

1 引言：本书的目的和范围 及一些一般性的评述

近年来，“计算机模拟”方法已经引发了几乎可以说是一场科学革命；物理学（以及化学、生物学等等）按照老式划分为“实验”分支和“理论”分支这种分法已不再是完备的了。“计算机模拟”已变成第三个分支，它同前两种传统方法互相补充。

那么，计算机模拟或“计算机实验”的特殊意义何在呢？这个问题的答案很简单，那就是计算机模拟对于得到精确描述的模型系统（对于统计物理学问题，这意味着描写哈密顿量的各个参量已一无遗漏地明确知道）能够给出精确的信息（除统计误差外，但是至少在原则上可以使这些统计误差任意小）。

反之，解析理论提供的信息只在很少的情况下是精确的，而在大多数其他情况下，都需要用不受控制的近似。例如，三维情形下可解的统计物理学问题只限于一些理想化的极限情况，如理想气体或理想溶液、耦合简谐振子等。即使很简单的统计力学模型，如三维 Ising 模型，也不能精确求解，而对于原子自由度之间为真实势的模型，所知就更少了。因此，常常设计计算机模拟以检验对一个模型进行解析处理时所作的一些近似的精度。

同样，实验提供的数据在下述意义上也绝对不是精确的：如果“精确的”意味着精确知道一个给定的实验样品的有效哈密顿量。有时甚至会争论实验观察到的某些现象究竟是固有的还是由某些未知的杂质效应引起的——记住，一种实验样品的化学成分只可能近似知道。这些只是几个例子。从这些例子清楚看出，解析理论和实验之间的比较，并不总是导致确定无疑的结论，还需要用模拟

来沟通理论和实验的隔阂。而对一个模型的模拟同实验之间的直接比较，则不受不精确的近似（它们常常是解析理论中不可避免的）的牵累，从而可以更确定无疑地表明，这个模型是否忠实地代表实际系统。

当然，这绝不是计算机模拟富有吸引力的唯一原因。还应看到，模拟提供的关于模拟系统的信息可以任意详尽，不管什么物理量，只要研究者认为它有用，就可以设法从模拟对这个量进行“抽样”。例如，散射技术应用于真实系统时，通常给出关于二粒子关联函数的信息，要得到关于三重关联或高阶关联的直接实验信息是很困难的。但是，模拟却能轻易地给出这些高阶关联，至少在原则上是这样。还有，实验工作者可以改变他的样品的温度和压力，可是要他估计原子间位势变化的效果，就不那么容易了。而对于计算机模拟来说，任意改变原子间位势并不是什么大困难。现在就很清楚了，计算机模拟方法的确很重要；它是理解自然规律的一种有效的研究手段，对它的从事者很有教益，与理论或实验互相补充。

情况既然是这样，这方面的文献有爆炸性的增长，也就不足为奇了。许多以前从事理论物理学(或理论化学、理论生物学等)研究的科研工作者开始搞计算机模拟，一些实验工作者也一样。最后，但并非最不重要的一点是，许多并不具有任何其他科研经验的学生，也立即被吸引到计算机模拟的领域中来了。

但是，表现出来的这种巨大兴趣遇到了一个严重的困难：到现在为止，在大学中还很少讲授模拟方法，并且也缺乏系统的教科书，而通过这样的教科书，那些新进入这一领域的人可以很容易地学会，变成一个熟练的从事者。虽然本书的作者之一(K.B.)曾经主编过两本书，它们收集了蒙特卡罗计算机模拟方法在统计物理学中的许多应用，但这两本书并不是能够使其读者容易学习一个新领域的教科书。另一位作者(D.W.H.)写过一本更着眼

于教学法的对计算机模拟方法的一般性说明；但是，由于它的一般性，该书未能深入细致地讨论对相变和有关问题（逾渗、随机行走、聚合物、生长现象等）的蒙特卡罗研究，对其他方法（如“分子动力学”方法）的介绍也有同样的问题，或者受到其他的限制。于是，迄今为止蒙特卡罗模拟的“技艺”主要是通过两条途径来学习和传播的，即：或者通过对许多原始论文（其发表时间回溯到几十年前）冗烦的比较研究，或者通过同熟练的从事者之间的私人交流。

本书的目的是要填补（至少是部分地填补）这个空白，因此从一开始，我们就把本书的范围限于计算机模拟的一种方法，即蒙特卡罗方法，而不是试图覆盖整个领域。对范围的这一限制有好几个原因：首先，两位作者的专长主要是在这一方面；其次，加了这个限制之后，就可以现实地采用本书作为一门持续一学期每周两小时的关于计算机模拟的大学课程的教科书。它也适合于用作一个两星期长的计算机模拟讲习班的教材，讲习班的学员在这两个星期的时间里可以每天上机实习，从而在一门紧凑的强化课程中学习蒙特卡罗方法。最后，对一个试图只依靠自学来学完本书的学生或科研工作者，这项任务仍然是有可能完成的！

同以往的关于蒙特卡罗模拟的文献不同，本书对该方法的理论基础（包括结果的分析）和用该方法做的实际作业给以同样的权重。如何进行“计算机实验”是必须学习的，正如实验工作者要通过参与实际进程来学习如何设计实验并用实际系统建立实验，以及评估从实验得到的数据。本书作者和他们的许多同事，曾多次遇到这种对实际作业的需要，以通过它学习如何实现这样的计算机实验。事实上，本书的初稿——一些未正式出版过的讲义，曾于1987年9月在葡萄牙的 Figueira da Foz 举办的计算机模拟讲习班上，以及在 Mainz 大学开设的一些课程上，相当成功地使用过，因此，对学生讲授蒙特卡罗方法的实际教学经验是决

定本书内容的一个主要因素。我们的经验是，永远可以假定学生具有一种程序设计语言如 PASCAL 的背景知识，以及统计力学的一些知识，包括相变的基本原理。如果读者对诸如“临界指数”和它们之间的“标度关系”这样的概念以及像 Ising 模型和逾渗之类的模型还不熟悉，他很容易找到清晰地阐述这些概念的教材（我们在本书中要提到一些），因此就没有必要重复这些基本概念。

使用本书时，理论部分（本书的第 2 章）和“实际作业指南”（第 3 章）的互相配合是至关重要的。这两章都讨论相同的题目（简单抽样、随机行走和自回避行走、逾渗、Ising 模型等），但是观点有所不同。在前一部分引进并解释了用来对这些问题进行数值处理的概念；后一部分则把这些概念应用于具体问题，它要求读者积极参与（即在个人计算机上做这些题目）以更深刻地理解这些概念。

特别适合于做到这一点的方式是一个“讲习班”的形式，这个讲习班采用本书为教学指导书。先提出对一个问题的解决方法并立即加以试验，然后再对解这个问题的方法即算法进行改进。当然，讲习班要办得效果最好，必须依靠学员与教师之间以及学员相互之间的交流。讲习班的每个成员都将因所得到的反馈而受益。采用一份书面教材，讲习班的效率会低一些。然而，我们已使本书具有这样的结构，使读者有可能而且有必要对本书不是消极地阅读，而是与本书有某种形式的交流。

我们的目标是介绍足够的材料，使读者能够在所述概念的基础上，着手开发解决其他问题的算法。为了达到这个目标，必须从头到尾做全部内容。因此这个“讲习班”（第 3 章）是一个单独的单元。第 3 章的另一个目标是介绍数据分析方法，使读者熟悉如何应用这些方法。这仍然要求读者积极参与。

既然本书是按照上述想法写的，两章有很强的相互关联，那

么内容上的某些重复便是不可避免的，从叙述的清晰和连贯性来考虑甚至是必要的。事实上，本书讨论的全部方法的科学背景都已在其他文献中叙述过，本书的新颖之处以及和以往的工作完全不同之处在于它的引论性质，它要顺利地引导学生去熟悉用蒙特卡罗方法做的许多实际工作和经验。为了这个教学法目的，内容的少许重复甚至是我们所希望的。我们故意选用统计物理学中一些非常简单的问题，例如随机行走和自回避行走、逾渗和 Ising 模型，这些问题比较容易说明和演示全部概念和方法，而不在本书中讨论那些更复杂的问题，像具有实际势的流体、自旋玻璃及其他无序材料、量子力学蒙特卡罗方法或点格规范理论中的问题。我们认为，读者在从头至尾学完本书之后，借助于已有的关于蒙特卡罗方法的其他书籍，是能够转到这些问题上来的。我们对具有离散自由度的点格问题（Ising 模型、Potts 模型等）和连续自由度的点格问题（Heisenberg 磁体和 XY 磁体、 ϕ^4 模型等）的热平均的特性讨论到一定深度，而对非点格问题如简单流体只简短地提一提。书中特别注意理解计算机模拟方法的局限性（有限尺寸和边界条件引起的效应、有限观测时间效应、自平均问题），以及人们为克服这些局限性所作的努力：例如，如果引用适当的有限尺寸标度理论，二级相变和一级相变时的有限尺寸效应可以用作研究系统的大块性质的有用工具。书中也讨论了蒙特卡罗重要性抽样的动力学解释。我们看到，虽然一方面隐含着一一种不希望看到的收敛变慢现象，特别是在临界点附近（临界慢化）和玻璃态系统中；但另一方面，蒙特卡罗方法却成为研究随机模型的动态行为的唯一工具。

2 蒙特卡罗方法的理论基础及其 在统计物理学中的应用

在本章中，我们首先引进蒙特卡罗抽样的基本概念，介绍蒙特卡罗程序应当怎样组织的一些细节，进而讨论蒙特卡罗计算结果的解释和分析。

2.1 简单抽样对重要性抽样

2.1.1 各种模型

统计物理学是同具有许多自由度的系统打交道。统计物理学提出的一个典型问题，是假定一个系统的哈密顿量已知，计算该系统的“平均”宏观可观察量。例如，我们考虑磁性系统：如果一块铁磁体具有很强的单轴各向异性，我们可以用 Ising 模型来描写它，其 N 个自旋以下述方式相互作用：

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1, \quad (2.1.1)$$

其中格点 i 上的自旋 S_i 可以沿着“易磁化轴”指向上或向下，

(2.1.1) 式中的交换能只限于最近邻之间， H 是外磁场， $-H \sum_i S_i$ 项描述系统的 Zeeman 作用能。但是，如果铁磁体具有平面各向异性（自旋取向限于 xy 平面内：XY 模型），或者完全各向同性（Heisenberg 模型），情况便会不同：

$$\mathcal{H}_{\text{XY}} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - H_z \sum_i S_i^z, \quad (2.1.2)$$
$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1;$$

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - H_z \sum_i S_i^z, \quad (2.1.3)$$

$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1.$$

当然，实验工作者在其实验室中可以制备大量的形形色色的材料，这就引起了对这些模型的多种变型的兴趣：代替(2.1.1)式中所隐含的自旋量子数 $S = 1/2$ 或(2.1.2), (2.1.3)式中隐含的 $S \rightarrow \infty$ ，我们可能想要考虑一般的自旋量子数；代替只考虑最近邻之间的交换作用，我们可能想要把次近邻、第三级最近邻等等之间的交换能也包括进来；代替(2.1.3)式中的完全各向同性，可能需要对它加上一个单轴或平面各向异性项；代替(2.1.1)式中的均匀交换能 J 和均匀磁场 H ，改用随机的交换常数 J_{ij} 和随机场 H_i ，也许是合适的，以模拟该系统中的某种冻结的随机无序性。因此，单是磁性固体就已向我们提供了不可胜计的模型哈密顿量，(2.1.1) — (2.1.3) 只不过是这些哈密顿量的一些例子，而大量的模型又只是凝聚体物理学所提供的广阔应用的一小部分。

统计物理学的一个任务是从模型哈密顿量计算出所要的各种平均性质，例如每个自由度的平均能量 E 或平均磁化强度 M ，

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle_T / N, \quad M = \left\langle \sum_i S_i^z \right\rangle_T / N. \quad (2.1.4)$$

其中 $\langle \rangle_T$ 代表热平均，任何可观察量 $A(\mathbf{x})$ ，例如 $A = \mathcal{H}$ ， $\sum_i S_i^z$ 等等， \mathbf{x} 是相空间中的矢量，代表描述所考虑的自由度的一组变量的集合，例如对(2.1.1)式 $\mathbf{x} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ ，对(2.1.3)式 $\mathbf{x} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ 的热平均在正则系综中由下式定义：

$$\langle A(\mathbf{x}) \rangle_T = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T] A(\mathbf{x}), \quad (2.1.5)$$

$$Z = \int d\mathbf{x} \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T].$$

把这一类问题叫作“统计物理学”是合适的，因为归一化的 Boltzmann 因子

$$P(\mathbf{x}) = \frac{1}{Z} \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T] \quad (2.1.6)$$

起着概率密度的作用，它描写位形 \mathbf{x} 出现在热平衡中的权重。

虽然(2.1.6)式在形式上给出了概率分布 $P(\mathbf{x})$ 的一个精确描述，但是还是有麻烦：我们既不对如此详细的信息感兴趣（在我们的例子中 \mathbf{x} 代表一个包含 N 个自旋自由度的集合），也不可能一般情况下算出这样一个高维空间中的积分(2.1.4), (2.1.5)。

2.1.2 简单抽样

平衡态统计力学中的蒙特卡罗方法的出发点，是要近似计算精确方程(2.1.5)式。(2.1.5)式中的积分是在一切态 $\{\mathbf{x}\}$ 上按每个态的固有权重 $P(\mathbf{x})$ 来求积的，我们想要用一个只在相空间点的一个特征子集合 $\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M\}$ 上求和的和式来近似，这些相空间点 $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M$ 用作一个统计抽样。显然，如果考虑极限情况 $M \rightarrow \infty$ ，那么离散的和式

$$\overline{A(\mathbf{x})} = \frac{\sum_{i=1}^M \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x}_i)/k_B T] A(\mathbf{x}_i)}{\sum_{i=1}^M \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x}_i)/k_B T]} \quad (2.1.7)$$

一定会趋近(2.1.5)式，正如在数值积分中积分被换成求和一样（对于离散自由度的情况，比如 Ising 问题，(2.1.5)式中的 $\int d\mathbf{x}$ 当然已经是代表对全部 2^N 个态 $\mathbf{x} = (S_1, \dots, S_N)$ 的离散求和，但(2.1.7)式中我们是想只用这些态的一个小子集来计算， $M \ll 2^N$ ）。但是，与计算一维积分 $\int f(x) dx$ （其中 $f(x)$ 的变元只是一个实变

量 x ，而不是一个高维矢量 x 的。② 准常规做法不同，在这里根据一个规则点格来选择各点 x_i 是没有意义的，反之我们必须随机选取 x_i 。为了更细致地理解这一点，让我们考虑(2.1.2)式中定义的 XY 模型作为一个例子。因为在每个座点 i 上 $(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1$ ，写成

$$S_i^x = \cos\varphi_i, \quad S_i^y = \sin\varphi_i, \quad 0 \leq \varphi_i < 2\pi.$$

并取角度 φ_i 作为描写各自由度的变量将会带来方便。于是 $\int dx$ 就意味着 $\prod \int_0^{2\pi} d\varphi_i$ 。现在让我们引进一个由

$$\varphi_i^y = (\gamma_i/p) \cdot 2\pi, \quad \gamma_i = 1, 2, \dots, p,$$

定义的规则点格，其中 p 是一个描写点格特征的整数。显然这个格子中所用的点的总数是 p^N ，当 N 大时这是一个非常大的数，即使 p 相当小也不可能在实际中使用。除了这个困难之外还有一个问题：即使我们能够用合理大小的 p 值工作，这样选取的点几乎全部都在积分区域超立方体的表面上，其内部几乎没有点。由于在超立方体的任何一个格子方向上有 p 个格点，其中有 $p-2$ 个点在立方体内部，因此内部点所占的总份额为

$$\begin{aligned} [(p-2)/p]^N &= (1-2/p)^N \\ &= \exp\left[N \log\left(1 - \frac{2}{p}\right)\right] \underset{p \rightarrow \infty}{\approx} \exp\left[-\frac{2N}{p}\right] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0. \end{aligned}$$

如果我们用计算机内的“随机数发生器”所产生的“伪随机数”来随机地选取点 x_i ，就会得到一个好多亦即均匀得多的格点分布。正是由于用了随机数，使这个方法得到了蒙特卡罗* 这一名称！实际上，由(2.1.7)式描述的方法是多种蒙特卡罗方法中的一种型式，即简单抽样蒙特卡罗方法。

* 蒙特卡罗 (Monte Carlo) 是摩纳哥公国的有名赌城。——译者

2.1.3 随机行走和自回避行走

作为曾经实际使用过并且仍然在继续使用简单抽样技术的那类问题的一个例子，我们要提到对点格上自回避行走 (self-avoiding walks, 简称为 SAW) 问题的研究，参看文献[2.1]。这种自回避行走是用来作为溶液中长而柔顺的大分子的大尺度性质的模型 [2.2-2.4]。用简单抽样蒙特卡罗方法研究这类随机行走问题既有优点又有缺点，对这些优点和缺点作一番讨论是很有教益的，因此下面我们暂时偏离正题对随机行走问题作一简短介绍。

图 2.1 示出在方形点格上的不同类型的随机行走。一共有四种不同的矢量 $\mathbf{v}(k)$ 把一个座点同它在点格上的最近邻相连接 (格子间距取为 1)：

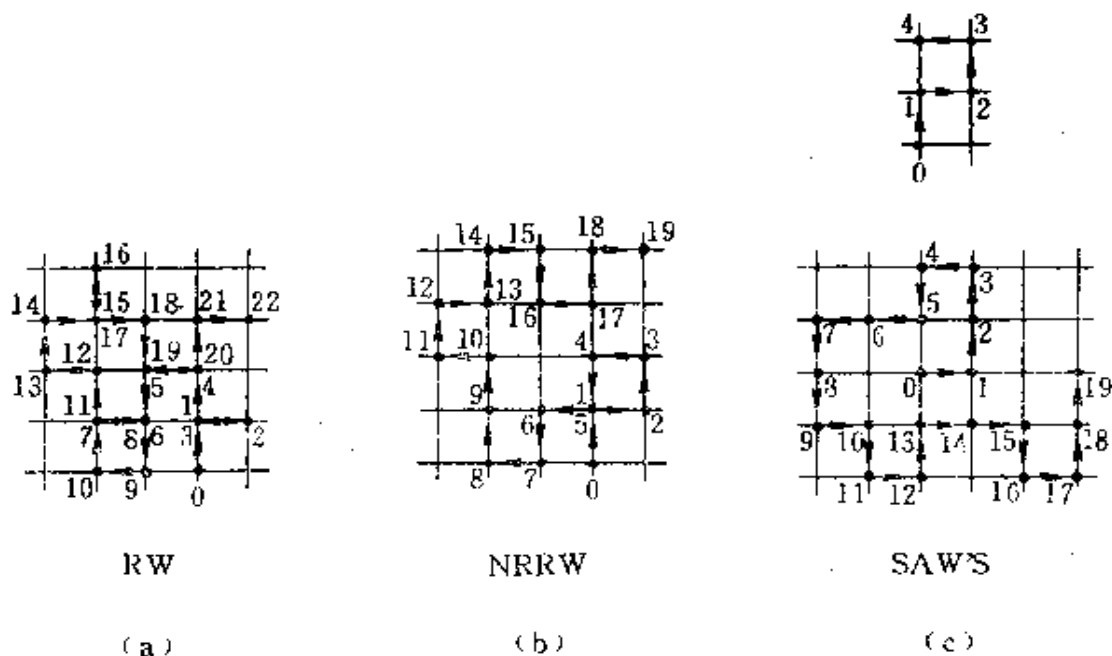


图2.1 (a) 方格子上一长22步的无限制的随机行走(RW); (b) 一次不退行的随机行走(NRRW); (c) 两次自回避行走(SAW), 座点按照它们被访问的次序编号, 带箭头的键是用随机数依次选定的, 点格座点上的黑点代表聚合物链上的单体

$$\begin{aligned} v(1) &= (1, 0), & v(2) &= (0, 1), \\ v(3) &= (-1, 0), & v(4) &= (0, -1). \end{aligned} \quad (2.1.8)$$

一个产生简单的(无限制的) N 步随机行走的算法如下:

算法 2.1 随机行走

-
- | | | |
|--|---|---------|
| <ul style="list-style-type: none"> i) 取 $r_0 = 0$ (坐标系原点), 并令 $k = 0$. ii) 取一个在 1 和 4 之间的随机整数 ν_k. iii) 把 k 换成 $k + 1$, 并令 $r_k = r_{k-1} + v(\nu_{k-1})$. iv) 若 $k = N$, 令 $r_k = R$ (行走的起点到终点的距离, 以下简称端距); 否则回到第(ii)步. | } | (2.1.9) |
|--|---|---------|
-

用这个算法产生的一个 $N = 22$ 的行走的例子 如图 2.1(a) 所示; 随机行走的产生将在第 3.2.1 节中更详细地研究. 在这里我们只注意一点: 对于配位数为 z 的一个点格, 这样的(不同的)随机行走(RW)的总数 Z_N 为

$$Z_N^{\text{RW}} = z^N. \quad (2.1.10)$$

如果这种随机行走是作为一个聚合物链的模型, 那么 Z_N 便是聚合物的配分函数(在没有任何相互作用时, 聚合物链的所有位形有完全相同的统计权重).

虽然算法 2.1 可能是固体中漂移导电性或其他理想点格上的扩散过程的一个合理的模型, 但是它并不是溶液中的聚合物的一个良好的模型. 这倒并不是因为它使用了一个点格结构来模拟一个大分子的构形这一不现实的做法, 而主要是因为, 它忽略了体斥效应(一个单体占据了一个座点, 则这个座点上不能有其他单体)这一相互作用. 和实际聚合物不同, 图 2.1(a)中的随机行走自己会同自己交叉, 刚走的一步也可能会同上一步叠合. 后一点可以通过定义一个不退行的随机行走 (nonreversal random walk, 简称为 NRRW) 来消除, 所谓不退行的随机行走, 就是禁止在每一步行走后立即倒退. 我们可以为这种 NRRW 定义出一种算法如下. 对矢量 $v(\nu_k)$ 引入某种“周期性”边界条件

$$v(v \pm 4) = v(v) \quad (2.1.11)$$

并把(2.1.9)中的第(ii)步修改为(通过引进一个保留一步的记忆):当 $k > 1$ 时,

ii') 从一组三个数 $\{\nu_{k-1}-1, \nu_{k-1}, \nu_{k-1}+1\}$ 中随机地选出一个, 并取它为 ν_k . (2.1.12)

NRRW 的另一种实现方法同(2.1.9)相同, 但是第(ii)步产生的 ν_k 若 $v(\nu_k) = v(\nu_{k-1}+2)$ 则弃去, 有必要时用(2.1.11)式, 再重复第(ii)步. 使用这个方法, 用产生出图 2.1(a)中 $N=22$ 的RW 的同样的随机数将产生出图 2.1(b)中 $N \approx 19$ 的NRRW. 从(2.1.12)我们知道

$$Z_N^{\text{NRRW}} = (z-1)^N. \quad (2.1.13)$$

现在, 读者应当做完第 3.2.2 节的作业, 通过实际工作得到对NRRW 的深刻理解. 显然, NRRW 算法得出的链式结构仍然会自相交, 前面讲过, 这一点同真实的大分子结构在性质上不符合. 我们可以改变算法产生自回避行走(SAW)以代替NRRW, 办法是在(2.1.9)内的第(iii)步和第(iv)步之间增加进一步的条件:

iii) 如果 r_k 通到本次行走已访问过的一个座点, 那么停止建造过程, 回到(i), 一切从头再来一次. (2.1.14)

经发现, 这时的组态总数不再是(2.1.10)式或(2.1.13)式中那样的简单指数形式, 只有在 $N \rightarrow \infty$ 的渐近极限下才有一个较简单的形式成立, 即使在这种情况下还包含一个幂律形式的改正项:

$$Z_N^{\text{SAW}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} N^{\gamma-1} z_{\text{eff}}^N, \quad z_{\text{eff}} \leq z-1. \quad (2.1.15)$$

注意 γ 是一个临界指数, 并且有效配位数 z_{eff} 一般不是整数(只有当 $z=2$ 时, 即一维点格情形, $z_{\text{eff}} = z-1$). 对于三维点格情形, 不论 γ 还是 z_{eff} 都不能用解析方法精确算出; 因此, 在估算描述SAW 统计性质的这些参量时, 蒙特卡罗方法起着重要的作用.

