $S=1$ Ising model; Critical temperature; metropolis dynamics; finite size scaling technique

简 讯

加速热带退化土地本地森林恢复研讨会

(1996年6月11~14日;美国首都华盛顿特区)

1996年6月11~14日,在美国首都华盛顿特区召开了由世界银行(The World Bank)、美国农业部林业处—热带森林国际研究所(USDA Forest Service—International Institute of Tropical Forest)主办、印度尼西亚国际森林研究中心(Center for International Forestry Research, Indonesia)和英国海外发展管理局协办(Overseas Development Administration)的题为“加速热带退化土地本地森林恢复研讨会”(Symposium on Acceleration Native Forest Regeneration of Degraded Tropical Lands)。参会正式代表共76人,分别来自美国、哥斯达尼加、哥伦比亚、墨西哥、阿根廷、巴西、澳大利亚、英国、芬兰、中国、菲律宾、泰国、印度尼西亚、印度、刚果等国家和地区,宣读论文29篇。与会共有三位中国代表宣读了论文4篇:其中,中国科学院华南植物研究所留美博士研究生方炜宣读了2篇关于该所在热带退化海岸小良的研究论文;另2篇文章是报道香港退化山地森林恢复与发展的历史、现状和机理的研究。我校庄雪影博士应邀参加了这次研讨会,并在会上宣读了其论文“Rehabilitation and development of forest on degraded hills of Hong Kong”。中国学者们的报告点面结合,互为补充,均获好评。

这次研讨会的论文对当前在热带土地天然林恢复和发展方面所存在的问题进行了探讨,并穿插了两组专题讨论:第一组侧重于探讨若干理论假设的普遍性,这些理论假设包括样地最初立地条件、区域性植物区系类型、造林树种的选择、造林手段、野生动物对林下植被多样性的影响等;第二组侧重于探讨一系列世界联网研究的成果在生产性林业(Commercial Forestry)、恢复性林业(Restoration Forestry)、保护性林业(Protection Forestry)、社区性林业(Community Forestry)和农林业生态系统(Agroforestry Systems)等方面的应用潜力。这次研讨会所探讨的问题都是当今世界在恢复热带退化土地研究方面的研究热点,对我们了解世界性研究动态和继续开展我国热带和亚热带退化土地森林恢复的研究工作提供了丰富的信息。这次研讨会安排紧凑、信息量大,中国代表一致认为不虚此行。

(资源环境学院 庄雪影 供稿)

第17卷卷终