图2.1(c)表明, 用来建立RW或NRRW例子的那些随机数,

若用来建立SAW,在第5步上就会使它结束。因此根据(2.1.14),这次建立SAW的尝试是不成功的,需要再试一次。显然,当 N 大时,大部分尝试不会成功。我们可以估算出成功的尝试所占的份额(即一个 N 步的NRRW是自回避的概率 p_N),这只要取各自的配分函数的比就行了:

$$p_N = \frac{Z_N^{\text{SAW}}}{Z_N^{\text{NRRW}}} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} N^{\gamma-1} \left(\frac{z_{\text{eff}}}{z-1} \right)^N \\ = \exp \left(-N \ln \frac{z-1}{z_{\text{eff}}} + (\gamma-1) \ln N \right). \quad (2.1.16)$$

于是,当 N 大时,成功地得到SAW的概率随 N 以指数速度减小,这种效率低下的情况称为损耗(attrition)问题。因此,SAW的这种简单的随机抽样方法的实际应用只限于 $N \leq 100$ 。请看图2.2作为一个例子。这个例子中考虑一个作了某些推广的问题:除了体斥相互作用之外,如果两个单体占据格子上的最近邻座点,还加进一个吸引能 $(-\varepsilon, \varepsilon > 0)$ 。这时,我们有兴趣研究链的内能 $\langle \mathcal{H} \rangle_T$ 和链的平均线度(比如 $\langle R^2 \rangle$)同约化温度 $k_B T / \varepsilon$ 的函数关系,因为当 $N \rightarrow \infty$ 时在 $T = \theta$ 发生链的所谓拢缩(collapse)转变^[2.1-2.3];对于 $T > \theta$,链的线度比简单随机行走所成的链的线度要“胀大”一些,后者简单地是

$$\langle R^2 \rangle_T^{\text{RW}} = N. \quad (2.1.17)$$

而取代(2.1.17)式;对于自回避行走,我们有一条含有另一个临界指数(ν)的规律

$$\langle R^2 \rangle_T^{\text{SAW}} \propto N^{2\nu}, \quad \nu \approx 0.59, \quad N \rightarrow \infty. \quad (2.1.18)$$

由于单体之间有吸引能,链在 $T < \theta$ 时“拢缩”,即取一个由下式描述的更紧密的位形:

$$\langle R^2 \rangle_T^{\text{SAW}} \propto N^{1/3}, \quad N \rightarrow \infty, \quad (2.1.19)$$

而正好在 $T = \theta$ 上，链的位形渐近地同个理想的(高斯型的)随机行走的位形相似：

$$\langle R^2 \rangle_{T=\theta}^{\text{SAW}} \propto N, \quad N \rightarrow \infty. \quad (2.1.20)$$

注意(2.1.17)式是容易精确证明的，因为从(2.1.9)我们立即得到

$$R = \sum_{k=1}^N \mathbf{v}(\nu_k),$$

$$\langle R^2 \rangle_{T=\infty}^{\text{RW}} = \sum_{k=1}^N \mathbf{v}^2(\nu_k) + \sum_{\substack{k, k' \\ (k \neq k')}} \langle \mathbf{v}(\nu_k) \cdot \mathbf{v}(\nu_{k'}) \rangle_{T=\infty}, \quad (2.1.21)$$

注意从(2.1.8)有 $\mathbf{v}^2(\nu_k) = 1$ ，而由于行走的不同各步之间不存在相关，有

$$\langle \mathbf{v}(\nu_k) \cdot \mathbf{v}(\nu_{k'}) \rangle_{T=\infty} = 0.$$

反之，在(2.1.18,19)的情况下，即使在行走的相隔很远的两步之间，显然也必定有强烈的关联。因此毫不奇怪，既不可能用解析方法推导(2.1.18)和(2.1.19)式，也不可能用解析方法定出使(2.1.20)式成立的“ θ 温度” $k_B\theta/\varepsilon$ 的位置。因而蒙特卡罗方法对于研究这类问题是有用的。

在这里，简短地讨论一下这种 SAW 的简单抽样方法在实际怎样实现是有好处的（关于更详细的细节，读者应当做完第 3.2.3 节的作业）。首先我们必须记录行走的前面各步以保证不自相交。你可以把建造行走的过程中前面产生的全部径矢 $\mathbf{r}_{k'}$ 存起来，对于 $0 \leq k' \leq k-2$ ，检查是否存在一个 k' 使 $\mathbf{r}_k = \mathbf{r}_{k'}$ 。当然，这样一个算法是非常耗费时间的。一个效率高得多的方法是取一个有限大小的点格（例如，如果我们想要研究方格子上的 N 步 SAW，取一个大小为 $(2N+1)(2N+1)$ 的点格），在这个点格上对每个座点 i 引进占有变量 c_i ，初始时令一切 i 的 $c_i = 0$ 。现在产生一次行走，若它访问了座点 i 就令 $c_i = 1$ ，并且我们

建立一个数组，它对那些 $c_i = 1$ 的座点按照它们被访问的顺序进行编号。于是，通过在每一步检查下一个将访问的座点是否仍然有 $c_i = 0$ ，就很容易满足体斥条件。在结束行走的建立过程（以及对 SAW 位形的可能分析）之后，我们必须从头到尾扫过这个由被访问过的座点组成的数组，以把 $c_i = 1$ 换回 $c_i = 0$ ，然后就可以开始建立下一次行走。或者还有一个办法，不必每次清零，而是每次行走时令标号加 1，访问一座点后即令该座点的 c_i 等于此标号，并检查下一个要访问的座点是否等于这个标号。

还要注意，为了研究像 (2.1.15)，(2.1.18)–(2.1.20) 这样的定律，我们想要考察不只是一个特定的 N 值，而是研究 N 值的整个范围。没有必要对 N 值的不同选取重复以上过程；可以令 N 为我们打算考察的最大值，同时对未能在 (2.1.16) 式的意义上成功建立的全部行走都抽样，这些行走在某个 $N' < N$ 的值上结束，因为第 $(N' + 1)$ 步会违反体斥条件。

2.1.4 由简单抽样方法得出热平均

温度是怎样进入我们的问题的呢？根据这个模型的定义，一个具有 n 个最近邻接触（除了那些顺着链本身轮廓线的接触之外）的位形，将有一个正比于 $\exp(n\varepsilon/k_B T)$ 的 Boltzmann 权重因子。因此我们需要记录下每种位形的 n ，并且产生适当的分布函数，然后想要研究的任何温度 T 下的热平均就可以求出。特别是，蒙特卡罗抽样试图估计出分布

$$p_N(n) = Z_N^{\text{SAW}}(n) / Z_N^{\text{NRRW}},$$

即具有 n 个最近邻接触的长 N 步的 SAW 位形数目（经过归一化后），及分布

$$p_N(n, \mathbf{R}) = Z_N^{\text{SAW}}(n, \mathbf{R}) / Z_N^{\text{NRRW}},$$

即具有 n 个最近邻接触并且端距矢量为 \mathbf{R} 的长 N 步的 SAW 位形数目。于是感兴趣的平均值可以表示如下：

$$\langle \mathcal{H} \rangle_T = \frac{-\varepsilon \sum_n n \exp(n\varepsilon/k_B T) p_N(n)}{\sum_n \exp(n\varepsilon/k_B T) p_N(n)}, \quad (2.1.22a)$$

$$\langle R^2 \rangle_T = \frac{\sum_{n,R} R^2 \exp(n\varepsilon/k_B T) p_N(n, R)}{\sum_n \exp(n\varepsilon/k_B T) p_N(n)}. \quad (2.1.22b)$$

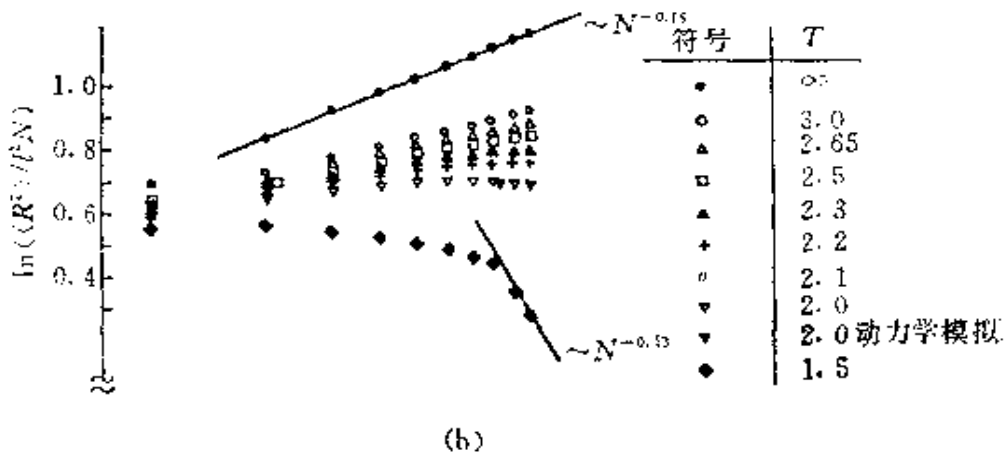
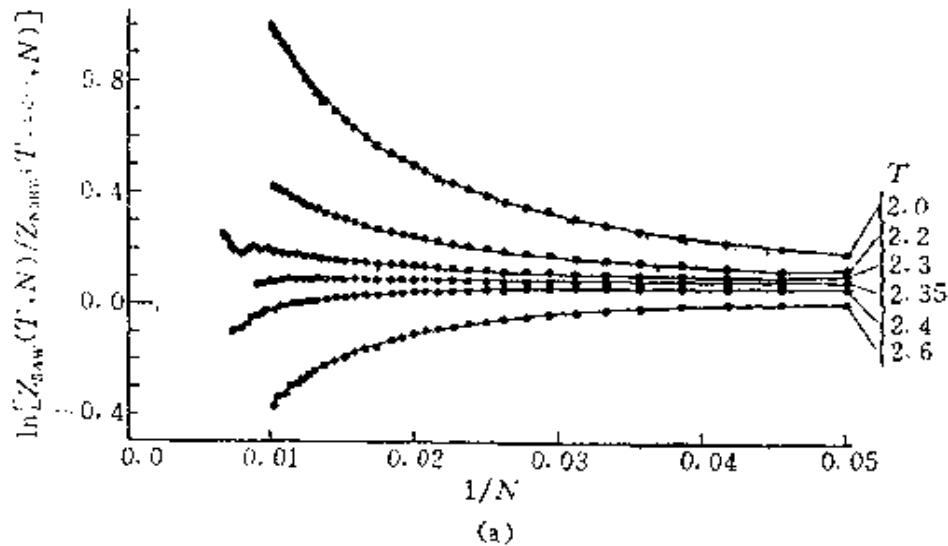


图2.2 (a) 对于四面体点格, 在不同温度下 (温度以 ε/k_B 为单位测量), 自由能差 $\ln[Z_{\text{SAW}}(T, N)/Z_{\text{NRRW}}(T = \infty, N)]$ 的简单抽样数据 (共 2×10^6 个样本, $N = 100$) 同 $1/N$ 的关系的曲线图; (b) $\langle R^2 \rangle / l^2 N$ 同 N 的 log-log 图, l 是四面体点格上的键长 ($l = \sqrt{3}$). 数据是用简单抽样方法得到的; 在 $T = 2, N = 80$ 处收入了一个有三个和四个键运动的动力学模拟的结果 (取自文献[2.1])

链上每个键的比热容 C 可以用涨落关系

$$\frac{C}{k_B} = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle_T}{\partial (k_B T)} = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle_T - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{N k_B^2 T^2} \quad (2.1.23)$$

得到(注意(2.1.23)式容易用(2.1.22)式和 C 的定义加以验证, 但它是普遍成立的), 求得

$$\frac{C}{k_B} = \left(\frac{\varepsilon}{k_B T} \right)^2 \times \frac{\left(\sum_n n^2 p_N(n) \exp(n\varepsilon/k_B T) - \left[\sum_n n p_N(n) \exp(n\varepsilon/k_B T) \right]^2 \right)}{N \sum_n p_N(n) \exp(n\varepsilon/k_B T)} \quad (2.1.24)$$

图 2.2 示出对四面体点格上的自回避行走的简单抽样研究的一些例子^[2.1]。

2.1.5 简单抽样的优点和局限性

上面介绍的自回避行走的简单抽样有两个优点: (i) 从一次模拟作业我们可以得到链长 N 在某一最大长度以内的一个完整的取值范围内的信息, 以及一个宽广温度范围内的信息。(ii) 行走的单个位形彼此统计独立, 因此标准的误差分析可以适用。设已成功地产生出 N 步行走的 M 个位形。于是应用(2.1.7)式, $\langle R^2 \rangle_{T=\infty}$ (即非热情况下)可得出如下:

$$\langle R^2 \rangle_{T=\infty} \approx \overline{R^2} = \frac{1}{M} \sum_{l=1}^M R_l^2, \quad (2.1.25)$$

R_l 是行走的第 l 个位形的端距, 其误差 $\langle (\delta R^2)^2 \rangle_{T=\infty}$ 估计为

$$\langle (\delta R^2)^2 \rangle_{T=\infty} \approx \overline{(\delta R^2)^2} = \frac{1}{M(M-1)} \sum_{l=1}^M [R_l^2 - \overline{R^2}]^2. \quad (2.1.26)$$

对于随机行走或不退行随机行走，很容易预言平均相对误差。利用概率分布的高斯特性^[2.2, 2.3]，

$$p_N(\mathbf{R}) \propto \exp[-dR^2/(2\langle R^2 \rangle)], \quad d \text{ 是维数}; \quad (2.1.27)$$

记住在一个各向同性系统中有 $R^2 = x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_d^2$ ，因而

$$p_N(\mathbf{R}) = p_N(x_1)p_N(x_2)\dots p_N(x_d)$$

$$\propto \exp\left(-\frac{x_1^2}{2\langle x_1^2 \rangle}\right) \exp\left(-\frac{x_2^2}{2\langle x_2^2 \rangle}\right) \dots \exp\left(-\frac{x_d^2}{2\langle x_d^2 \rangle}\right),$$

$$\langle x_1^2 \rangle = \langle x_2^2 \rangle = \dots \langle x_d^2 \rangle = \langle R^2 \rangle / d.$$

从(2.1.27)式得到

$$\begin{aligned} \langle R^4 \rangle_{T=\infty} &= \frac{\int_0^\infty R^{d+3} dR \exp(-dR^2/2\langle R^2 \rangle)}{\int_0^\infty R^{d-1} dR \exp(-dR^2/2\langle R^2 \rangle)} \\ &= \left(\frac{2\langle R^2 \rangle}{d}\right)^2 \frac{\Gamma(d/2+2)}{\Gamma(d/2)} = \langle R^2 \rangle^2 \frac{d+2}{d}, \end{aligned} \quad (2.1.28)$$

因而估计出相对误差为

$$\frac{\overline{(\delta R^2)^2}}{(\overline{R^2})^2} \approx \frac{1}{M-1} \frac{(\langle R^4 \rangle_{T=\infty} - \langle R^2 \rangle_{T=\infty}^2)}{\langle R^2 \rangle_{T=\infty}^2} = \frac{1}{(M-1)} \frac{2}{d}. \quad (2.1.29)$$

这是缺乏自平均作用的一个很简单的例子。我们在热力学中得知，在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 下涨落平息，热力学广延变量 A 的相对涨落趋于零，

$$\langle (\delta A)^2 \rangle / \langle A \rangle^2 \propto 1/N \rightarrow 0.$$

因此，在一个大系统中，对一个处于平衡中的量 A 的 单次观察 A_i 已相当接近平均值 $\langle A \rangle$ ； A_i 同 $\langle A \rangle$ 只差量级为 $1/\sqrt{N}$ 的项。这个性质叫做强自平均作用^[2.5]。对于在随机行走问题中我们感兴趣的量，像 $\langle R^2 \rangle$ ，显然没有这一性质。 $\langle R^2 \rangle$ 没有自平均作用的原

因是， $\langle R^2 \rangle$ 本身是热力学意义上的一种涨落。热力学论据适用的量是 $\langle R \rangle$ ，根据(2.1.21)式，它可以写成

$$\langle R \rangle = \sum_{k=1}^N \langle v(v_k) \rangle = N \langle v \rangle, \quad (2.1.30)$$

不过这时 $\langle v \rangle \equiv 0$ 。但是，如果我们考虑一个“带偏向的”随机行走，它在一个特定方向上走一步的概率要比在其他方向上的概率高，使得 $\langle v \rangle \neq 0$ ，我们就会有

$$\langle R \rangle^2 = N^2 \langle v \rangle^2 \gg \langle R^2 \rangle - \langle R \rangle^2 \propto N,$$

并得到标准的热力学关系式

$$\langle (\delta R)^2 \rangle / \langle R \rangle^2 \propto 1/N.$$

对于自回避行走，分布函数 $p_N(R)$ 不是一个简单高斯函数，但是同样的性质

$$\langle R^4 \rangle_{T=\infty} \propto \langle R^2 \rangle^2$$

仍然成立(不过不再有一个简单论据以得出比例因子了)。于是再次得出相对误差与 N 无关，即没有自平均作用。

除了这些随机行走型问题和其他非热学问题如逾渗^[2.6](它将在第2.3.1节中按另一线索讨论)之外，简单的随机抽样技术对计算像(2.1.7)式那样的热平均并不怎么有用。例如，考虑(2.1.7)式中的 $A(x_i)$ 为哈密顿量 $\mathcal{H}(x_i)$ 本身的情形。这时(2.1.23)式意味着相对涨落

$$(\langle \mathcal{H}^2 \rangle_T - \langle \mathcal{H} \rangle_T^2) / \langle \mathcal{H} \rangle_T^2 \propto 1/N,$$

这又意味着每个自由度的能量 E 的概率分布

$$p(E) = \frac{1}{Z} \int dx \delta(\mathcal{H}(x) - NE) \exp[-\mathcal{H}(x)/k_B T], \quad (2.1.31)$$

有很陡的峰，这是因为我们还可以写

$$\langle \mathcal{H} \rangle_T = N \int_{-\infty}^{+\infty} E p(E) dE, \quad \langle \mathcal{H}^2 \rangle_T = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} E^2 p(E) dE, \quad (2.1.32)$$

因而 $p(E)$ 必定在 $E = \langle \mathcal{H} \rangle_T / N$ 附近有一个高度为 \sqrt{N} ，宽度为 $1/\sqrt{N}$ 的峰。事实上，可以证明，在远离二级相变或一级相变的地方， $p(E)$ 实际上仍是高斯函数 [2,6]

$$p(E) \propto \exp\left(-\frac{(E - \langle \mathcal{H} \rangle_T / N)^2}{2Ck_B T^2} N\right). \quad (2.1.33)$$

图2.3示出这个概率分布 $p(E)$ 的轮廓图。而一个简单抽样实际上意味着按一个在 $E = 0$ 取峰值的概率分布 $p(E)$ 产生相空间点 $\{x\}$ (对(2.1.1)–(2.1.3)那样的模型而言，其 $\mathcal{H}_{T=\infty} = 0$)， $p(E)$ 仍为宽度为 $1/\sqrt{N}$ 的高斯分布。因此如果用简单随机抽样方法来产生状态，那么产生出 E 在 $\langle \mathcal{H} \rangle / N$ 附近的状态的 概率随 E 按负指

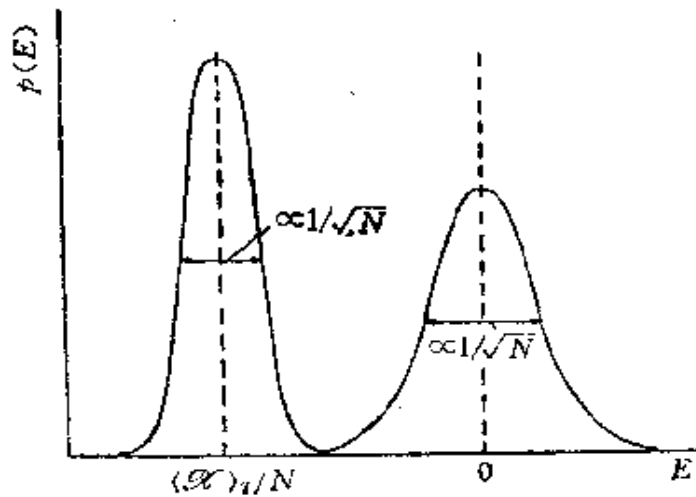


图2.3 归一化能量 E 的概率分布 $p(E)$ 。右边的曲线(峰值在 $E = 0$)是对相空间点 $\{x\}$ 作简单抽样所产生的概率分布 $p(E)$ (注意对于自旋模型例如 Ising 模型(2.1.1)，有正 E 的状态和有负 E 的状态以同一概率产生)。左边的曲线是在一个有限温度 T 下的正则系综中实际出现的概率分布 $p(E)$ ，注意这两个概率分布当 N 大时仅在它们的侧翼上有一点点重叠

数减小(由于这个原因, 式(2.1.22)和(2.1.24)在 $T < \theta$ 时是没有实际用途的, 除了很小的 N 值之外)。因此我们需要有一个效率更高的方法, 它不是完全随机地对平均值(2.1.7)式中包括的各个位形 x_i 进行抽样, 而是优先从相空间中在温度 T 下为重要的那一区域中对 x_i 进行抽样。设我们考虑一个抽样过程, 过程中根据某一概率 $P(x_i)$ 选取相空间点 x_i 。然后取这一组 $\{x_i\}$ 来求热平均, (2.1.7)式便换成

$$\overline{A(x)} = \frac{\sum_{i=1}^M \exp[-\mathcal{H}(x_i)/k_B T] A(x_i) / P(x_i)}{\sum_{i=1}^M \exp[-\mathcal{H}(x_i)/k_B T] / P(x_i)} \quad (2.1.34)$$

2.1.6 重要性抽样

(2.1.34)式中的 $P(x_i)$ 的一种简单而且最自然的取法是

$$P(x_i) \propto \exp[-\mathcal{H}(x_i)/k_B T],$$

这时 Boltzmann 因子完全相消, (2.1.34)式化为简单算术平均

$$\overline{A(x)} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i). \quad (2.1.35)$$

现在的问题当然是要找到一种抽样方法, 来实际实现这个所谓重要性抽样^[2.7]。Metropolis 等人^[2.7]提出了下述想法: 不要彼此独立无关地选取相继诸状态 $\{x_i\}$, 而是建造一个 Markov 过程, 过程中每一状态 x_{i+1} 由前一个状态 x_i 通过一个适当的跃迁概率 $W(x_i \rightarrow x_{i+1})$ 得到。他们指出, 有可能这样选取跃迁概率 W , 使得在 $M \rightarrow \infty$ 的极限下, Markov 过程产生的状态的分布函数 $P(x_i)$ 趋于所要的平衡分布

$$P_{\text{eq}}(x_i) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(x_i)}{k_B T}\right). \quad (2.1.36)$$

达到这一点的充分条件是加上细致平衡条件

$$P_{eq}(x_i)W(x_i \rightarrow x_{i+1}) = P_{eq}(x_{i+1})W(x_{i+1} \rightarrow x_i). \quad (2.1.37)$$

上式意味着, 变迁 $x_i \rightarrow x_{i+1}$ 的跃迁概率和反方向的变迁 $x_{i+1} \rightarrow x_i$ 的跃迁概率之比, 只依赖于能量变化 $\delta \mathcal{H} = \mathcal{H}(x_{i+1}) - \mathcal{H}(x_i)$,

$$\frac{W(x_i \rightarrow x_{i+1})}{W(x_{i+1} \rightarrow x_i)} = \exp\left(-\frac{\delta \mathcal{H}}{k_B T}\right) \quad (2.1.38)$$

(2.1.38)式显然并不唯一地规定 $W(x_i \rightarrow x_{i+1})$, W 的显式形式的选择仍然有某些任意性. 两种经常使用的选择是^[2.8-2.9]

$$\begin{aligned} W(x_i \rightarrow x_{i+1}) &= \frac{1}{2\tau_s} \left[1 - \tanh\left(\frac{\delta \mathcal{H}}{2k_B T}\right) \right] \\ &= \frac{1}{\tau_s} \frac{\exp(-\delta \mathcal{H}/k_B T)}{[1 + \exp(-\delta \mathcal{H}/k_B T)]}, \end{aligned} \quad (2.1.39a)$$

或

$$W(x_i \rightarrow x_{i+1}) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_s} \exp(-\delta \mathcal{H}/k_B T), & \delta \mathcal{H} > 0, \\ \frac{1}{\tau_s}, & \text{其他,} \end{cases} \quad (2.1.39b)$$

其中 τ_s 是一个任意因子, 暂时可以取它为 1 (后面在我们讨论蒙特卡罗过程的动力学解释^[2.9-2.10]时, 我们将取 τ_s 为“蒙特卡罗时间”的单位, 并把 W 叫做“单位时间的跃迁概率”).

虽然容易验证 (2.1.39) 满足 (2.1.37) 和 (2.1.38), 但是还需要证明, 用 (2.1.39) 产生的状态序列 $x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow x_3 \cdots$ 的概率分布 $P(x_i)$ 实际上收敛到 (2.1.36) 式的平衡概率 $P_{eq}(x_i)$. 证明这一点的一种常用的而言之成理的论据如下: 设我们考虑同时有许多个这样的 Markov 链, 在过程中给定的一步, 有 N_s 个

系统在状态 r , N_r 个系统在状态 s , 等等, 并且 $\mathcal{H}(x_r) < \mathcal{H}(x_s)$. 用随机数可以产生变迁 $x_r \rightarrow x_s$, 这将在下面讨论. 若不考虑能量变化 $\delta\mathcal{H}$, 这些变动的跃迁概率应当是对称的, 即 $W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_r \rightarrow x_s) = W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_s \rightarrow x_r)$. 有了这些“先验的跃迁概率” $W_{\delta\mathcal{H}=0}$, 容易建立符合 (2.1.37) 和 (2.1.38) 式的跃迁概率, 即

$$\begin{aligned} W(x_r \rightarrow x_s) &= W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_r \rightarrow x_s) \exp(-\delta\mathcal{H}/k_B T) \\ &= W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_r \rightarrow x_s) \\ &\quad \times \exp\{-[\mathcal{H}(x_s) - \mathcal{H}(x_r)]/k_B T\}, \end{aligned} \quad (2.1.40a)$$

$$W(x_s \rightarrow x_r) = W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_s \rightarrow x_r) = W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_r \rightarrow x_s) \quad (2.1.40b)$$

在 Markov 链的这一步, 从 x_r 到 x_s 的跃迁总数 $N_{r \rightarrow s}$ 为

$$\begin{aligned} N_{r \rightarrow s} &= N_r W(x_r \rightarrow x_s) \\ &= N_r W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_r \rightarrow x_s) \exp\{-[\mathcal{H}(x_s) - \mathcal{H}(x_r)]/k_B T\}, \end{aligned} \quad (2.1.41a)$$

而反向跃迁的总数为

$$\begin{aligned} N_{s \rightarrow r} &= N_s W(x_s \rightarrow x_r) \\ &= N_s W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_r \rightarrow x_s). \end{aligned} \quad (2.1.41b)$$

于是净跃迁数 $\Delta N_{r \rightarrow s}$ 为

$$\begin{aligned} \Delta N_{r \rightarrow s} &= N_{r \rightarrow s} - N_{s \rightarrow r} \\ &= N_r W_{\delta\mathcal{H}=0}(x_r \rightarrow x_s) \left(\frac{\exp[-\mathcal{H}(x_s)/k_B T]}{\exp[-\mathcal{H}(x_r)/k_B T]} - \frac{N_s}{N_r} \right). \end{aligned} \quad (2.1.42)$$

(2.1.42) 式是此论据的最重要的结果, 它表明, 这个 Markov 过程的确具有我们想要的性质, 即状态出现的概率正比于 (2.1.36)

式给出的平衡概率 $P_{eq}(x_l)$ ：只要 N_s/N_r 小于平衡概率之比，我们就有 $\Delta N_{r \rightarrow s} > 0$ ，即比值 N_s/N_r 向着平衡概率的比值增大；反之，如果 N_s/N_r 大于“平衡比值”，那么 $\Delta N_{r \rightarrow s} < 0$ ，从而 N_s/N_r 再度减小到正确的平衡比值。于是当 $l \rightarrow \infty$ 时将渐近地到达一个定常态分布，它的 N_s/N_r 之值正是平衡分布 (2.1.36) 式所要求的。代替考虑同时有多个 Markov 链，我们也可以等价地把一个很长的 Markov 链切成等长的若干段，而对链的相继各段应用同一论据。

现在我们来讨论这个问题：变迁 $x_l \rightarrow x_{l'}$ 在实际做时应当怎样取？在原则上，这个变迁的选法有很大的自由，唯一的限制是“先验概率” $W_{\delta \mathcal{E}=0}(x_l \rightarrow x_{l'})$ 应当对称这个条件，即

$$W_{\delta \mathcal{E}=0}(x_l \rightarrow x_{l'}) = W_{\delta \mathcal{E}=0}(x_{l'} \rightarrow x_l),$$

并且由此得出的在有能量变化 $\delta \mathcal{E}$ 时的跃迁概率 $\tau_{\mathcal{E}} W(x_l \rightarrow x_{l'})$ 之值，应当以足够的频度显著异于 0 和 1。因此最常取的变迁是，只在一个（或几个）自由度上发生变化。因为如果我们同时改变 $N \gg 1$ 个自由度，那么 (2.1.39) 式中的 $\delta \mathcal{E}/k_B T$ 就将是 $N(\varepsilon/k_B T)$ 的量级，其中 ε 是能量标尺（例如，对于磁哈密顿量 (2.1.1)–(1.3)， $\varepsilon = J$ ）。由于感兴趣的温度是使 $\varepsilon/k_B T$ 的数量级为 1 的温度，那么对于几乎每一个涉及 $N \gg 1$ 个自由度的变迁，如果它要消耗能量，它的跃迁概率都是极小的，因而绝大部分变迁的企图都根本不会执行；系统会“粘死”在它前一个位形上。这在大多数情况下显然导致一个不实用的算法。克服这一困难的一个办法是联合的蒙特卡罗-郎之万算法 [2.82]。

2.1.7 再谈模型和算法

图 2.4 示出对统计力学中研究的若干模型常用的一些位形变迁。对于 Ising 模型，最常用的算法是单个自旋反转算法和自旋交换算法（图 2.4(a)(b)）。注意单个自旋反转算法显然不会

使系统的总磁化强度为一不变量，而自旋交换算法则使总磁化强度不变。因此，这些算法对应于实现不同的热力学系综：图2.4(a)实现一个“巨正则”系综，这时温度 T 和磁场强度 H 是独立给定的热力学量，需要计算的是其共轭热力学量（例如，磁化强度 $\langle M \rangle_T$ 是和磁场强度 H 共轭的量），而图2.4(b)则实现一个“正则系综”，这时温度 T 和磁化强度 M 是独立给定的热力学量（而磁场强度 $\langle H \rangle_T$ 是我们想要计算的共轭因变量）。

我们把 Ising 模型的 (T, H) 系综叫做“巨正则”系综，而把 (T, M) 系综叫做“正则”系综，这用的是 Ising 模型的格子模型解释的语言，在这种解释中，自旋变量 S_i 通过 $\rho_i = (1 + S_i)/2$ 被重新解释为局部密度 ρ_i ($= 0, 1$)。于是 $\langle M \rangle_T$ 同平均密度 $\langle \rho_i \rangle_T$ 相联系： $\langle M \rangle_T = 1 - 2\langle \rho_i \rangle_T$ ；而 H 则同可能占据点格座点的粒子的化学势相联系。

已知在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 下，统计力学中不同的系综给出等效的结果。于是对统计系综从而对与之相联系的算法的选择似乎只是一个选哪一种更方便的问题。但是，各种系综中的有限尺寸效应很不相同，而且在一次模拟中趋于平衡位形的“速率”也可能很不相同，因此选择适当的统计系综有时是一个复杂的问题。当我们用“速率”这个词时，我们心中已想到了蒙特卡罗过程的动力学解释^[2.9]；于是图2.4(a)实现 Glauber^[2.11]的动态 Ising 模型，它是一个单纯弛豫模型，没有任何守恒定律；而图2.4(b)则实现川崎恭二^[2.12]的动态 Ising 模型，其磁化强度守恒。

对于具有连续自由度的模型，例如 XY 模型 (2.1.2) 或 Heisenberg 磁体 (2.1.3)，还有对于流体的模型 (图 2.4(c)(d))，不是完全随机地、而是在其先前的值周围的一个区间内选取一个粒子的新自由度（例如图 2.4(c) 中的角度 φ' ，或图 2.4(d) 中的位置 x'_i, y'_i ），常常是合适的。然后对这个区间的大小加以调整，使对图 2.4 中考虑的试验变动的平均接受率不至于太小。

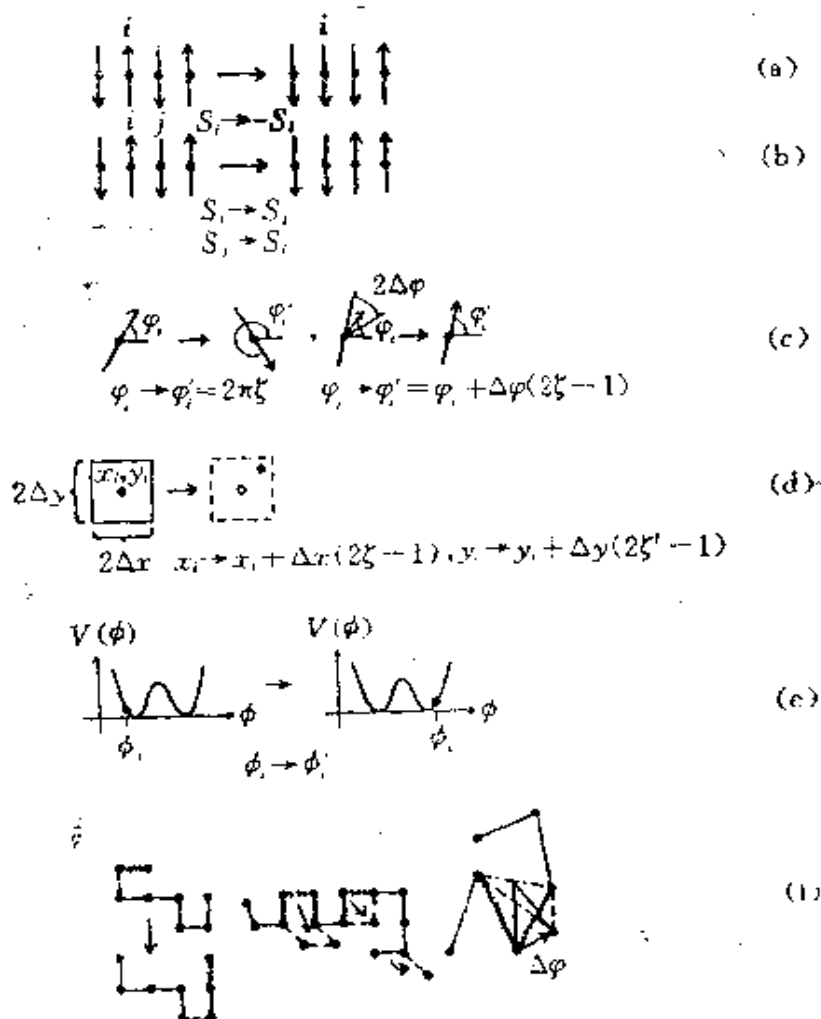


图2.4 统计力学的一些标准模型的蒙特卡罗模拟中常用的位形变迁: $\mathbf{x}_i \rightarrow \mathbf{x}'_i$ 的例子。(a) 单个自旋反转 Ising 模型 (按照动力学解释, 这是 Glauber 动态 Ising 模型); (b) 最近邻交换 Ising 模型 (按照动力学解释, 这是川崎动态 Ising 模型); (c) 使用一个在 $[0, 1]$ 区间均匀分布的随机数 η , XY 模型的算法的两种变型: 左图, 描写自旋的新方向的角度 φ'_i 完全随机地挑选; 右图, φ'_i 从原来的方向 φ_i 两侧的区间 $[\varphi_i - \Delta\varphi, \varphi_i + \Delta\varphi]$ 中选出; (d) 二维流体中一个原子的坐标变迁, 从旧位置 (x_i, y_i) 变到一个新位置, 这个新位置均匀分布在旧位置周围的一个大小为 $(2\Delta x)(2\Delta y)$ 的方形中; (e) 在一个单座点位势 $V(\phi)$ 中运动的一个粒子的变迁, 从旧位置 ϕ_i 变到新位置 ϕ'_i ; (f) 在聚合物的点格模型和非点格模型中使用的变迁 (被移动的键用波纹线表示): 左图, 方形点格上的爬行算法; 中图, 与聚合物动力学的 Rouse 模型有关的一个动力学算法; 右图, 由同一长度的刚性连杆自由连接而成的链的一个非点格算法, 其中两个相邻的连杆一直在垂直于点划线轴的平面内旋转一个在区间 $[-\Delta\varphi, \Delta\varphi]$ 中随机选定的角度

事情也可能是这样：不便于（或不可能）在给定的相空间内对单个自由度均匀抽样。例如，虽然在图 2.4(c) 的左图，从区间 $[0, 2\pi]$ 对角度抽样不会遇到什么困难；但在图 2.4(e) 中，我们却不能在区间 $[-\infty, \infty]$ 内对一变量 ϕ_i 均匀抽样。这个问题出现于在一个点格上模拟所谓 ϕ^4 模型时：

$$\mathcal{H}_{\phi^4} = + \sum_i \left(\frac{1}{2} A \phi_i^2 + \frac{1}{4} B \phi_i^4 \right) + \sum_{\langle i, j \rangle} \frac{1}{2} C (\phi_i - \phi_j)^2, \quad (2.1.43)$$

$$-\infty < \phi_i < +\infty,$$

其中 A, B, C 是常数，单座点位势 $V(\phi) = \frac{1}{2} A \phi^2 + \frac{1}{4} B \phi^4$ 在 $A < 0, B > 0$ 时具有熟悉的双极小的形状。处理这个模型的一种简单方法，是在超出极小位置 ($\phi_i^{\min} = \pm \sqrt{-A/B}$) 很远的值上，截断 ϕ_i 的容许区间。但是，如果位势很陡峭，这个方法效率很低的：大部分时间花在尝试选取试验位形 ϕ_i' 上，而这些试验位形却因为跃迁概率太小而被舍弃。如果 ϕ_i 本身是根据一种重要性抽样方案选取的，就避免了这个问题；这就是说，要建立一个算法^[2.18]，它产生的 ϕ_i 的分布正比于概率分布

$$p(\phi_i) \propto \exp\left(-\frac{V(\phi_i)}{k_B T}\right).$$

最后，图 2.4 (f) 表明，对于随机行走问题，也存在有重要性抽样方案，以代替迄今讨论的简单抽样方法。设通过简单抽样建造出一条长链的一个 SAW 位形。然后用种种“动力学”算法产生进一步的位形。例如，在蠕行算法^[2.14]中，长链一端（选哪一端随机决定）上的终端键被取消，而在另一端的一个随机方向上加上一个键。当然，这一步试验性变动只有当它不违反 SAW 约束时才被执行。

这个算法也有一个替代物，如果想要模拟聚合物动力学（例如，描述一个链在热浴中的弛豫过程的 Rouse 模型^[2.15]），这个替代算法更为现实。这个替代算法允许链上的几组相邻的键局部重新排列，它们可以随机地跳到点格上的新位置，当然仍然得服从体斥作用的限制（图 2.4(f), 中图）^[2.4, 2.16]。终端键也可以旋转到新位置上。最后请注意，这些模型都可以有连续的（非点格的）对应物，例如 图 2.4(f) 右图^[2.17]。再者，算法的细节取决于模拟想达到的目标。例如，如果想研究聚合物熔融的动力学^[2.17]，那么考虑不允许“纠缠”的限制是重要的，即在一条链的连杆作随机运动时，链必须不与它自身相交，也不与周围别的链的任何连杆相交。对于使连杆被切掉的运动，这时我们令其跃迁概率等于零，这样的变动试图永远不会实现。反之，如果我们主要是对这个模型的静态平衡性质感兴趣，那么最好是这样定义这场蒙特卡罗模拟的规则，使得能尽快趋于平衡，这意味着应当不顾不允许发生纠缠的限制，而允许链相交。

显然，要一无遗漏地列举出 $x_i \rightarrow x_i'$ 这一步的具体内容的全部各种可能性，以及跃迁概率的详细定义，那是不可能的。蒙特卡罗方法非常灵活多样，使得它可以应用于多种很不相同的问题。这显然正是这个方法的主要威力。

2.2 蒙特卡罗程序的组织和蒙特卡罗抽样的动力学解释

2.2.1 对 Ising 模型的模拟的初步讨论

现在，作为一个简单例子，设我们想要实现图 2.4 (a) 的单个自旋反转 Ising 模型的模拟，这怎么做呢？

我们首先必须规定点格的类型和大小，以及必须使用的边界条件。设我们取一个简单立方点格，大小为 $L \times L \times L$ （即三个

方向的线度大小相等)，并取周期边界条件。其次我们必须规定一个初始自旋位形，例如，一切自旋初始时的指向都朝上。然后我们一再重复下面六步：

(1) 选择点格上的一个座点 i ，考虑这个座点上的自旋 S_i ，进行反转 ($S_i \rightarrow -S_i$)。

(2) 计算同这个反转相联系的能量改变 $\delta \mathcal{E}$ 。

(3) 计算这个反转的跃迁概率 $\tau_i W$ 。

(4) 抽取一个在 $[0, 1]$ 区间均匀分布的随机数 \mathcal{R} 。

(5) 如果 $\mathcal{R} < \tau_i W$ 使自旋反转，否则就不反转。不论是哪种情形，用这个方法在本步末了所得到的自旋位形都算作一个“新位形”。

(6) 按照要求分析所得出的位形，存储它的属性以计算必需的平均值。例如，如果我们只对（未归一化的）磁化强度 M_{tot} 感兴趣，我们可以通过以 $M_{\text{tot}} + 2S_i$ 代替 M_{tot} 来更新它。

怎样实现上述过程算法的详情在第3.4.1节给出。从上面的清单应当可以看出，可以直接把这种算法推广到 Ising 模型以外的系统，像图2.4中所考虑的其他各种可能性。这只需把“自旋”和“自旋反转”这些词换成对该系统合适的词。

我们对这一算法的具体实现加几点评注：

(i) 经过第 (3)–(5) 步，平均说来，自旋反转被执行的概率为 $\tau_i W$ ；如果 $\tau_i W > 1$ ，则总是被执行。例如，对于 (2.1.30b) 如果 $\delta \mathcal{E} < 0$ 就发生这种情况。在这种情况下第 (3)–(4) 步不必履行。

(ii) 在重复上述过程时，按什么顺序选取相继的点格座点 $\{i\}$ 有相当程度的自由。可以按有规则的方式（打字机方式）穿过点格，也可以随机选取点格座点；对于平衡态性质用哪一种都没关系。如果想要得到动力学性质（按照 Glauber 的动态 Ising 模型的精神），虽然按随机序列访问座点更为现实，但是它比规则

方式要慢一些，并且还需要相当好的（无关联的）伪随机数。

（对于坏随机数，可能发生某些座点根本不会被访问的情况，于是程序的输出毫无意义！）也可以先把点格分成几个相互交错的子点格，然后按规则的打字机方式先扫过子点格 1 的自旋，再转到子点格 2，等等。这个“棋盘算法”^[2.18]的优点是，它可以直接“向量化”，因而可以以很高的效率在现代的向量机上运行。

(iii) 由于相继两个状态只相差一个自旋反转，因此它们的物理性质有很强的关联。如果第(6)步分析位形包括有许多运算，那么更好的做法可能是，不是在每一次（试图的）自旋反转之后都履行第(6)步，而是在长得多的“时间”间隔之后才履行它。如果自旋是有规则地顺序选取的，我们定义每个座点一蒙特卡罗步（MCS）为对每个格点实行一遍上述步骤（5步或6步）。如果自旋是随机选取的，那么 MCS 则这样定义：要求平均起来每个自旋被选一次。于是明智的做法是，每一 MCS / 座点甚至每 τ 个 MCS / 座点才履行一次第(6)步（或其中的耗费时间的部分），其中 τ 是某个典型的关联时间（它将在下面考虑）。还必须注意，虽然生成的状态的分布 $P(x_i)$ 渐近地（即当 $M \rightarrow \infty$ 时）趋于平衡分布 $P_{eq}(x)$ (2.1.36)，我们并没有理由假定紧接着（任意的！）初始位形的那些状态也已有一个接近 $P_{eq}(x)$ 的分布。正好相反，必须产生大量的位形 $\{x_i\}$ 之后，对初始状态的“记忆”才会消失。例如，如果我们起动系统时所用的初始状态是系统处于饱和磁化，而我们想要模拟刚比居里点高一点点的一个温度，在此温度下，在零磁场中平衡态的磁化强度为零，那么可能需要一段很长的“时间”，初始磁化才实际上“衰减”掉。这种向平衡的衰减的一个例子，以及平衡态下的涨落，在图 2.5 中给出。下面将会看到，使用蒙特卡罗过程的动力学解释对讨论这种现象是有帮助的。无论如何，把一次模拟开始时尚未很好地到达平衡

分布的那些状态排除在最后分析之外是有点好处的。（除非想要研究的正是趋衡过程！）

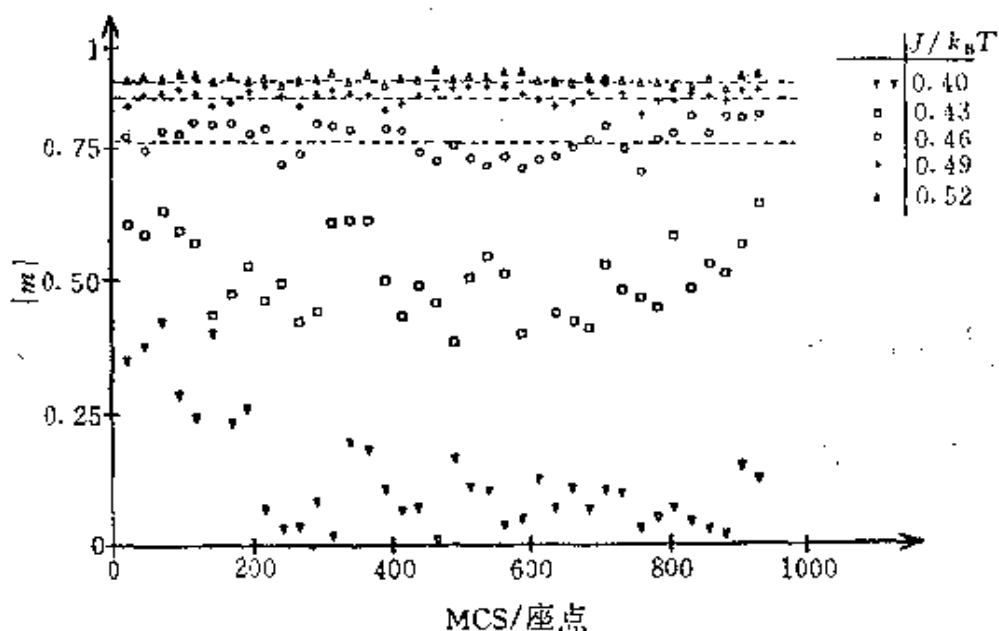


图2.5 具有铁磁相互作用的二维最近邻 Ising 方格子的磁化强度的绝对值，点格大小 $L = 55$ ，采用周期边界条件。在5个不同的温度下，画出 $|m|$ 的瞬时值作为观察时间 t （以 MCS/座点为单位）的函数。在 $J/k_B T = 0.40$ 下 m 的负值用实心符号表示。这表明，即使在顺磁区域（ $J/k_B T_c \approx 0.4409$ ），对初始起动的记忆，也只会相当缓慢地失去。水平虚线代表从杨振宁的精确解得出的自发磁化强度的精确值。注意，在从低于 T_c 的温度趋向 T_c 时，涨落幅度 δm 和弛豫时间都变大（注意 δm 改变符号所需的时间）。温度略高于 T_c 时（ $J/k_B T = 0.43$ ），图中所示的总运行时间已不足以弛豫磁化强度的符号，而一个有限大小的系统内，其磁化强度在一切非零温度下都应围绕零值涨落

(iv) 在计算一开始时就把自旋反转（或自旋交换）的跃迁概率 W 可能取的很少几个不同的值储存起来，而不是一而再再而三地计算指数函数，可以节省计算机时间。这个列表法不仅对

Ising 模型可用，而且对一切具有离散自由度的问题都适用。

在很低的温度下，在 Ising 模型中，几乎每次使一个自旋反转的企图都注定会失败。通过记录下在模拟的每一时刻具有给定的跃迁概率 W_k 的自旋个数，可以建立一个更复杂然而更快的算法。这时从概率同 W_k 成正比的第 k 组自旋中选取一个自旋，可以使每一次自旋反转尝试都成功^[2.19]。文献中也给出了这个算法对自旋交换模型的一个推广^[2.20]。

2.2.2 边界条件

通过使用周期边界条件，通常可以减小来自边界的干扰。于是在三维点格中，在计算能量时把最上层平面和最下层平面看成邻居，前平面和后平面看成邻居，最左侧的平面和最右侧的平面看成邻居。这通过一个 6×6 方格的例子表示在图 2.6(a) 中。在重印于表 2.1 中的编程例子中，周期边界条件已明显地写进程序。但是要注意，要选取合适的线度大小和边界条件，还必须经过一些考虑。例如，虽然对铁磁 Ising 模型其线度大小 L 可以是奇数也可以是偶数，对于反铁磁 Ising 模型则 L 必须是偶数，否则立方 Ising 反铁磁体的双子格 (two-sublattice) 结构就会同点格不相适应。显然，在系统想要发展一种同盒子的线度无公度的长程序 (long-range order) 的情况下，周期边界条件一定会产生扰动作用，在显示出公度-无公度相变的模型中，比方说 ANNNI 模型 (各向异性次近邻 Ising 模型) 中，必然发生这种情况^[2.22]。此外，在一切二级相变中，相关长度的临界发散受到系统的有限大小和周期性的强烈干扰。这些影响相变的有限尺寸效应和边界效应很久以来就受到人们注意^[2.23-2.27]，我们将在第 2.3 节讨论。如果把格点的编号存放在一个一维数组中，编号的顺序是按照打印机方式穿过 (简单立方) 点格，那么常常使用周期边界条件的一种变型。这时座点 i 的最近邻取为 $i \pm 1$, $i \pm L$, $i \pm L^2$ ，这

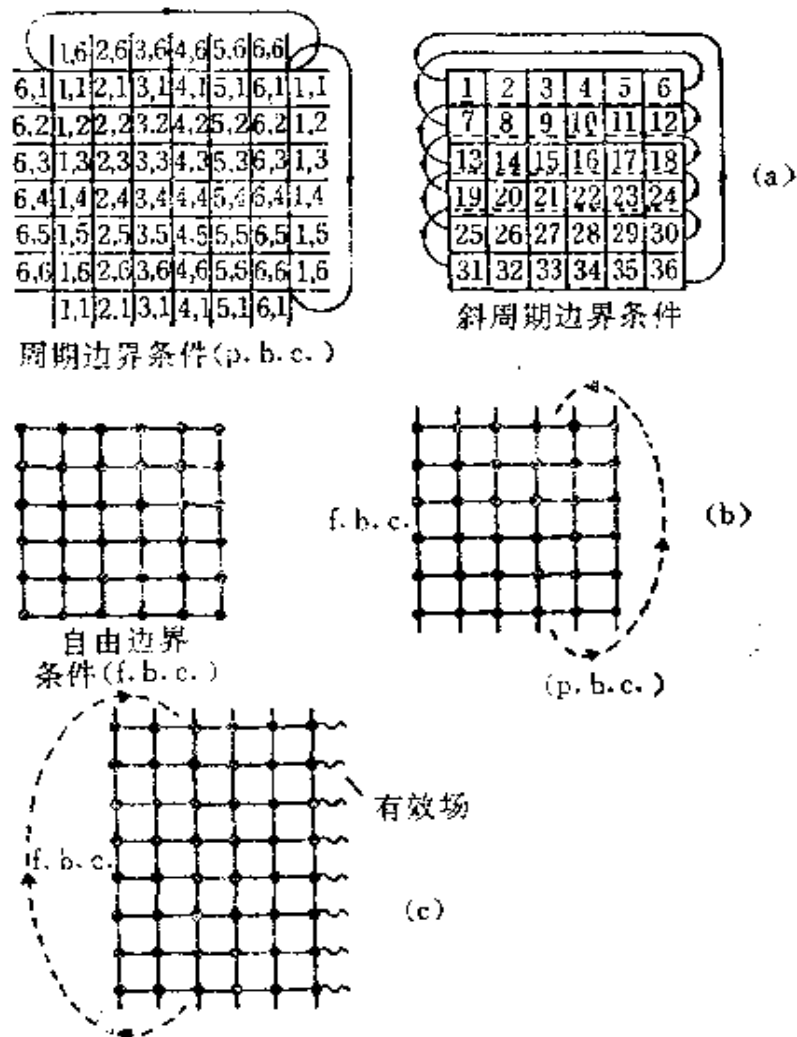


图2.6 (a) 具有周期边界条件(左)和斜周期边界条件(右)的 6×6 方形点格。对于周期边界条件,点格的每个座点 i 用它的两个直角坐标 x_i, y_i 编号,在点格间隔取为1时,这两个坐标是整数。对于斜周期边界条件,座点按打字机方式编号,如图所示。(b) 具有自由边界条件的 6×6 方格(格点用圆点表示,键用联结它们的直线表示)。左图:在格子的所有方向上都有自由边界条件。右图:在格子的一个方向上有自由边界条件,在另一个方向上有周期边界条件,这是选取模拟了薄膜的几何状态。(c) 这种边界条件模拟一个半无穷系统。一个 6×8 方格的一个边界(8个自旋)是自由的,对边则处在一个有效边界场中。调节这个场的大小,使这个边界层中的磁化强度取大块体内之值^[2,21]。在点格的其他方向上用周期边界条件

表2.1 一个 $37 \times 37 \times 37$ Ising模型程序的例子,这个模型为简单立方点格,温度 $T/T_c = 1.4$,共对25次MCS/自旋进行计算。RANSET 使随机数发生器RANF初始化。像第2.2.1节中讨论的那样计算能量变化,取反转概率为 $\exp(-\Delta E/k_B T)$ 。这个程序在一台 CDC Cyber 76 上运行约需3.75秒

```

DIMENSION IS(37,37,37), EX(13)
DATA IS/50653*1/
T = 1.40/0.221655
L = 37
CALL RANSET(1)

M = L*L*L
DO 3 I = 1, 13, 2
3 EX(I) = EXP(- 2*(I - 7)/T)

DO 2 ITIME = 1,25
DO 1 K1 = 1, L
K1P1 = K1 + 1
K1M1 = K1 - 1
IF(K1 . EQ . 1) K1M1 = L
IF(K1 . EQ . L) K1P1 = 1
DO 1 K2 = 1,L
K2P1 = K2 + 1
K2M1 = K2 - 1
IF(K2 . EQ . 1)K2M1 = L
IF(K2 . EQ . L)K2P1 = 1
DO 1 K3 = 1, L
K3P1 = K3 + 1
K3M1 = K3 - 1

```



```

      IF(K3 . EQ . 1)K3M1 = L
      IF(K1 . EQ . L)K3P1 = 1

      IEN = 7 + IS(K3, K2, K1)
0      *(IS(K3M1, K2, K1) + IS(K3P1, K2, K1)
1      + IS(K3, K2M1, K1) + IS(K3, K2P1, K1)
2      + IS(K3, K2, K1M1) + IS(K3, K2, K1P1))
      IF(EX(IEN) . LT . RANF(I)) GOTO 1
      IS(K3, K2, K1) = - IS(K3, K2, K1)
      M = M + 2*IS(K3, K2, K1)
1  CONTINUE
2  WRITE(6, 4)M,ITIME
4  FORMAT(2I9)
      STOP
      END

```

意味着一个歪斜的周期边界条件*。这种情形也画在图2.6(a)中。但是，在编程上作一些努力，就可以既利用一维编号的好处（这对实现蒙特卡罗程序的一个良好的向量化以在向量处理机上运行特别有用），又可以保持严格的周期边界条件^[2,28]。

有时，由于想研究系统的不同于大块性质的性质，要使用不同于完全的周期边界条件的边界条件。例如，为了研究一个系统的自由表面，要使用所谓“自由边界条件”。这时把自由表面一侧的“消失了的自旋”简单地置为0。这种情况画在图2.6(b)中。这时把更多的统计工作量用在表面层（及其邻近的各层）而不是用在大块物质深处各层中是明智的。这样的算法叫做择尤表面座

* 也叫作“螺旋边界条件”。——译者

点选取^[2.29]。为了模拟一个小的超顺磁粒子，可以在点格的所有各个方向上都用自由表面^[2.30-32]，并且可以规定这些系统有任意的形状^[2.33]。此外，人们也许打算应用边界场，特别是如果想要模拟润湿现象和分层现象时更是如此^[2.34-36]。如果想要模拟薄膜的几何状态，可以在点格的一个方向上用自由边界条件，而其他方向上用周期边界条件，见图 2.6(b)^[2.29-37]；半无穷系统的几何可以这样模拟：取一个自由表面，在相对的表面取一个自洽的有效场^[2.21]，而在其余方向上仍用周期边界条件^[2.38]，见图 2.6(c)。

2.2.3 重要性抽样蒙特卡罗方法的动力学解释

现在我们转而讨论在 Markov 过程中一个接一个顺序产生的位形之间的关联。显然，这种关联对给定总步数的蒙特卡罗程序所能达到的精度有很大的影响。这种关联可以用蒙特卡罗求平均过程的一种动力学解释来理解，这种解释通过一个主宰方程，描述一个具有随机动态行为的确定的动力学模型^[2.8-2.10,2.39]。这种把各种关联看作时间相关的解释不仅对理解精度有用，也是应用蒙特卡罗方法来模拟动力过程的理论基础^[2.40-2.42]。这些动力学方面的应用包括了多个领域，像大分子的布朗运动^[2.4,2.43]，自旋玻璃^[2.41]和四极玻璃^[2.44]中的弛豫现象，成核现象^[2.40-2.45]和混合物的失稳分解^[2.40,2.45]，扩散置限聚集和有关的不可逆生长现象^[2.42,2.46]，以及合金内部和表面上的扩散^[2.40,2.47]等。在这里，我们只需把一个“时间” t 同一个接一个的位形的标号 ν 联系起来。我们可以使时间尺度归一化，使得在单位时间里发生 $N\tau_i^{-1}$ 个单粒子转变(在(2.1.39)式中我们已经把这个因子 τ_i^{-1} 引进跃迁概率中)。于是时间单位为 1MCS。我们考虑在时刻 t 蒙特卡罗过程中出现位形 x 的概率 $P(x_*) \equiv P(x, t)$ 。这个概率满足 Markov 过程的主宰方程^[2.8-2.10,2.48]

$$\frac{dP(\mathbf{x},t)}{dt} = - \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}') P(\mathbf{x},t) + \sum_{\mathbf{x}'} W(\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}) P(\mathbf{x}',t) \quad (2.2.1)$$

方程 (2.2.1) 用一个速率方程描述了上面已考虑过的各项收支 (2.1.40—2.1.42) 的平衡情况, 右边第一个求和项代表退出所考虑的状态 \mathbf{x} 的一切过程 (因此它使状态 \mathbf{x} 的概率减小), 第二个求和项则包括一切逆过程 (因此使得到 \mathbf{x} 的概率增大). 在热平衡时, 细致平衡条件 (2.1.37) 保证了这两项永远相消, 因而对于 $P(\mathbf{x},t) = P_{\text{eq}}(\mathbf{x})$ 我们就得到 $dP(\mathbf{x},t)/dt = 0$, 这正是所要的. 事实上, $P_{\text{eq}}(\mathbf{x})$ 是上述主宰方程的定态分布. 如果系统的任意位形 $\{\mathbf{x}\}$ 的位能都是有限的, 从系统的有限大小可以断定, 它一定是各态遍历的. 但是, 只要有无穷大位势出现 (比方在自回避行走问题中, 图2.1(c) 及 2.4(f)), 某些位形 \mathbf{x} 就是被禁戒的, 这时遍历性就可能成问题. 即使在有限系统中, 相空间也可能分解为几个相互不能进入的流域或“口袋”. 是否会发生这种情况并没有普遍的准则, 它实际上依赖于算法的细节. 例如, 在对点格上的自回避行走作动态模拟时 (图2.4(f)), 可以证明 (例如见文献[2.49]), 用那里所示的算法, 某些位形是不能达到的 (例如见图2.7). 虽然就感兴趣的平均值来说, 这些不能达到的态的统计权重小到可

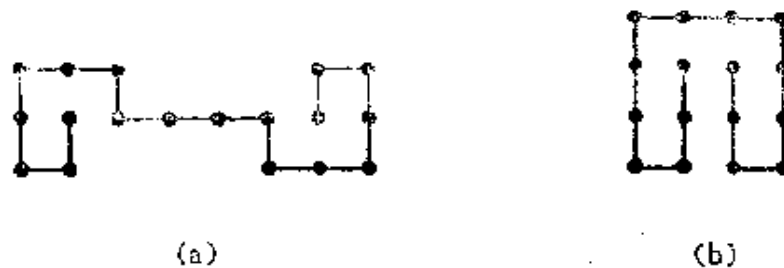


图2.7 方形点格上自回避行走问题用动态蒙特卡罗算法不能进出的位形的例子. 情形 (a) 的位形不能用随机算法进入, 也不能用随机算法退出; 情形 (b) 中的位形既不能用随机算法, 也不能用“跳跃”算法 (见第3.4.2节练习3.53) 退出

以忽略，在实际中根本不成其为一个问题^[2.50]，但是这一情况的确要求我们小心。在实际中，如果求平均的“时间”不够长，小于某一个所谓“遍历时间” τ_0 ，即使在遍历系统中，也可能会发生表观的“遍历性破缺”^[2.51]，这种遍历性破缺同与系统中的相变相连系的对称性自发破缺有密切的关系。在严格意义上，这些相变只有在热力学极限 $N \rightarrow \infty$ 下才能发生，因而 τ_0 也随着 $N \rightarrow \infty$ 而发散。在 $N \rightarrow \infty$ 时发生自发有序的区域中 τ_0 为有限大小，这也是一种有限尺寸效应。我们将在下一节讨论各种有限尺寸效应时回到这个问题上来，目前只是假定

$$\lim P(\mathbf{x}, t) = P_{\text{eq}}(\mathbf{x})$$

这个性质，即遍历性，可以在实际能达到的时间尺度上证实。

在(2.2.1)中我们写的是 $dP(\mathbf{x}, t)/dt$ ，而不是 $\Delta P(\mathbf{x}, t)/\Delta t$ ，即我们用来工作的是微分而不是有限差分。这一点有时会受到批评，例如文献[2.52]中曾提出，由于时间增量 $\Delta t = \tau_0/N$ 是离散的，应当把蒙特卡罗动力过程看成一个分立映射，这是“非线性动力学”中的一个问题，因而预言有可能出现混沌运动、极限环等等。不过，我们觉得这一批评并不中肯。正如文献[2.53]指出的，不应把时间增量 Δt 看作一个常数，相反，它是一个按照分布 $(N/\tau_0) \exp[-\Delta t N/\tau_0]$ 随机涨落的连续变量，其平均值为 $\overline{\Delta t} = \tau_0/N$ 。由于动力学关联衰减的时间尺度是 τ_0 ，本身的量级甚至更大，时间变量相对于以有规则的步长 $\Delta t = \tau_0/N$ 增加的“时间”进程（它就是蒙特卡罗过程的微步数的编号）的涨落，在计算时移相关函数时被平均掉了。

于是在(2.1.35)式中得到的平均值就可以简单解释为沿着相空间中的随机轨道的时间平均，它由系统的主宰方程(2.2.1)所控制，这就是说，对于(2.1.5)，(2.1.35)式中考虑的变量 A ，现在得到

$$\bar{A} = \frac{1}{t_M - t_{M_0}} \int_{t_{M_0}}^{t_M} A(t) dt, \quad (2.2.2)$$

其中 t_M 是生成 M 个位形所流逝的“时间”， t_{M_0} 是生成 $M_0 < M$ 个位形的时间 ($t_M = M\tau_s/N$, $t_{M_0} = M_0\tau_s/N$)，由于我们事先规定了，(2.1.35) 式中求平均时不取前 M_0 个位形，因此平均值公式实际上是

$$\bar{A} = \frac{1}{(M - M_0)} \sum_{s=M_0+1}^M A(x_s).$$

由于 x_s 是在 $t = t_s = s\tau_s/N$ 时刻出现的位形 $x(t)$ ，我们可以把 $A = A(x(t))$ 看成是系统时间 t 的函数，比较时间平均(2.2.2)式与我们出发的公式(2.1.5)(它是一个正则系综平均)，显然这个重要性抽样蒙特卡罗方法将引发有关遍历性的问题，即时间平均是否像预期的那样，完全等同于系综平均。

这样，我们可以定义一个时移相关函数 $\langle A(t)B(0) \rangle_T$ 或 $\overline{A(t)B(0)}$ ，其中 B 代表任何别的物理变量：

$$\overline{A(t)B(0)} = \frac{1}{t_M - t - t_{M_0}} \int_{t_{M_0}}^{t_M - t} A(t + t') B(t') dt',$$

$$t_M - t > t_{M_0}. \quad (2.2.3)$$

在实际工作中，(2.2.2)和(2.23)式用在时间 t_{M_0} 足够大的情形，使得系统在时间 t_{M_0} 中已经弛豫到平衡，于是从 t_{M_0} 到 t_M 时刻的抽样所包括的状态 $x(t)$ 已经是按照平衡分布 $P(x, t) = P_{eq}(x)$ 分布的，与时间无关。但是，研究趋于平衡的非平衡弛豫过程也是令人感兴趣的，在这个区域中， $A(t) - \bar{A}$ 系统性地依赖于观察时间 t ，系综平均 $\langle A(t) \rangle_T - \langle A(\infty) \rangle_T$ 不为零（若系统是一遍历系统， $\lim_{t \rightarrow \infty} \bar{A} = \langle A \rangle_T = \langle A(\infty) \rangle_T$ ）。因此我们定义

$$\langle A(t) \rangle_T = \sum_{\{x\}} P(x, t) A(x) = \sum_{\{x\}} P(x, 0) A(x(t)), \quad (2.2.4)$$

在上式的第二步我们用了下述事实：涉及的系综平均实际上是以 $P(x, 0)$ 为权重在初始状态 $x(t=0)$ 的系综上求平均，然后 P 按主宰方程 (2.2.1) 随时间演化。在实际工作中，(2.2.4) 式意味着对 $n_{\text{run}} \gg 1$ 次统计独立的运行求平均

$$[A(t)]_{\text{av}} = \frac{1}{n_{\text{run}}} \sum_{l=1}^{n_{\text{run}}} A(t, l), \quad (2.2.5)$$

其中 $A(t, l)$ 是在这个非平衡蒙特卡罗求平均过程的第 l 次运行中在 t 时刻观察到的可观察量 A 之值。在实际工作中，各次运行之间的差别在于：时间演化的每一实现使用了不同的随机数，以及使用了不同的初始位形 $x(t=0)$ （但是，在特殊情况下，比如研究 Ising 铁磁体从零温度加热到非零温度其磁化强度的衰减时，初始位形是唯一的，因而对所有各次运行相同）。

在进一步讨论之前我们来问一个问题：同蒙特卡罗抽样所生成的前后相继的状态的编号 ν 相对应的“时间” t ，同一个真实系统在其中演化的物理时间有关系吗？一般说来，对这个问题的回答是没有关系。像 Heisenberg 磁体、经典流体等系统，的确有自己的由其变量的确定性方程描述的时间演化。例如，是牛顿定律而不是主宰方程 (2.2.1)，描述了流体中分子的运动；(2.1.3) 式考虑的 Heisenberg 铁磁体则按照下述方程演化：

$$\hbar \frac{d}{dt} S_k^z(t) = i[S_k^z, \mathcal{H}_{\text{Heisenberg}}] = -2J \sum_{j(\neq k)} [S_k^y S_j^x - S_k^x S_j^y], \quad (2.2.6)$$

其中 $2\pi\hbar$ 是 Planck 常数， j 是 k 的最近邻座点。虽然(人为的)随机动力过程和实际的物理动力过程二者在 $N \rightarrow \infty$ 时都得出相同的热平衡分布 (N 有限时也是如此，如果二者对应于完全相同的统计系综，即能量严格守恒的微正则系综的话)，但是一般说来，在 (2.2.1) 式描写的随机动力过程和实际的物理动力过程

之间很少有相似之处。例如，温度低于居里温度时，(2.2.6)式导致熟知的自旋波激发，而(2.2.1)式则绝不可能给出任何传播模式，只给出简单的弛豫行为。

当然，Ising模型的哈密顿量(2.1.1)的情形有所不同，由于 $[S_k, \mathcal{H}_{\text{Ising}}] = 0$ ，它不提供任何内禀的时间演化。对于Ising模型，(2.2.1)式提供的随机动力过程在物理上可以用自旋与一个热浴（例如基底晶格的热振动）之间的非常微弱的耦合来解释，这个微弱的耦合诱发系统中的随机自旋反转。类似地，在一种填隙式合金中，填隙原子的扩散可以用格点之间的随机跳动来模拟^[2.40,2.54,2.55]。由于相继两次跳跃之间的平均时间要比固体中原子振动的时间尺度大几个数量级，因此就研究扩散而言，可以再次非常合理地把这些声子近似为一个热浴。当然，填隙式合金也会有此近似变得不精确的情况，像超离子导体的情况。为了逼真地模拟这类系统的动力学，一种替代方案是分子动力学方法^[2.56]，这种方法要对牛顿定律进行数值积分。但是，如果系统包含有两组其特征时间相差很远的自由度，分子动力学方法会陷入麻烦，因为积分时间步长必须比快自由度的特征时间小得多，要把数值积分的时间尺度扩展到慢自由度的弛豫时间那么长是很不方便的（甚至是不可能的）。这时后者常常可以用一个适当的蒙特卡罗算法来模拟，其效率要高得多。

2.2.4 统计误差和时移弛豫函数

(2.2.1—2.2.5)式给出的动力学解释，除了应用于研究适当的模型系统的动力学之外，对于理解蒙特卡罗抽样的“统计误差”也是非常有用的^[2.6]。现在我们来讨论这一点。

假设存储了对一个量 A 的相继 n 次观察结果

$$A_\mu, \mu = 1, \dots, n \quad (n \gg 1).$$

我们考虑统计误差的平方的期望值

$$\begin{aligned} \langle (\delta A)^2 \rangle &= \left\langle \left[\frac{1}{n} \sum_{\mu=1}^n (A_{\mu} - \langle A \rangle) \right]^2 \right\rangle = \frac{1}{n^2} \sum_{\mu=1}^n \langle (A_{\mu} - \langle A \rangle)^2 \rangle \\ &\quad + \frac{2}{n^2} \sum_{\mu_1=1}^n \sum_{\mu_2=\mu_1+1}^n (\langle A_{\mu_1} A_{\mu_2} \rangle - \langle A \rangle^2). \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

把求和指标 μ_2 变成 $\mu_2 + \mu$, (2.2.7) 式可以重写为

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{n} \left[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 + 2 \sum_{\mu=1}^n \left(1 - \frac{\mu}{n} \right) (\langle A_0 A_{\mu} \rangle - \langle A \rangle^2) \right]. \quad (2.2.8)$$

我们还记得, 有一个时间 $t_{\mu} = \mu \delta t$ 和蒙特卡罗过程相联系, δt 是相继两次观察 A_{μ} 和 $A_{\mu+1}$ 之间的时间间隔 (可取 $\delta t = \Delta t = \tau_s / N$, 即在对 $\langle (\delta A)^2 \rangle$ 的计算中包括每个蒙特卡罗微步, 但是取 δt 比 Δt 大得多, 比方 $\delta t = \tau_s$ 或 $\delta t = 10\tau_s$, 常常效率更高). 把求和变换为对时间积分, 并且把 t_{μ} 中的下标 μ 去掉, 我们得到 [2.9]

$$\begin{aligned} \langle (\delta A)^2 \rangle &= \frac{1}{n} \left[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_n} \left(1 - \frac{t}{t_n} \right) [\langle A(0) A(t) \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle A \rangle^2] dt \right] \\ &= \frac{1}{n} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \left[1 + \frac{2}{\delta t} \int_0^{t_n} \left(1 - \frac{t}{t_n} \right) \right. \\ &\quad \left. \times \frac{\langle A(0) A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2} dt \right]. \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

当我们用 $\phi_A(t)$ 表示物理量 A 的归一化弛豫函数, 其定义为

$$\phi_A(t) = \frac{\langle A(0) A(t) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}. \quad (2.2.10)$$

注意, $\phi_A(0) = 1$ 和 $\phi_A(t)$ 当 $t \rightarrow \infty$ 时衰减到 0. 假设 $\phi_A(t)$ 在一个时间尺度 τ_A 上实际上已经衰减到 0, $\tau_A \ll t_n$. 我们可以用下

面的积分给予 τ_A 一个精确的意义:

$$\tau_A = \int_0^{\infty} \phi_A(t) dt. \quad (2.2.11)$$

由于我们假设 $\phi_A(t)$ 只有当时间 $t \ll t_n$ 才显著不为 0, (2.2.9) 式中的 t/t_n 项和 1 相比可以忽略, 并且积分上限可换成无穷大. 这给出

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{n} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] \left(1 + 2 \frac{\tau_A}{\delta t} \right). \quad (2.2.12)$$

若 $\delta t \gg \tau_A$, 那么 (2.2.12) 式中圆括号内非常近似于 1, 统计误差的形式和简单抽样中遇到的形式相同 (参看 (2.1.26) 式). 在相反的情况下, $\delta t \ll \tau_A$, 我们求得 ($n\delta t = \tau_{obs}$ 是求平均的时间)

$$\langle (\delta A)^2 \rangle \approx \frac{2\tau_A}{n\delta t} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] = 2 \frac{\tau_A}{\tau_{obs}} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2], \quad (2.2.13)$$

这个式子表明, 这时统计误差与时间间隔 δt 的选取无关. 虽然对于给定的平均时间 t_n , 选取较小的 δt 值会带来相应较大的观察次数 n , 但这并不会减小统计误差; 重要的只是弛豫时间 τ_A 和观察时间 τ_{obs} 的比值. $\langle (\delta A)^2 \rangle$ 一般并不由简单抽样结果 $[\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2]/n$ 给出, 而是被加强某个因子, 这一事实早在知道重要性抽样的一个恰当的动力学解释之前就已被注意到了, 因此增强因子曾被称为这个方法的“统计无效度”^[2.57]. 显然, 这并不是一个有用的概念, 因为从 Markov 过程由有关的主宰方程描述这一事实, 必然会得出 $1 + 2(\tau_A/\delta t)$ 这个因子. 相反, 前面所说明的动力学观点则导致这样一个想法: 可以利用选取跃迁概率 $W(x \rightarrow x')$ 的自由以及解释一次跃迁 $x \rightarrow x'$ 的微观意义的自由, 来使 τ_A 尽可能小. 这个想法是当前研究的一个题目^[2.58], 我们不在这里深入讨论. 如果这个想法能够成功地实现, 那么蒙特卡罗方法在相变点附近的实用性将会有极大的改善 (在相变点, τ_A 在

热力学极限下发散，即所谓临界慢化现象^[2.59]。

在结束本节时，我们通过非平衡平均值公式(2.2.4)定义一个非线性弛豫函数 $\phi_A^{(nl)}(t)$ ：

$$\phi_A^{(nl)}(t) = \frac{\langle A(t) \rangle_T - \langle A(\infty) \rangle_T}{\langle A(0) \rangle_T - \langle A(\infty) \rangle_T}, \quad (2.2.14)$$

和与之对应的时间

$$\tau_A^{(nl)} = \int_0^\infty \phi_A^{(nl)}(t) dt. \quad (2.2.15)$$

于是，系统已经很好地平衡的条件可以简单地表示为

$$t_{M_0} \gg \tau_A^{(nl)}. \quad (2.2.16)$$

注意(2.2.16)式对一切量 A 都必须成立，因此，如果想要可靠地估计对 t_{M_0} 的合适的选取，重要的是要特别注意弛豫得最慢的量（它的 $\tau_A^{(nl)}$ 最大）。在二级相变点附近，弛豫最慢的量通常是相变的序参量，而不是内能。因此，某些蒙特卡罗研究工作中宣布的“准则”——通过监测内能的时间演化来判断系统已建立平衡，显然根据不足。

2.3 有限尺寸效应

2.3.1 逾渗转变问题的有限尺寸效应

统计物理学中最简单的相变问题大概是所谓逾渗转变这一纯几何问题^[2.60]。考虑一个无穷大点格，点格上的每个座点或者以概率 p 被随机占领，或者空位概率为 $1-p$ （座逾渗问题^[2.60]）。邻近的已占座点形成“集团”（图2.8）。存在着一个临界浓度（临界概率） p_c ，使得当 $p < p_c$ 时点格上只存在有限大小 l 的集团 $\{l = 1, 2, \dots\}$ ，而当 $p \geq p_c$ 时则形成一个无穷大集团，它从点格的一边“渗透”到对边。

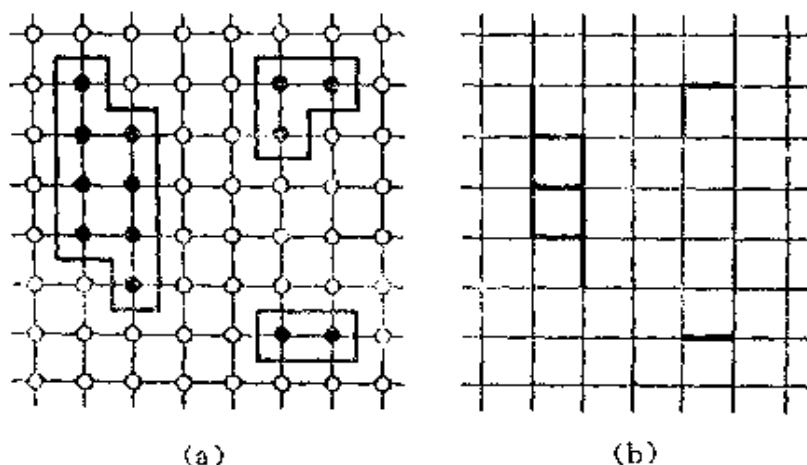


图2.8 (a) 座逾渗问题方形点格上的集团，座点被占概率为 p (实心点) 或空位概率为 $1-p$ (圆圈)，相邻的被占座点构成集团，因此图中所示的 8×8 格子包含有 3 个集团，分别有 $l=2$ ， $l=3$ 和 $l=8$ 个被占座点；(b) 键逾渗问题方格子上的集团，各个键以概率 p 被占 (粗线) 或以概率 $1-p$ 为空 (细线)，彼此相连的被占键构成集团，图中所示格子包含 3 个集团，分别具有 $l=1$ ， $l=2$ 和 $l=9$ 个被占键

对于一个线度为 L 的有限大点格 (为了具体起见，我们取它为简单立方)，写一个算法以产生这样一个部分填充的格子的样本位形是很简单的事。如果我们以 $N(K1, K2, K3)$ 表示点格中的一个座点 $(K1, K2, K3)$ 被占的情况，并且 FORTRAN 子程序 RANF(I) (I 是一个哑元) 提供在 $[0, 1]$ 中均匀分布的随机数，那么解决这个问题的一個蒙特卡罗程序如下：

```
DO 1 K1=1,L
DO 1 K2=1,L
DO 1 K3=1,L
N(K1,K2,K3)=0
```

```
1 IF(RANF(I).LT.P) N(K1,K2,K3)=1
```

穿过点格的一次扫描就决定了整个系统，而无须等待某种“平衡”的建立；这同前一节讨论的重要性抽样不同，而重新回到一

个简单抽样问题。当然，为了回答下面这些问题，比如：点格中存在多少个包含 l 个被占座点的集团 $n_l(p)$ （按座点总数平均）？存在着一个由被占座点组成的“跨越集团”，它从点格的一边伸展到对边吗？等等，还需要复杂的程序来分析产生的位形。这些我们不在这里考虑，而将在第3.2.4节讨论，那里还将讨论逾渗问题的各种推广和变型。

为了描述逾渗转变，我们不仅要估计 p_c ，而且要计算逾渗概率 $P_\infty(p)$ （一个被占座点属于跨越集团的概率）和逾渗磁化率* χ ，后者的定义是

$$\chi = \sum_{l=1}^{\infty} l^2 n_l(p) / p, \quad (2.3.1)$$

式中撇号代表求和中不包括无穷大集团。我们预期（在无穷大点格中）当 $|p - p_c| \rightarrow 0$ 时这些量会表现出如下的临界奇异性^[2.60]：

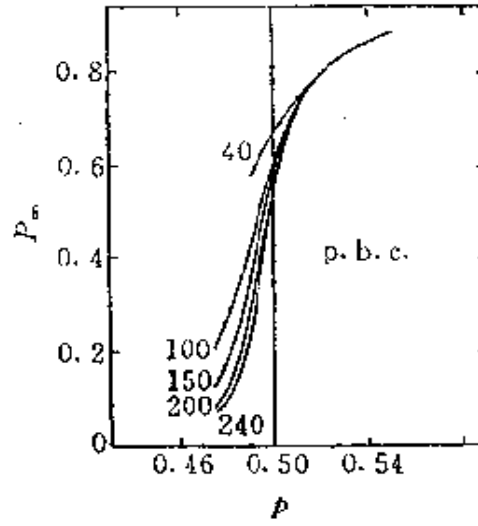
$$P_\infty(p) = \hat{B}_p \left(\frac{p}{p_c} - 1 \right)^{\beta_p}, \quad (2.3.2a)$$

$$p > p_c \quad (p < p_c \text{ 时 } P_\infty(p) \equiv 0),$$

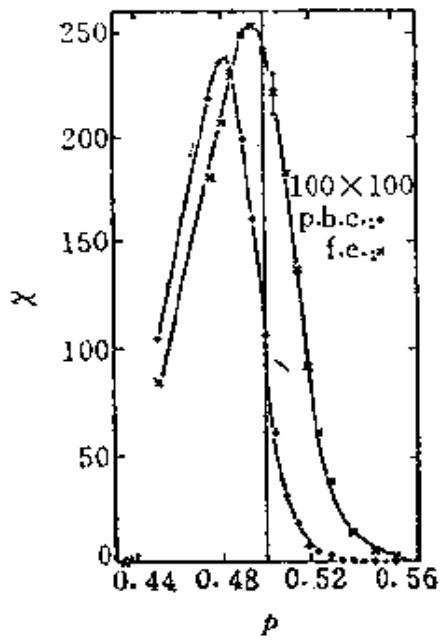
$$\chi(p) = \begin{cases} \hat{F}_p^+ \left(1 - \frac{p}{p_c} \right)^{-\gamma_p}, & p < p_c, \\ \hat{F}_p^- \left(\frac{p}{p_c} - 1 \right)^{-\gamma_p}, & p > p_c, \end{cases} \quad (2.3.2b)$$

在一个有限大点格中， $\chi(p)$ 不会发散，而是到达一个高度有限的极大值；这个极大值的大小取决于点格的大小（图2.9）^[2.68]。同样，有限大点格中逾渗概率 $P_\infty(p)$ 在任何 $p > 0$ 下都不会为零，只要 $p > 0$ ，它就一定会取一个小的非零值（在一个有限大系统

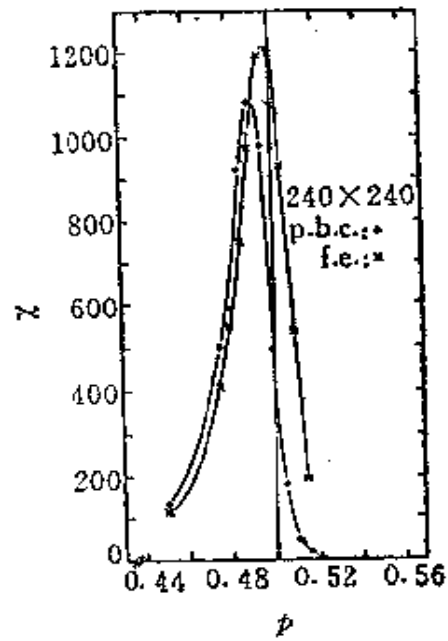
* 这个量本来的意义是除无穷大集团外其他有限集团的平均大小。把逾渗系统同磁性系统比较时，这个量相当于磁化率。参看R.Zallen，非晶态固体物理学，北京大学出版社，1988，§4.4——译者



(a)



(b)



(c)

图2.9 逾渗概率 $P_\infty^{(L)}(p)$ 同 p 的关系。(a) 对于方格子上的键逾渗问题, 选用不同的 L 值和周期边界条件 (p.b.c.)。(b) 和 (c) 画出 $\chi^{(L)}(p)$ 的对应结果, 也包含有使用自由边界 (f.e.) 的数据 (取自[2.63])

中, 只要 $p > 0$, 那么哪怕是全部座点都被占的概率也不是零, 在一个 d 维系统中它是 $p^{L^d} = \exp(L^d \ln p)$; 在 $p \rightarrow 0$ 时发生逾渗的概率是 $p^L = \exp(L \ln p)$. 于是在一个有限点格中, 和逾渗转变相联系的奇异性 (2.3.2a, b) 被平滑化了, 在转变处的这种平滑化在几何上是容易理解的 [2.31]. 在一个有限点格上, 只可能有有限集团, 集团大小的分布 $n_l(p)$ 和逾渗几率 $P_\infty(p)$ 都是 p 的光滑 (解析) 函数, 对于无穷大点格, 集团大小分布的渐近行为是 [2.60]

$$n_l(p) \underset{l \rightarrow \infty}{\sim} l^{-\tau} \bar{n} \left\{ l^\sigma \left(1 - \frac{p}{p_c} \right) \right\}, \quad (2.3.3a)$$

$$\tau = 2 + 1/\delta_p, \quad \sigma = 1/(\beta_p \delta_p) = 1/(\gamma_p + \beta_p).$$

虽然在无穷大点格上, 在 $p = p_c$ 处集团的大小分布随着 $l \rightarrow \infty$ 按照幂函数规律 $n_l(p) = l^{-\tau} \bar{n}(0)$ 衰减, 在一个有限点格上, 这个幂函数规律只对那些半径 r_l 明显地小于点格线度 L 的集团才成立. 由于

$$r_l \underset{l \rightarrow \infty}{\sim} l^{1/d_f}, \quad (2.3.3b)$$

其中 d_f 是逾渗集团的“分维” [2.60], 并且在 $p = p_c$ 时一个集团跨越点格 ($r_l \approx L$) 的概率为 1, 这样, 我们得到

$$\begin{aligned} L^d \int_{r_l=L}^{\infty} n_l(p) dl &\approx L^d \bar{n}(0) \int_{(L/\hat{r})^{d_f}}^{\infty} l^{-\tau} dl \\ &= \bar{n}(0) L^{d+d_f(1-\tau)} \hat{r}^{-d_f(1-\tau)} / (\tau-1) = 1, \end{aligned} \quad (2.3.3c)$$

这意味着 L 的幂指数为零, 即

$$\begin{aligned} d_f &= d/(\tau-1) = d/(1+1/\delta_p) = d\beta_p\delta_p/(\beta_p\delta_p + \beta_p) \\ &= d(\beta_p + \gamma_p)/(2\beta_p + \gamma_p) = (\beta_p + \gamma_p)/\nu_p \\ &= d - \beta_p/\nu_p, \end{aligned}$$

其中用了些标度定律, 如包含相关长度指数 $\nu_p(\xi_p \propto |p - p_c|^{-\nu_p})$

的超标度关系 $d\nu_p = 2\beta_p + \gamma_p$ 。从 d_f 的这个表示式和 (2.3.3b) 式我们得到，一个 $r_L = L$ 的“跨越集团”中的座点数目为

$$l_L = (L/\xi)^{d_f} \propto L^{d-\beta_p/\nu_p},$$

因而被占座点中属于这样一个跨越集团的比率必定为

$$P_\infty^{(L)}(p_c) \propto L^{-d} l_L = L^{-\beta_p/\nu_p},$$

的量级。

2.3.2 逾渗问题的有限尺寸标度

现在，由有限尺寸标度假设^[2.23-2.26]得出一个表示式，它把 $L \gg \xi_p$ 时的 (2.3.2a) 式和 $p = p_c$ 处关于 $P_\infty^{(L)}(p)$ 的上述结果衔接起来（注意 $P_\infty^{(L)}(p)$ 也可定义为座点在最大的集团内的比率），

$$P_\infty^{(L)}(p) = L^{-\beta_p/\nu_p} \tilde{P}(L/\xi_p), \quad (2.3.4)$$

$$\tilde{P}(x \gg 1) \propto x^{\beta_p/\nu_p} \propto L^{\beta_p/\nu_p} (p - p_c)^{\beta_p},$$

上式表达了这样一个原理：点格的有限尺寸对逾渗转变的影响，由相关长度同格子线度的比值控制。图2.10(a)示出对这个关系的检验^[2.63]。对磁化率 $\chi^{(L)}(p)$ 可以提出一个类似的关系：

$$\chi^{(L)}(p) = L^{\gamma_p/\nu_p} \tilde{\chi}(L/\xi_p), \quad \tilde{\chi}(x) \underset{x \rightarrow \infty}{\propto} x^{-\gamma_p/\nu_p}. \quad (2.3.5)$$

标度函数 $\tilde{P}(x), \tilde{\chi}(x)$ 在 x 值大时的渐近行为总是从下述条件推出：在热力学极限下， L 的所有幂次必定会消掉，一定会得出 (2.3.2), (2.3.3) 式那样正确的幂函数规律。图2.10(b)示出对逾渗磁化率的有限尺寸标度关系 (2.3.5) 的检验^[2.63]。

在 p 接近 p_c 时一定有 $\chi^{(L)}(p \approx p_c) \propto L^{\gamma_p/\nu_p}$ ，这一事实也可直接从 χ 的定义和 (2.3.3a) 式得出，注意到求和必须在集团大小为 l_L 的量级时截断：

$$\chi^{(L)} \approx \frac{1}{p} \sum_{l=1}^{l_L} l^2 n_l(p) \underset{p \text{ 靠近 } p_c}{\approx} \bar{n}(0) \sum_{l=1}^{l_L} l^{2-\tau}/p_c$$

$$\begin{aligned}
&\approx \bar{n}(0) p_c^{-1} \int_0^1 l^{2-\tau} dl \\
&\approx \bar{n}(0) p_c^{-1} l_L^{3-\tau} / (3-\tau) \propto L^{d_f(3-\tau)} \\
&= L^{d(1-1/\delta_p)/(1+1/\delta_p)} = L^{\gamma_p} p_c^{-\gamma_p}
\end{aligned} \tag{2.3.6}$$

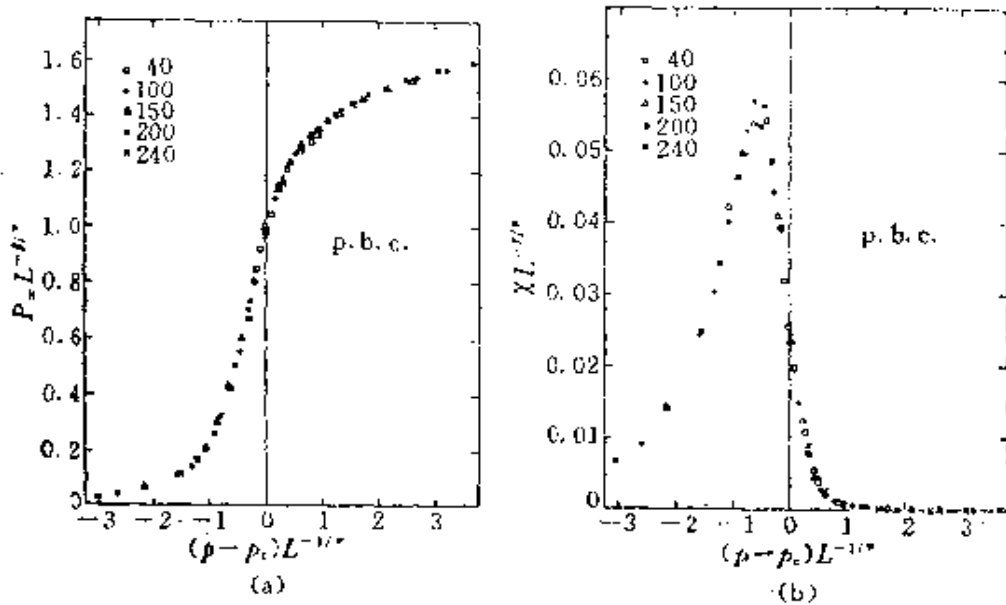


图2.10 图2.9(a)中示出的逾渗概率 $P_\infty^{(L)}(p)$ 的数据和图2.9(b), (c)所示的逾渗磁化率的数据的有限尺寸标度关系图。(a)中画的是 $L^{\beta_p/\gamma_p} P_\infty^{(L)}(p)$ 同 $(p-p_c)L^{1/\nu_p}$ 的关系, (b)中是 $L^{-\gamma_p/\gamma_p} \chi^{(L)}(p)$ 同 $(p-p_c)L^{1/\nu_p}$ 的关系。各个指数的选取如下: $\beta_p=0.139$, $\nu_p=4/3$, $\gamma_p=2.41$ (取自[2.63])

有限尺寸标度关系的这种几何解释在逾渗转变时的自洽性, 可以通过由(2.3.1), (2.3.2)计算特征长度 ξ_p 而看出:

$$\begin{aligned}
\chi \xi_p^2 &= \sum_{l=1}^{\infty} r_l^2 l^2 n_l(p) \approx \hat{r}^2 \int_0^{\infty} l^{2/d_f+2-\tau} \bar{n} \left[l^\sigma \left(1 - \frac{p}{p_c} \right) \right] dl \\
&= \left(1 - \frac{p}{p_c} \right)^{-(3-\tau+2/d_f)/\sigma} \hat{r}^2 \int_0^{\infty} x^{2/d_f+2-\tau} \bar{n}(x^\sigma) dx \\
&\propto \left(1 - \frac{p}{p_c} \right)^{-2\gamma_p/\gamma_p} = L^{\gamma_p} p_c^{-\gamma_p},
\end{aligned} \tag{2.3.7}$$

因为 $1/\sigma d_f = \nu_p$ 。

在想用(2.3.4)和(2.3.5)式定出 p_c 的位置并决定诸指数 $\beta_p/\nu_p, 1/\nu_p$ (或 γ_p/ν_p) 之值时, 可以通过一个联立最佳拟合程序来进行, 使曲线族 $P_{\infty}^{(L)}(p)$ 尽可能地合并为一条单一曲线, 即标度函数 $\tilde{P}(x)$ (或把曲线族 $\chi^{(L)}(p)$ 合并为单根曲线即标度函数 $\tilde{\chi}(x)$, 如果画得合适的话), 图2.10示出这种“数据合并”的例子。但是, 为了得到精确的估值, 重要的是要有足够大的 L 值, 因为式(2.3.4), (2.3.5)只是在极限 $L \rightarrow \infty$ 下渐近地成立; 对于有限的 L , 存在有对有限尺寸标度关系的系统性修正, 它将导致对理想的数据合并的系统性偏离。由于在画图2.10时完全没有考虑这些修正, 永远不能肯定 $p_c, \beta_p/\nu_p, 1/\nu_p, \gamma_p/\nu_p$ 的“最佳拟合”值与它们的真值之间是否有系统性的偏差。在对系统中出现一个“跨越集团”(从一边到达对边)的概率 $P_s(p)$ 进行抽样时不会发生这个问题。由于无穷大点格在 $p < p_c$ 时 $P_s(p) = 0$ 而 $p \geq p_c$ 时 $P_s(p) = 1$, $P_s(p)$ 的有限尺寸标度关系简单地为

$$P_s^{(L)}(p) = \tilde{P}_s(L/\xi_p), \quad (2.3.8)$$

结果, 选取不同的 L 时的不同曲线 $P_s^{(L)}(p)$ 应当在 $p = p_c$ 相交于一个公共交点 $\tilde{P}_s(0)$, 尽管存在对标度关系的修正。把这些交点外推到极限 $L \rightarrow \infty$, 就给出 p_c 的一个估值, 它不会被临界指数的选取造成偏差, 应当不会有上述的那种系统性误差。图2.11示出的例子表明, 很容易从这种交点方法得到精确的估值^[3.64]。读者做过第3.2.4节的练习3.18, 3.25后, 会产生类似的蒙特卡罗数据。

2.3.3 破缺对称性和热相变问题上的有限尺寸效应

有限尺寸对逾渗转变的影响是比较容易理解的, 首先, 因为它们有明显的几何解释, 其次, 由于在转变时没有任何对称性的自发破缺, 这时情况比较简单。现在我们来讨论通常的热致相变,

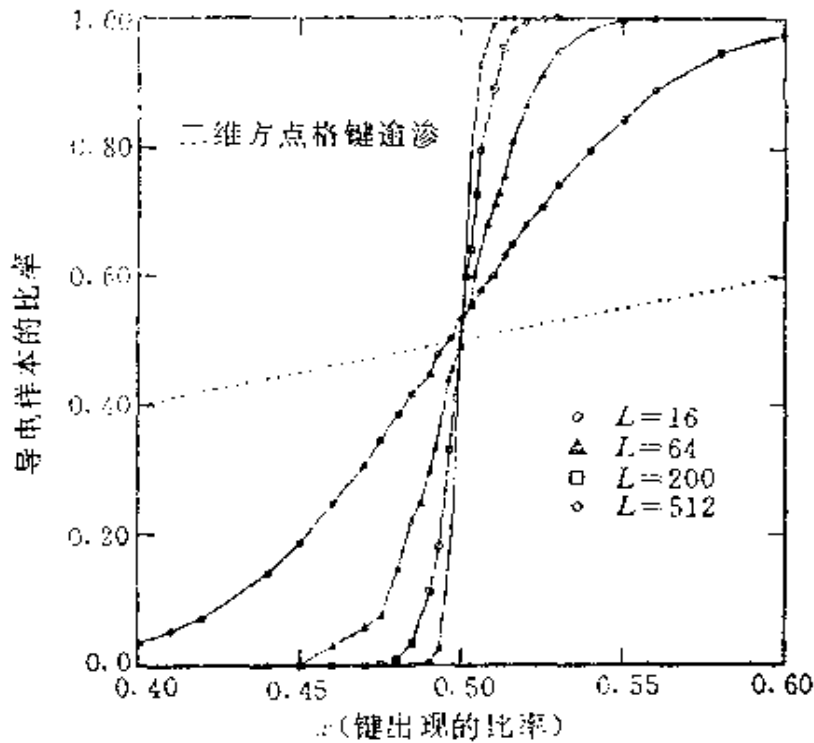


图2.11 方格子上的键逾渗问题中导电样本在样本总数中的比率同 $p(=x)$ 的关系, $p(=x)$ 是一个键导电的概率, 因而一个键绝缘的概率便是 $1-p$ 。不同的曲线对应于不同的点格尺寸 L 。只有在出现一个“跨越集团”之后, 一个样本才是导电的, 因而这个量正是 $P_s^{(L)}(p)$ 的量度。逾渗阈值 p_c 作为这些曲线的公共交点而得到(取自[2.64])

这时系统状态从高温下的一个无序态变为低于二级相变的某个临界温度 T_c 的温度下的一个自发有序态。维型例子仍是 Ising 铁磁体 (2.1.1), 这时上述的低温相是一个具有非零的自发磁化强度的状态 (外加磁场 H 为 0 时自发磁化强度为 $\pm |M_{sp}|$)。人们已经熟知, 这种对称性破缺只有在热力学极限下才能发生。对于一个有限系统, 永远有一个不为 0 的概率使系统从一个靠近 $+|M_{sp}|$ 的状态过渡到一个靠近 $-|M_{sp}|$ 的状态, 反方向也一样, 见图 2.12。因此, 外场为 0 时, 不论 N 之值多大, 在一切非零温度下, 磁化强度 M 均为 0;

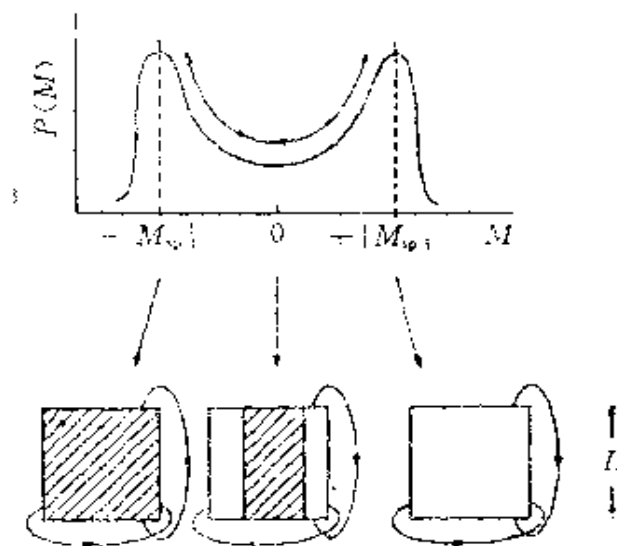


图2.12 一个有限系统在低于临界温度 T_c 的一个温度 T 下磁化强度的概率分布 $P(M)$ ，在这个温度下，热力学极限下会出现自发磁化强度 $\pm |M_{sp}|$ 。 $P(M)$ 在 $M = -|M_{sp}|$ 附近（有限点格在这里有一个大致均匀负磁化强度，有阴影）有一个峰，在 $M = |M_{sp}|$ 附近（有限点格在此有一个大致均匀的正磁化强度，无阴影）有第二个峰，在二者之间 $P(M)$ 有一个极小，即使对 $M = 0$ ，它也不为零。这个中间态对应于有限格子中磁化强度的非均匀分布：利用周期边界条件，磁化强度反号的两个磁畴共存。在一个有限点格上，系统自发地从具有均匀负磁化强度的态，通过这个中间的混合相状态，变到具有均匀正磁化强度的态，反之亦然。

$$M(T, H = 0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle S_i \rangle_{T, H=0} = 0, \quad (2.3.9)$$

事实上，序参量 M_{sp} 的原始定义是对 $M(T, H)$ 首先取热力学极限 $N \rightarrow \infty$ ，然后令 H 趋于 0：

$$M_{sp} = \lim_{H \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} M(T, H). \quad (2.3.10)$$

这个双重极限过程在实际的蒙特卡罗工作中用起来是相当不方便的，因而只在特殊场合下才应用，比如在成序过程很难理解的自旋玻璃的情形下^[2,65]。在低于 T_c 而且不太接近临界点的 Ising 铁磁体中，人们会发现一个亚稳的磁化强度 $+M$ （或 $-M$ ，取决于

初始条件), 它对长观测时间足够稳定, 因此, 虽然不对完整的平衡系统抽样, 也能得出有适当精度的估值^[2.66]. 但是, 甚至在高于 T_c 的温度下, 通常也会发现一个小的磁化强度, 这是由于涨落的原故, 在一个有限系统中观察一段有限时间时, 涨落没有完全平均掉. 这个小磁化强度之值为 $\pm \delta M$, 其中 δM 依赖于系统大小和观测时间 t_{obs} . 同样, 在温度低于 T_c 时, 磁化强度也会在 $M \pm \delta M$ 或 $-M \mp \delta M$ 的范围内涨落, 不能依靠让 t_{obs} 越来越大而使 δM 任意小. 如果 t_{obs} 变到遍历时间 t_0 的量级, t_0 是观察从 $+M$ 转变到 $-M$ 或反过来所需要的时间, 就开始使磁化强度平均为零. 在 T_c 附近这种情况变得特别糟糕, 这时 M 本身剧烈减小, 而 δM 却增大, 直到涨落变得与序参量本身可以比较为止. 请读者务必做第3.4.1节的作业并把练习3.36编程以证实这些话.

为了避免这些问题, 标准的办法是记录方均根序参量^[2.67]

$$\begin{aligned} M_{\text{rms}} &= \sqrt{\langle M^2 \rangle_T} = \left\langle \left(\sum_{i=1}^N S_i / N \right)^2 \right\rangle_T^{1/2} \\ &= \frac{1}{N} \left(\sum_{i,j=1}^N \langle S_i S_j \rangle_T \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

特别是, 对各向同性自旋系统(2.1.2), (2.1.3)必须用上式, 这些系统有一个矢量序参量 \mathbf{M}_{sp} , 其取向甚至不是亚稳的. 人们观察到单位矢量沿 \mathbf{M}_{sp} 的一种“旋转扩散”^[2.68], 因而 $\langle \mathbf{M}_{\text{sp}} \rangle_T$ 的每个分量随着观测时间的增大而不断减小.

当然, 在一个有限系统中, 序参量 M_{rms} 在一切温度下都不为0. 即使温度为无穷大, 这时 $\langle S_i S_j \rangle = \delta_{ij}$, 仍然得到 $M_{\text{rms}} = 1/\sqrt{N}$.^[2.67] 在略高于 T_c 的温度上, 相关函数 $G(\mathbf{r}_{ij}) \equiv \langle S_i S_j \rangle_T$ 缓慢衰减, M_{rms} 甚至更加大得多. 用周期边界条件, $G(\mathbf{r}_{ij})$ 是平移不变的, 从而

$$M_{rms} = \left(\sum_{i=1}^N \langle S_i S_j \rangle_T / N \right)^{1/2}$$

也是平移不变的。现在我们来讨论这个表示式在 T_c 下的情况^[2.21]。在一个无穷大系统中，温度为 T_c 时各种关联的衰减由下式描述：

$$G(r_{ij}) \xrightarrow{|r_{ij}| \rightarrow \infty} \hat{G} |r_{ij}|^{-(d-2+\eta)}, \quad (2.3.12)$$

其中 \hat{G} 是一个“临界幅度”， η 是一个临界指数。现在我们来近似一个尺寸为 L^d 的有限大小系统中的 $G(r_{ij})$ ，如果 $|r_{ij}| < L/2$ 令 $G(r_{ij})$ 也取(2.3.12)式规定的值。于是我们得到^[2.21]

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \langle S_i S_j \rangle_T &\propto \int_0^{L/2} r_{ij}^{d-1} dr_{ij} \langle S_i S_j \rangle_T \\ &\propto \int_0^{L/2} r_{ij}^{1-\eta} dr_{ij} \propto L^{2-\eta}, \end{aligned} \quad (2.3.13a)$$

从而 M_{rms} 变为 ($N = L^d$)

$$M_{rms}^{T=T_c} \propto (L^{2-\eta})^{1/2} \propto L^{-\beta/\nu}, \quad (2.3.13b)$$

其中我们用了标度定律^[2.60] $(2-\eta) = \gamma/\nu$, $d\nu = 2\beta + \gamma$ 。注意(2.3.13b)式同逾渗问题的对应结果 $P_\infty^{(L)}(p_c) \propto L^{-\beta/\nu}$ 很相似。

2.3.4 序参量的概率分布及用它论证有限尺寸标度和唯象重正化

(2.3.13b) 式这个结果已经很典型地代表了有限尺寸标度理论^[2.25-2.26]。为了更系统地描述这个理论，现在我们来讨论序参量 s 的概率分布^[2.25]。当温度 $T > T_c$ 及系统的线度 L 超过序参量涨落的关联长度 ξ ($\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$) 时，这个分布应当是(2.1.6)式中考虑过的那种高斯型的：

$$P_L(s) = L^{d/2} (2\pi k_B T \chi^{(L)})^{1/2} \exp[-s^2 L^d / (2k_B T \chi^{(L)})], \quad (2.3.14)$$

$$T > T_c, \quad H = 0.$$

上式中通过分布的半宽度定义的“磁化率” $\chi^{(L)}$, 当 $L \rightarrow \infty$ 时应当平滑地趋向于无穷大系统的磁化率 χ (记住 $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$). 对于 $T < T_c$ 但仍然有 $L \gg \xi$, 分布在 $\pm M_{sp}$ 附近的值 $\pm M_L$ 处有两个峰; 在这两个峰附近仍然适用高斯函数描述(虽然在 $s = 0$ 附近有不同的行为[2.25, .270]):

$$P_L(s) = \frac{L^{d/2}}{(2\pi k_B T \chi^{(L)})^{1/2}} \left[\frac{1}{2} \exp\left(-\frac{(s - M_L)^2 L^d}{2k_B T \chi^{(L)}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{(s + M_L)^2 L^d}{2k_B T \chi^{(L)}}\right) \right], \quad T < T_c, \quad H = 0. \quad (2.3.15)$$

$P_L(s \approx 0) \propto \exp(-2L^{d-1} f_{int} / k_B T)$ 是一个很小的量, 其中 f_{int} 是系统的界面张力 [2.70]. $P_L(s \approx 0)$ 量度了系统移出 $+M_L$ 附近的区域的概率, 其机制是通过自发产生两个大小为 L^{d-1} 的分界面以生成一个跨越系统的负磁化强度畴域. 依靠这种机制, 系统可以从 $+M_L$ 过渡到 $-M_L$, 反方向亦然, 见图 2.12. 由于观察这些转变所需的观察时间随着 L 按照 $P_L(s = M_L) / P_L(s = 0)$ 增大, L 大时不能在合理的观察时间内看到这样的转变. 因此不对完整的对称分布(2.3.15)进行抽样, 它的

$$\langle s \rangle_L = \int_{-\infty}^{+\infty} s P_L(s) ds = 0,$$

而是只对它的一半抽样:

$$\langle s \rangle'_L = \frac{\int_0^{\infty} s P_L(s) ds}{\int_0^{\infty} P_L(s) ds} = \langle |s| \rangle_L. \quad (2.3.16)$$

当(2.3.15)是实际分布 $P_L(s)$ 的准确描述时, 范围受限制的平均值 $\langle s \rangle_L$ 应和峰值位置 M_L 重合, 但是由于实际模拟中与高斯分布的偏离, 这些量可能有所不同, 但是, 在外推到热力学极限时, 所有这些量都应给出自发磁化强度

$$\lim_{L \rightarrow \infty} M_L = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle |s| \rangle_L = \lim_{L \rightarrow \infty} \langle s^2 \rangle_L^{1/2} = M_{sp}. \quad (2.3.17)$$

这些关系当然比使用(2.3.10)更方便. 图2.13显示这些关系的应用, 这里只对一个大小为 $N = 24^3$ 的系统进行模拟, 不过在一次

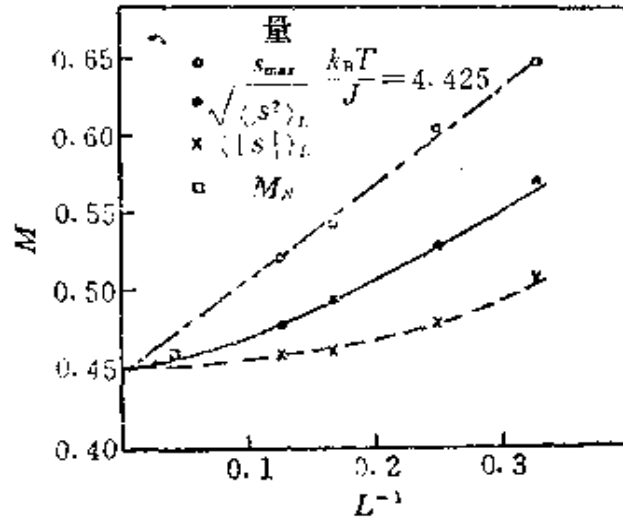


图2.13 简单立方格子上具有最近邻相互作用的三维 Ising 模型的自发磁化强度的估值, 温度 ($k_B T/J = 4.425$) 低于临界点 ($k_B T_c/J \approx 4.51$), 其中 J 是交换常数, 见 (2.1.1). 这些估值是通过将极大值位置 (s_{max}) 和矩 $\langle s^2 \rangle_L$ 及 $\langle |s| \rangle_L$ 等对系统尺寸的依赖关系外推到 $L^{-1} \rightarrow 0$ 而得到的, 不同尺寸的系统的数来自一个尺寸为 24^3 的系统的子系统. 也包括了整个系统的磁化强度 (M_N) 的直接估值 (取自 [2.71])

运行中同时取几个不同的 L 值 ($L < 24$) 的子系统, 记录各个子系统序参量分布 [2.25, 2.71]. 同样, 磁化率既可通过涨落-耗散关系估值 (把它同磁化强度的涨落联系起来), 也可根据半宽度 Δs 或诸峰值的高度 $P_L(0), P_L(M_L)$ 等来估值:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\langle s^2 \rangle_L L^d}{k_B T} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{P_L^{-2}(0) L^d}{2\pi k_B T}$$

$$= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{(\Delta s)^2 L^d}{8k_B T \ln 2} = \chi, \quad T > T_c, \quad (2.3.18a)$$

$$\begin{aligned} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\langle s^2 \rangle - \langle |s| \rangle^2}{k_B T} L^d &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{P_L^{-2}(M_L) L^d}{8\pi k_B T} \\ &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{(\Delta s)^2 L^d}{8k_B T \ln 2} = \chi, \quad T < T_c. \quad (2.3.18b) \end{aligned}$$

(2.3.14), (2.3.15) 二式在 $L \gg \xi$ 下成立。在实际计算中通常 ξ 是未知的, 这时研究此分布的高斯特性的方便办法是计算四阶累积量 U_L [2.25] (或等效的量 $g_L = -3U_L$, 它叫做重正化耦合常数 [2.72])

$$U_L = 1 - \frac{\langle s^4 \rangle_L}{3\langle s^2 \rangle_L^2}. \quad (2.3.19)$$

当 $T > T_c$ 且 $L \gg \xi$, 可以证明 U_L 按 $U_L \propto L^{-d}$ 减小到 0. [2.25] 当 $T < T_c$ 且 $L \gg \xi$, 从 (2.3.15) 式可以证明 U_L 趋于 $U_\infty = 2/3$. 当 $L \ll \xi$, 则情况相反, U_L 随温度和线度大小只有微弱变化, 它保持接近于“定点”值 U^* , U^* 是普适的但并非没有价值。

累积量的这一行为使得它对得到 T_c 本身的估值非常有用, 这个估值不会被任何有关临界指数的假设造成偏差 [2.25], 可以对各个不同的 L 画 U_L 和 T 的关系曲线, 然后从这些曲线的公共交点求 T_c . 下面将证明, 有限尺寸标度意味着存在这样一个公共交点。由于对有限尺寸标度关系的修正, 在系统的线度很小时, 不同的各对 (L, L') 之交点可能会有些分散 (图 2.14)。但是, 这个“累积量交点方法”的精度是相当好的。它已被应用到许多模型上 [2.13, 2.25, 2.29, 2.71-2.78], 包括一些复杂的例子像自旋玻璃 [2.77] 和具有立方各向异性的 XY 模型 [2.73]。还请注意, 用这个方法在 Santa Barbara 的专用计算机上得出的三维 Ising 模型的临界点的估值 [2.72], $J/k_B T_c = 0.221650(\pm 5)$, 在精度上可以同现有的用得最广泛的级数展开方法和蒙特卡罗重正化群方法的估值 [2.79] 相

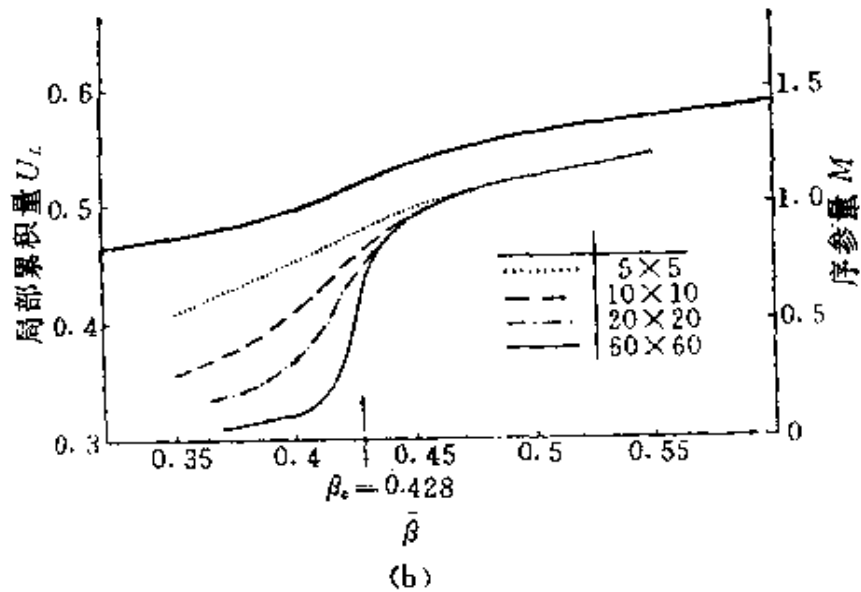
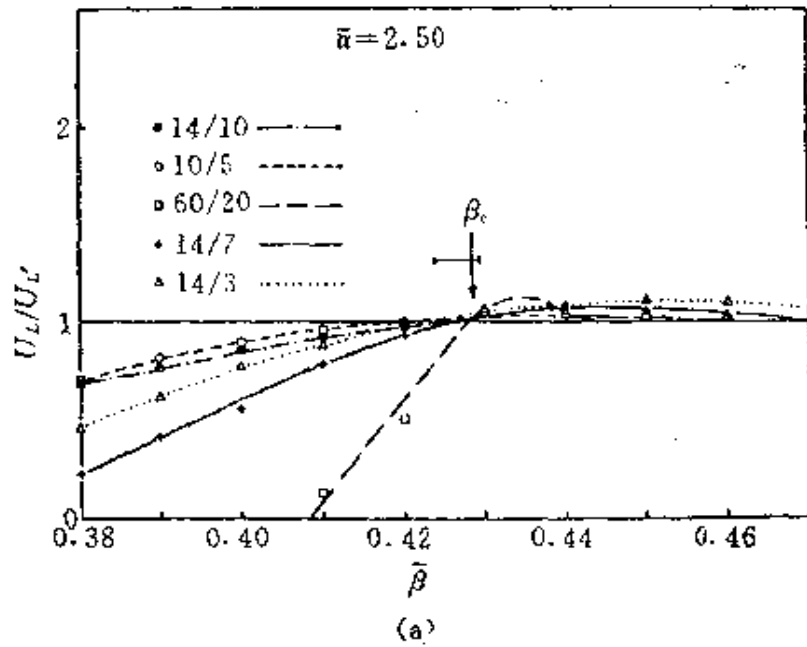


图2.14 (a) 确定方格子上 ϕ^4 模型(2.1.43)的临界耦合 $\tilde{\beta}_c$, 其中对具体的选取 $\tilde{a} = 2.50$ 和各个比值 $U_L/U_{L'}$, 各对 (L, L') 之值如图所示, 诸参数被重正化为 $\tilde{a} = (A + 2d)C^2/B$, $\tilde{\beta} = -C(A + 2dC)/B$. 注意横坐标用的比例尺很大, 以显示这个方法的精度 (b) 同一模型的序参量 M_L 的变化(取自[2.13])

$$\text{其中, } M_L = \left\langle \left| \sum_{i=1}^N \phi_i / \sqrt{-(A + 2dC)/B} \right|^2 / N \right\rangle$$

竞争,虽然文献^[2.72]中的工作被一些假的有限尺寸效应所牵累,在不同的计算机上做的有关工作^[2.80-2.82]表明,这种假的有限尺寸效应是由品质不好的伪随机数引起的。

现在我们来讨论在 L 不一定大于 ξ 的区域中分布函数 $P_L(s)$ 的描述。关键的想法是,作为 L , s 和 ξ 的函数的 $P_L(s)$ (和 ξ 的函数关系通过 $\xi \propto |1 - T/T_c|^{-\nu}$ 反映出对温度的依赖关系,前面已指出了这一点),并不是分别依赖于这三个变数,而只依赖于两个无量纲的组合^[2.25] L/ξ 和 $s\xi^{\beta/\nu}$:

$$P_L(s) = \xi^{\beta/\nu} P(L/\xi, s/\xi^{\beta/\nu}) = L^{\beta/\nu} \tilde{P}(L/\xi, sL^{\beta/\nu}). \quad (2.3.20)$$

其中幂函数形式的前置因子是用来保证归一化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} P_L(s) ds = 1,$$

而在(2.3.20)式的最后一部分中我们用

$$sL^{\beta/\nu} = (s/\xi^{\beta/\nu})(L/\xi)^{\beta/\nu}$$

代替 $s/\xi^{\beta/\nu}$ 作为第二个标度变量。在 $L \rightarrow \infty, \xi \rightarrow \infty$, 而 L/ξ 有限在的极限下, (2.3.20)式应当成立,由它可以直接推出与(2.3.4), (2.3.5), (2.3.8)类似标准的有限尺寸关系^[2.23,2.24], 只要取这个分布的适当的矩

$$\langle |s| \rangle_L = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L/\xi), \quad (2.3.21a)$$

$$\chi'(L, T) \equiv L^d (\langle s^2 \rangle_L - \langle |s| \rangle_L^2) / k_B T = L^{\nu/\nu} \tilde{\chi}(L/\xi), \quad (2.3.21b)$$

$$U_L = 1 - \frac{\tilde{\chi}_4(L/\xi)}{3[\tilde{\chi}_2(L/\xi)]^2}. \quad (2.3.21c)$$

其中 $\tilde{\chi}_4(L/\xi)$ 与四阶矩有关,

$$\langle s^4 \rangle_L \equiv L^{-4\beta/\nu} \tilde{\chi}_4(L/\xi),$$

而 $\tilde{\chi}_2(L/\xi)$ 与二阶矩有关,

$$\langle s^2 \rangle_L \equiv L^{-2d} \chi_2(L/\xi),$$

在(2.3.21b)式中我们定义了一个函数 $\chi'(L, T)$, 它在 $T < T_c$ 时在热力学极限下趋于标准的磁化率 χ (这时 $\chi \equiv \lim_{H \rightarrow 0} \lim_{L \rightarrow \infty} \partial \langle s \rangle_L / \partial H$),

这从(2.3.18b)式很清楚, 但在 $T > T_c$ 时则否, 事实上, 从(2.3.14)式容易证明, 在 $T > T_c$ 时 (记住 $\lim_{L \rightarrow \infty} \chi^{(L)} = \chi$)

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \chi'(L, T) \simeq \lim_{L \rightarrow \infty} L^d (\langle s^2 \rangle_L - \langle |s| \rangle_L^2) / k_B T = \chi \left(1 - \frac{2}{\pi} \right). \quad (2.3.21d)$$

因此 χ' 以和 χ 相同的指数发散, 但临界幅度则减小 $(1 - 2/\pi)$ 倍。这一点常常在文献中被混淆, 在文献中, 有时取 $\lim_{L \rightarrow \infty} \chi'(L, T)$ 为温度高于 T_c 时 χ 的一个估值, 有时则在一切温度下使用公式 $\chi = \lim_{L \rightarrow \infty} L^d (\langle s^2 \rangle_L - \langle s \rangle_L^2) / k_B T$. 但是, 在没有一个造成对称性破缺的外场时, 后一公式只有在 $T > T_c$ 时才有意义, 这时可以用 $\langle s \rangle_L^2 \equiv 0$, 于是这个公式就化为(2.3.18a)式. 反之, 在 $T < T_c$ 时, 在对一个温度接近 T_c 的有限系统的蒙特卡罗模拟中, $\langle s \rangle_L^2$ 不是一个有用的量. 对于比遍历时间 τ_c 小得多的观察时间, $\langle s \rangle_L^2 \simeq \langle |s| \rangle_L^2$, 它接近于自发磁化强度的平方 M_{sp}^2 (2.3.17), 但是对于比 τ_c 大得多的观察时间, $\langle s \rangle_L^2 \equiv 0$, 而对于和 τ_c 同一量级的观察时间, 则可能得到非常不确定的行为: 当磁化强度在 $+\langle |s| \rangle_L$ 和 $-\langle |s| \rangle_L$ 之间来回跳变几次之后, $\langle s \rangle_L^2$ 可以取0和 $\langle |s| \rangle_L^2$ 之间的任意数值. τ_c 与 T_c 下的 τ_{\max} 同一量级, 见下面的(2.3.26)–(2.3.29)式, 它比 T 远小于 T_c 时的 τ_{\max} 大得多, 这里的 τ_{\max} 是最大“内禀”弛豫时间. 注意: 对磁化强度来说, τ_{\max} 和(2.2.11)–(2.2.13)中考虑的时间 τ_A 是同一量级的. 由于我们必须使用一个观察时间 $t_{\text{obs}} \gg \tau_A \approx \tau_{\max}$, 在 T_c 以下我们一定会遇到一个温度, 在这个温度上 $t_{\text{obs}} \equiv \tau_c$, 因而 $\langle s \rangle_L^2$ 没有意义. 于是对称性破缺的一个不可避

免的结果是：在高于 T_c 和低于 T_c 的温度上，在有限系统中必须使用不同的涨落公式，才能提取出具有正确的前置因子的无穷大系统的磁化率，像(2.3.18a)和(2.3.18b)式中写出的那样。磁化率 $\chi(L, T)$ 和 $\chi'(L, T)$ 的这种行为画在图2.15中。人们立即发现，

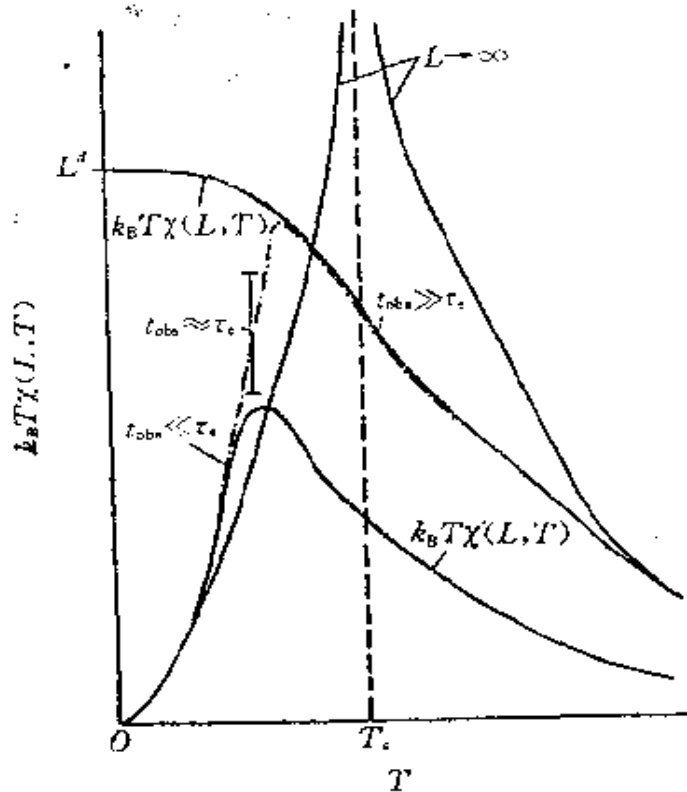


图2.16 用(2.3.21b)式和 $k_B T \chi(L, T) \equiv L d \langle s^2 \rangle_L$ 定义的归一化磁化率 $k_B T \chi(L, T)$ 和 $k_B T \chi'(L, T)$ 随温度变化的示意图。当 $T \rightarrow 0$ 时没有涨落，于是 $\langle s^2 \rangle = \langle |s| \rangle^2 = 1$ ，因此 $k_B T \chi'(L, T \rightarrow 0) \rightarrow 0$ 而 $k_B T \chi(L, T \rightarrow 0) \rightarrow L^d$ 。超出有限大小的平滑化作用的区域之外时，在 $T \gg T_c$ 时 $\chi(L, T)$ 趋于标准的磁化率 χ ，而在 $T < T_c$ 时则是 $\chi'(L, T)$ 趋于 χ 。虽然 χ 的发散性质在函数 $T \chi'(L, T)$ 中已被平滑化为一个有限的峰值，函数 $T \chi'(L, T)$ 则由于序参量的开始起作用，随 T 的减小而单调增大。点划曲线代表标准的磁化率公式 $k_B T L d \langle s^2 \rangle_L / d \langle s \rangle_L$ ，它与(2.3.21b)式不同，不包括任何绝对值：在外场为0时，这个表示式在观察时间 t_{obs} 与遍历时间同一量级的温度范围内是不确定的，因此在这里会发生极不确定的涨落。随着 $L \rightarrow \infty$ ，这个温度范围缩小，最后与 T_c 重合

序参量在临界点上的行为是 $\langle |s| \rangle_L \propto L^{-\beta/\nu}$, 同我们前面的结果 (2.3.13b) 相容。累积量的“定点”值现在解释为 $U^* = 1 - \chi_4(0)/3[\chi_2(0)]^2$ 。

与逾渗问题中 (2.3.4), (2.3.5) 式的情况相同, (2.3.21a) — (2.3.21c) 也构成研究无穷大系统的临界性质的基础, 这些性质是从有限尺寸点格的蒙特卡罗结果中提取出的。图 2.16 示出数据并合的另一个例子 [2.13, 2.25, 2.27, 2.37, 2.71, 2.76, 2.82, 2.83]。例如, 研究不同大小 L 的序参量 $M_L \equiv \langle |s| \rangle_L$, 我们得到一族曲线 (图 2.14(b))。将 M_L 乘以一个因子 $L^{\beta/\nu}$, 约化温度 $|1 - T/T_c| = |1 - \tilde{\beta}_c/\tilde{\beta}|$ 乘以一个因子 $L^{1/\nu}$, 曲线族将并合为标度函数 χ 的两个分支 (分别对应于 $T > T_c$ 和 $T < T_c$)。这个图已经表明了这个方法的缺点: 这时必须同时拟合三个参数 $\{T_c, 1/\nu, \beta/\nu\}$, 但是由于所包括的蒙特卡罗“数据”的 L 和 ξ 的值常常都不是很大, 因此对渐近有限尺寸标度表示式有系统的修正, 从而妨碍了各条曲线的完全叠合。此外, 实际上不存在一个唯一的“拟合”, 因此这个方法的实际精度有些难以确定。不过它已多次给出有用的结果 (例如文献 [2.83, 84])。

其他的以 (2.3.21) 式为基础的唯一象重正化方法从下面这些关系式出发来推导临界指数 ($L' = bL$, 标度因子 $b > 1$) [2.26]

$$\frac{1}{\nu} = \left. \frac{\ln(\partial U_{bL}/\partial U_L)}{\ln b} \right|_{U^*},$$

$$\frac{\gamma}{\nu} = \frac{\ln[\chi(bL, T_c)/\chi(L, T_c)]}{\ln b}. \quad (2.3.22)$$

这个方法的一个优点是 T_c 和指数 $1/\nu, \gamma/\nu$ 是彼此独立地估算出来的; 另一优点是可以分析由对有限尺寸标度的修正所引起的系统误差。在 T_c 下, 这些修正至首阶为止是一些项的相加, 这些项的指数的发散性质没有那么强:

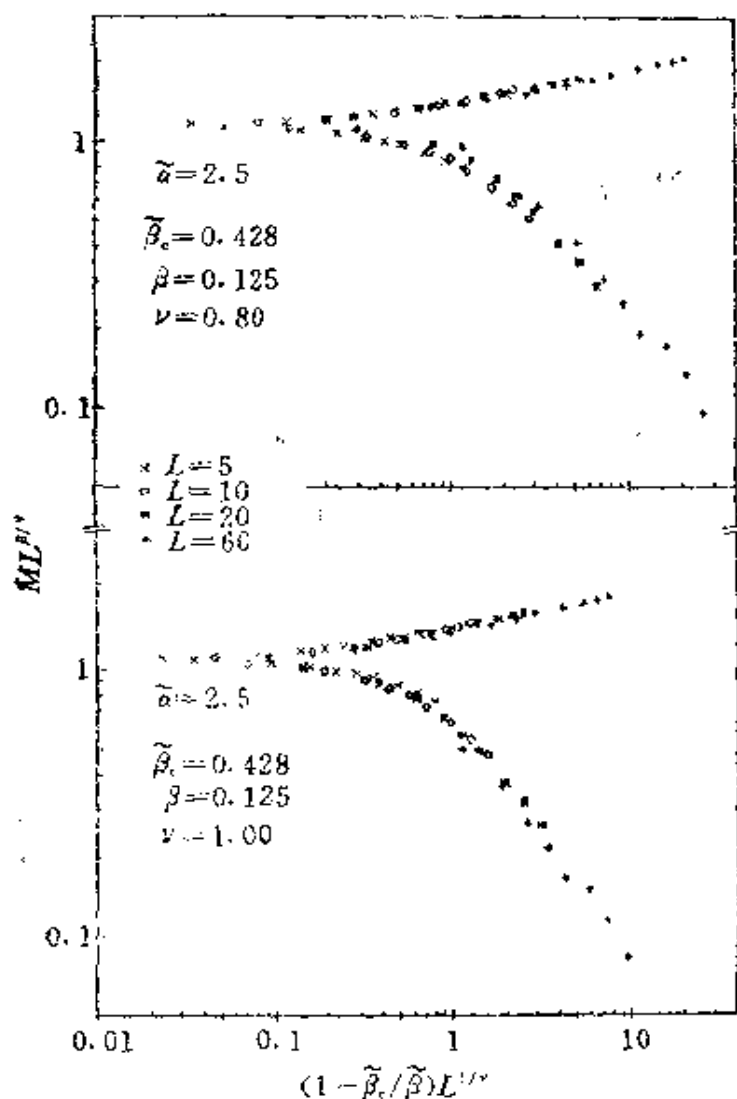


图2.16 方格子上的 ϕ^4 模型的 $M_L L^{\beta/\nu}$ 和 $(1 - \tilde{\beta}_c/\tilde{\beta}) L^{1/\nu}$ 的关系图，其参量之选取为 $\tilde{\alpha}=2.5$, $\tilde{\beta}_c=0.428$ (参量之定义见图2.14)，及 $L=5, 10, 20, 60$ 。同图2.14一样，整个过程中使用了具有周期边界条件的有限大小的立方块。上图，选取指数为 $\beta=0.125$, $\nu=0.80$ 。下图，用标准的 Ising 模型指数取法 ($\beta=0.125, \nu=1.00$) (取自[2.13])

$$\chi(L, T_c) = L^{1/\nu} \tilde{\chi}(0) (1 + \chi^{\text{corr}} L^{-x_{\text{corr}}} + \dots) \quad (2.3.23)$$

χ^{corr} 是另一个幅度因子， x_{corr} 是主要的修正指数。这时(2.3.22)式被下式代替：

$$\frac{\ln[\chi(bL, T_c)/\chi(L, T_c)]}{\ln b} = \frac{\gamma}{\nu} - \frac{\chi^{\text{corr}} L^{-\nu^{\text{corr}}}}{\ln b} (1 - b^{-\nu^{\text{corr}}}) + \dots \quad (2.3.24)$$

于是，画出 γ/ν （或 $2\beta/\nu$ ，见[2.25, 2.71]）的估值和 $1/\ln b$ 的关系，对于每个 L 值就得到一条不同的曲线，这些曲线当 $(\ln b)^{-1} \rightarrow 0$ 时一定线性外推到同一 γ/ν 值。这个方法的缺点是，要求 $\chi(L, T_c)$ 的结果有极好的统计精度，否则就不能应用上述过程。Landau 和 Binder [2.75] 曾把这个方法应用于一个有意义的二维例子，即具有最近邻和次近邻相互作用 J_{nn} 和 J_{nnn} 的 Ising 反铁磁体（图 2.17），它在 $J_{nnn}/J_{nn} > \frac{1}{2}$ 时会显示一种向分层反铁磁结构的转变，这属于具有立方各向异性的 XY 模型这一普适类 [2.85]，具有非

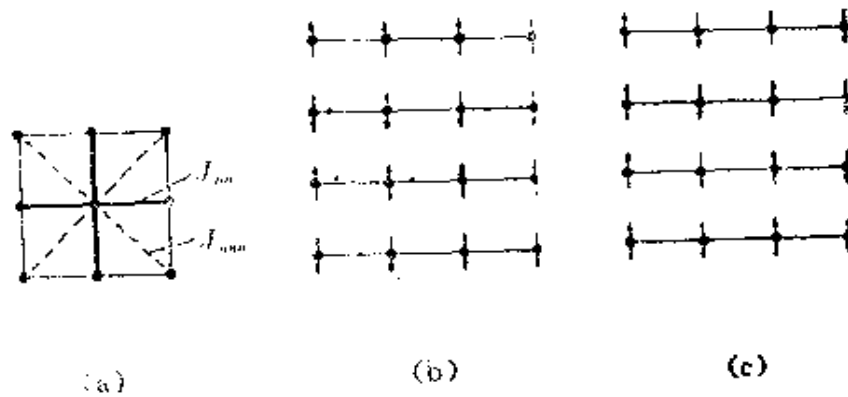


图2.17 (a) 在最近邻之间具有交换能 J_{nn} （实线），在次近邻之间具有交换能 J_{nnn} （虚线）的方形点格 (b) (c) 分层反铁磁结构中的自旋排列，朝上的自旋按铁磁方式排成的行和朝下的自旋按铁磁方式排成的行互相对称。这些行的指向可以是 x 方向 (b)，也可以是 y 方向 (c)。这两种成序方式总是彼此简并的，因此应当看成一个二分量序参量 (ψ_x, ψ_y) 的两个分量

普适的临界指数。可以得到的指数估值在精度上可以与从以下这些方法得到的结果相比较：蒙特卡罗重正化群 (MCRG) 方

法^[2.86]，蒙特卡罗数据并合法^[2.83]，高温级数外推方法^[2.87]和有限条的跃迁矩阵计算方法^[2.88]，见图2.18。这个方法肯定优于标准的实空间重正化群方法^[2.89]，但是它显然要用更多的计算时间。MCRG方法也是这样，不过用MCRG方法似乎用更少的统计工作量就得到良好的结果，甚至在三维情形下也是这样^[2.79]。利用从Ising模型专用计算机得出的蒙特卡罗计算结果^[2.72]，也曾对最近邻三维Ising模型试过这个唯象重正化方法。有人^[2.72]曾声称，只有在 $L > 24$ 时才会到达渐近的区域，在那里有限尺寸标度关系成立；但是现在已经清楚^[2.80-2.82]，这个说法是错误的，是由于在文献^[2.72]中使用了不恰当的伪随

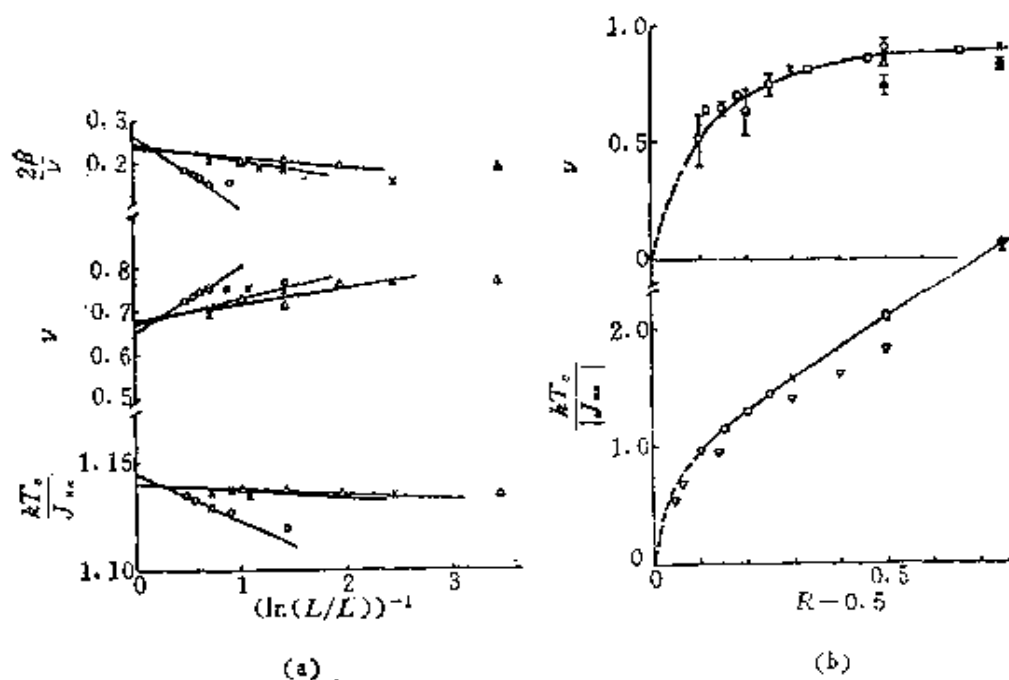


图2.18 (a) 方格子上的Ising反铁磁体(其 $R \equiv J_{nnn}/J_{nn} = 0.65$)的临界参数随 $\ln b = \ln(L/L')$ 的变化，数据是对不同的 L' 的，(\circ)， $L' = 4$ ；(\times)， $L' = 8$ ，(\triangle)， $L' = 12$ ，始终用的是带周期边界条件的有限立方块(取自^[2.75]) (b) 相关长度指数(上图)和临界温度 T_c (下图)随 R 的变化，(\circ)，唯象重正化的结果，如(a)中所示；(\triangle)，文献^[2.83]的蒙特卡罗“数据并合”方法的结果；(\times)，文献^[2.86]的MCRG方法结果；(\bullet)文献^[2.87]的级数展开方法结果；(\square)，跃迁矩阵重正化见文献^[2.88]；(∇)，实空间重正化群方法的结果见文献^[2.89]。(取自^[2.75])

机数的结果，并且对热力学极限的趋近在三维Ising模型中也是非常平滑的。但是，对三维Ising模型的一个高度精确的唯象重正化研究仍然有待完成。

这个唯象重正化方法的一种变型^[2.90]避免使用四阶累积量 U_L (2.3.19)和(2.3.21d)，只用 $\chi(L, T)$ ，然后就两对大小不同的尺寸 (L, L') 和 (L', L'') 生成(2.3.24)式中考虑的比值，即函数 $\varphi_{L, L'}(T)$

$$\varphi_{L, L'}(T) = \frac{\ln[\chi(L', T)/\chi(L, T)]}{\ln(L'/L)}. \quad (2.3.25)$$

函数 $\varphi_{L, L'}(T)$ 和 $\varphi_{L', L''}(T)$ 应当相交于 T_c ，并且，当对有限尺寸标度关系的修正可以忽略时，交点应当给出 γ/ν 之值^[2.90]。这个方法已被成功地应用于ANNI模型，此时发生了向一个无公度浮动相的转变^[2.90]。

在这一步，请读者转向第3.4.1节并做完练习3.37，3.38和3.41，这对理解本节是非常有用的。

2.3.5 弛豫时间的有限尺寸行为

迄今为止，我们只考虑了静态量并分析了它们各自的有限尺寸效应。但是“内禀”弛豫时间 τ 在临界点的奇异性

$$\tau \propto \xi^z \propto |1 - T/T_c|^{-\nu z}, \quad (2.3.26)$$

也显示出受到有限尺寸的一种平滑作用，它仍由以下定则控制，即当 L 与 ξ 可比较时这种平缓作用开始显现，因此最大“内禀”弛豫时间为

$$\tau_{\max} \propto L^z \quad (T = T_c). \quad (2.3.27)$$

从(2.2.13)和(2.3.27)式，我们现在知道在温度 T_c 下要得到精确结果为什么如此困难了，因为这时磁化强度的统计误差取最大值

$$\langle (\delta M)^2 \rangle_{T_c} = \frac{2\tau_{\max}}{t_{\text{obs}}} (\langle M^2 \rangle_{T_c} - \langle |M| \rangle_{T_c}^2)$$

$$= \frac{2\tau_{\max} \chi'_{\max} k_B T_0}{t_{\text{obs}} L^d} \propto \frac{L^{s+\gamma/\nu-d}}{t_{\text{obs}}} \quad (2.3.28)$$

由于在一台串行计算机上执行一个蒙特卡罗步的 CPU 时间随 L^d 增大, 在 T_0 时为了得到 $\langle |M| \rangle$ 的具有给定精度的数据所需要的 CPU 时间按 $L^{s+\gamma/\nu} \approx L^d$ 增长, 在维数 $d \leq 4$ 时与 d 无关。于是格子的线尺寸增大 10 倍, 将要求计算时间增加 10⁴ 倍! 因此我们就明白了, 为什么向量处理器和并行计算机对处于 T_0 的大点格的蒙特卡罗模拟是不可少的, 因为当点格线度增大时, 这种计算机执行一个蒙特卡罗步所需要的 CPU 时间增加得较少。

当 $T \geq T_0$ 时, (2.3.26) 和 (2.3.27) 中考虑的“内禀”序参量弛豫时间 τ 实际上是系统中最大弛豫时间。当 $T < T_0$ 时, 由于“遍历”时间 τ_0 的存在, 情况有所不同。前面在 (2.3.15) 式之后曾讲过, 这个遍历时间 τ_0 正比于 $P_L(s = M_L)/P_L(s = 0) \propto \exp(2L^{d-1} f_{\text{int}}/k_B T)$ 。由于在 T_0 附近, $f_{\text{int}}/k_B T \propto \xi^{-(d-1)}$, 我们可以写出遍历时间的一个标度定律如下:

$$\tau_0 \propto L^2 \exp[\text{const}(L/\xi)^{d-1}], \quad T < T_0. \quad (2.3.29)$$

这个关系最近由宫下精二和高野宏^[2.91]验证了, 而 (2.3.27) 则最近在 Wansleben 和 Landau^[2.92] 的细心工作中被研究过。

温度低于 T_0 时, 除了描述偏离自发磁化强度 M_{sp} 的一个小偏差 δM 衰减快慢的内禀弛豫时间 τ (2.3.26), 以及描述总磁化强度改变符号所需时间的遍历时间 τ_0 之外, 还有磁化强度的各种非线性弛豫时间也是我们感兴趣的。如果起动时系统处于完全排列整齐的铁磁态, 那么可以证明, 磁化强度、能量等弛豫到它们的平衡值所需的弛豫时间 $\tau_M^{(n)}$ 和 $\tau_E^{(n)}$ 等, 在 T_0 附近按照一个不同于 (2.3.26) 式的幂函数定律发散^[2.93, 2.94]:

$$\tau_M^{(n)} \propto (1 - T/T_0)^{-(\nu z - \beta)} \quad (2.3.30a)$$

$$\tau_E^{(n)} \propto (1 - T/T_0)^{-(\nu z - 1 + \alpha)}, \quad (2.3.30b)$$

其中 α 是比热容的临界指数^[2.69]。反之, 如果起动时系统是处于一个无序位形中, 并且没有使对称性破缺的外场出现, 那么就会生成有序的磁畴(图2.19), 其线度大小 $l(t)$ 按照下述幂函数定律增长^[2.46, 2.5]:

$$l(t) = (\Omega t)^2, \quad \Omega \propto (1 - T/T_0)^{2-\alpha/2} \quad (2.3.31)$$

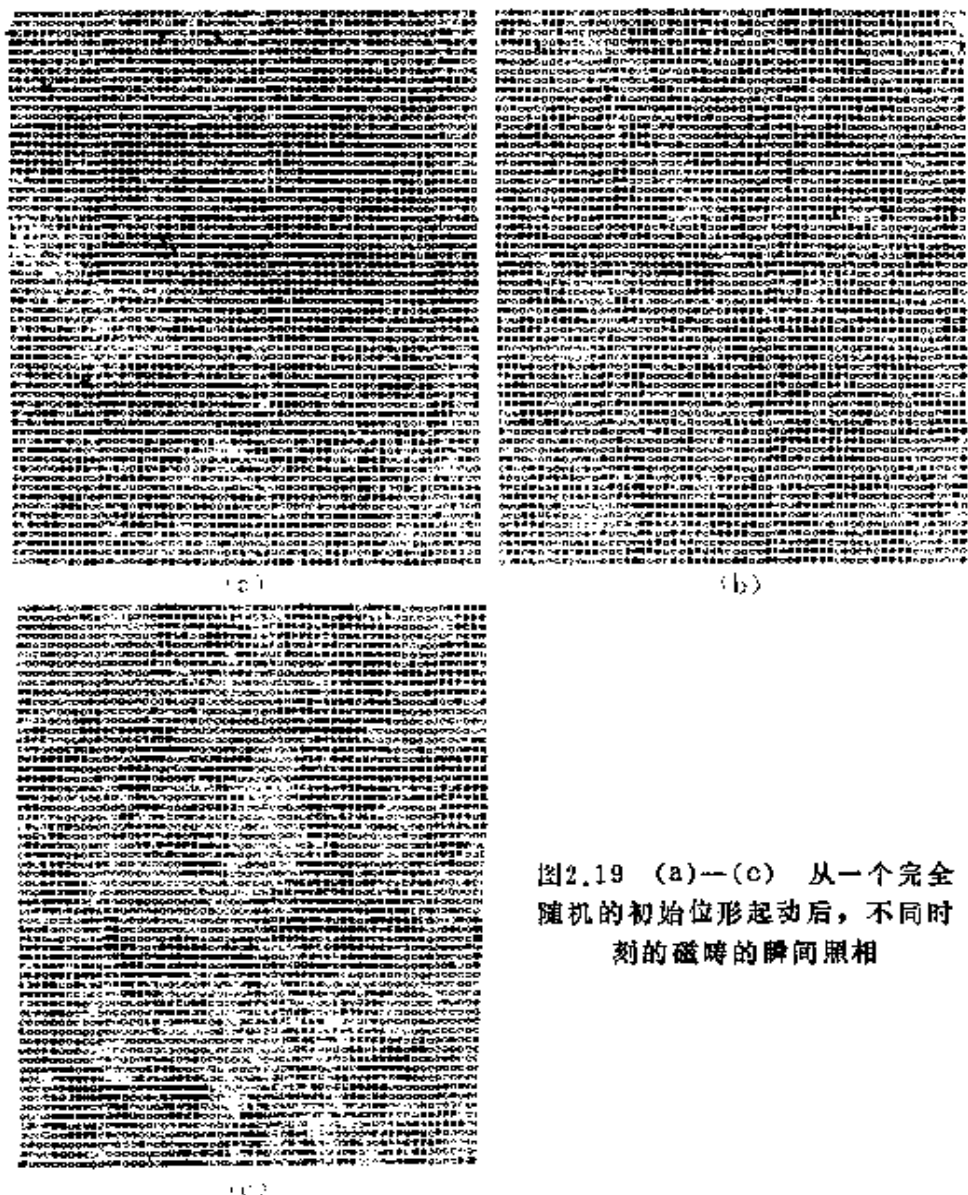


图2.19 (a)~(c) 从一个完全随机的初始位形起动后, 不同时刻的磁畴的瞬间照相

在有序相的区域中从这样一个“无序起动”到达平衡的时间至少是 t_L 的量级， t_L 由下式定义：

$$l(t_L) \equiv L \quad \text{即} \quad t_L = Q^{-1} L^{1/\nu} \propto \tau(L/\xi)^{1/\nu} \propto \xi^\nu (L/\xi)^{1/\nu} \quad (2.3.32)$$

在远低于 T_c 的温度 T 上工作时，虽然时间 $\tau_M^{(n)}$ 和 $\tau_E^{(n)}$ 很小，时间 t_L 仍然相当大，因为在非守恒的动态 Ising 模型^[2.46, 2.5]中 $x=1/2$ 从而 $t_L \propto L^2$ 。此外，这个时间 t_L 只是建立真正的平衡的一个下界：它只是说出现了其大小可以与系统的线度比较的磁畴，而并不保证系统存在于一个单畴态中。但是，常常发现^[2.68, 2.95]，在 t_L 时间后系统是处于这样一个状态中：它有几个冻结的畴壁，其方向平行于系统的一个表面，每个畴壁通过周期边界条件同自身相连。要使冻结的畴壁从系统中消失，可能需要一个不切实际的长时间，特别是在温度低于界面粗化 (interface roughening) 转变温度的三维系统中^[2.96]。这一考虑表明，对于有序相的蒙特卡罗研究，最好是选取一个适宜的初始条件，比如一个完全有序的位形。在成序过程的详细本性还不知道的系统中，比如在自旋玻璃中^[2.41]，研究其低温相是很困难的。

2.3.6 没有“超标度关系”的有限尺寸标度

迄今所描述的有限尺寸标度理论，是用相关长度 ξ 作为系统线度尺寸的标尺来生成无量纲变量的，这个理论的成立依赖于临界指数之间的超标度关系 $d\nu = \gamma + 2\beta$ 的成立^[2.25, 2.76]。因此，若超标度关系被违反，标准形式的有限尺寸标度就不成立，例如，在超过极限维数 d^* （平均场理论对临界指数的预言在极限维数下开始成立，Ising模型^[2.69]的 $d^*=4$ ，逾渗问题^[2.60]的 $d^*=6$ ）的系统中，就会发生这种情况。这时，在一个 L^d 点格中使用完整的周期边界条件，有限尺寸标度的一个简单的修正形式成立^[2.76]，相关长度 ξ 被换成一个热长度 l_T ，其定义为^[2.76]

$$l_T^d \equiv k_B T \chi M^{-2} \propto |1 - T/T_c|^{-(\gamma+2\beta)} = |1 - T/T_c|^{-2}, (2.3.33)$$

其中在最后一个等式中代入了平均场指数之值 $\gamma = 2\beta = 1$ 。(2.3.33)式可以这样理解：注意到(2.3.15)式在 $d > d^*$ 时也是正确的，并且指数函数的宗量可以写成

$$\frac{(s \pm M)^2 L^d}{2k_B T \chi} = \frac{(s/M \pm 1)^2}{2} \cdot \frac{L^d}{k_B T \chi M^{-2}} = \frac{(s/M \pm 1)^2}{2} \left(\frac{L}{l_T}\right)^d, \quad (2.3.34)$$

它表明 L 以 l_T 为标尺标度。 $d < d^*$ 时 $l_T \propto \xi$ ，但是 $d > d^*$ 时 ξ 有不同的温度依赖关系。代替(2.3.20)式的普遍的标度行为是

$$\begin{aligned} P_L(s) &= (1 - T/T_c)^{-\beta} P'(L/l_T, s(1 - T/T_c)^{-\beta}) \\ &= L^{d\beta/(\gamma+2\beta)} \tilde{P}'(L/l_T, sL^{d\beta/(\gamma+2\beta)}), \end{aligned} \quad (2.3.35)$$

即(2.3.20)–(2.3.24)中的指数 $1/\nu$ 被换成指数 $d/(\gamma+2\beta)$ ，热长度 l_T 的指数的倒数。(2.3.35)式已对五维 Ising 模型验证过^[2.76]，这时 $1/\nu = 2$ 而 $d/(\gamma+2\beta) = 5/2$ 。

2.3.7 一级相变的有限尺寸标度

最后，我们讨论发生在一级相变中的有限尺寸效应^[2.97]。在一个无穷大系统中，一级相变的特征是一个 δ 函数奇异性，见图 2.20。例如，若相变是温度引发的，这种奇异性便是潜热；在一个 Ising 磁体中，温度 $T < T_c$ 时在外场 $H = 0$ 处由外场的变化会引发一级相变，因而我们得到磁化率的一个 δ 函数。在有限系统中，这些 δ 函数奇异性当然会再次被平滑掉^[2.98–2.104]。理解这一行为的最简单的方法，是推广(2.3.15)式以包括对外磁场的依赖关系^[2.102]：两个峰的权重不再相等(1/2)，而是根据 Zeeman 能量 Boltzmann 因子 $\exp(\pm H M_L L^d / k_B T)$ 取权重。此外还必须考虑到，当 $H \neq 0$ 时高斯分布的峰不再在 $s = \pm M_L$ 而是在 $s = \pm M_L +$

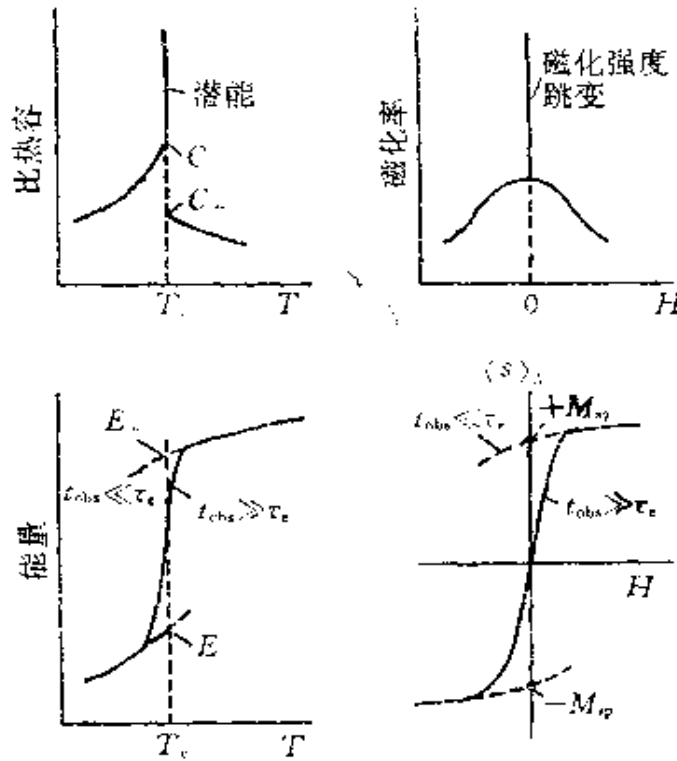


图2.20 在 T_c 发生的一级相变附近的比热容和内能随温度 T 变化的示意图(左图), δ 函数奇异性代表潜热 $E_+ - E_-$,同时还画出了磁化率和磁化强度随外场变化的函数关系(右图),这时 δ 函数奇异性代表磁化强度跃变 $2M_0$ (实曲线)

$\chi^{(L)}H$ 处。这给出

$$\begin{aligned}
 P_L(s) &= L^{d/2} [2\pi k_B T \chi^{(L)}]^{-1/2} \\
 &\times \left\{ \exp \left[\frac{H M_L L^d}{k_B T} \right] \exp \left[-\frac{(s - M_L - \chi^{(L)} H)^2 L^d}{2k_B T \chi^{(L)}} \right] \right. \\
 &\quad \left. + \exp \left[-\frac{H M_L L^d}{k_B T} \right] \exp \left[-\frac{(s + M_L - \chi^{(L)} H)^2 L^d}{2k_B T \chi^{(L)}} \right] \right\} \\
 &\quad / \left\{ \exp \left[\frac{H M_L L^d}{k_B T} \right] + \exp \left[-\frac{H M_L L^d}{k_B T} \right] \right\}
 \end{aligned} \tag{2.3.36}$$

它给出磁化强度为

$$\langle s \rangle_L = \chi^{(L)} H + M_L \tanh\left(\frac{H M_L L^d}{k_B T}\right) \quad (2.3.37)$$

磁化率为

$$\begin{aligned} \chi(H, T, L) &= \left(\frac{\partial \langle s \rangle_L}{\partial H} \right)_T \\ &= \chi^{(L)} + \frac{M_L^2 (L^d / k_B T)}{\cosh^2(H M_L L^d / k_B T)}. \end{aligned} \quad (2.3.38)$$

(2.3.38) 式表明，在 $L \rightarrow \infty$ 极限下发生在 $H = 0$ 处的 δ 函数奇异性，当 L 有限时被平滑为一个峰，其高度正比于 L^d ，其宽度正比于 L^{-d} 。

但是，重要的是认识到，只有当记录到系统真正的平衡行为时（使用超过遍历时间的观察时间），这些考虑才适用。对于过短的观察时间，将会观察到 $P_L(s)$ 的一个单峰结构，而不是 (2.3.36) 式描述的正确双峰结构。这时 Ising 铁磁体的有序态即使在一个方向和磁化强度相反的弱场中也是亚稳的。那些做了第三章的练习 3.43 并且试过重现图 2.21 的读者，应当已经注意到这一现象。因此 (2.3.36) — (2.3.38) 仅仅对相当小的系统才有实用价值。图 2.21 表明，当自发磁化强度 M （取 $M_L = M$ 等于自发磁化强度，它在 $L \gg \xi$ 时与 L 无关）精确知道^[2.106]，而且不存在任何可调节的参数时，这种描述同对二维方格子最近邻 Ising 模型的模拟结果在定量上一致。

Ising 模型中的场致相变是一个特别简单的情况，因为这个模型即使在 L 有限时也具有对称性 $\chi(H, T, L) = \chi(-H, T, L)$ ，因此转变只被系统的有限尺寸平滑化而不会被移动；它仍在 $H = 0$ 发生。一个更普遍而且实际应用中更令人感兴趣的情况，是温度引

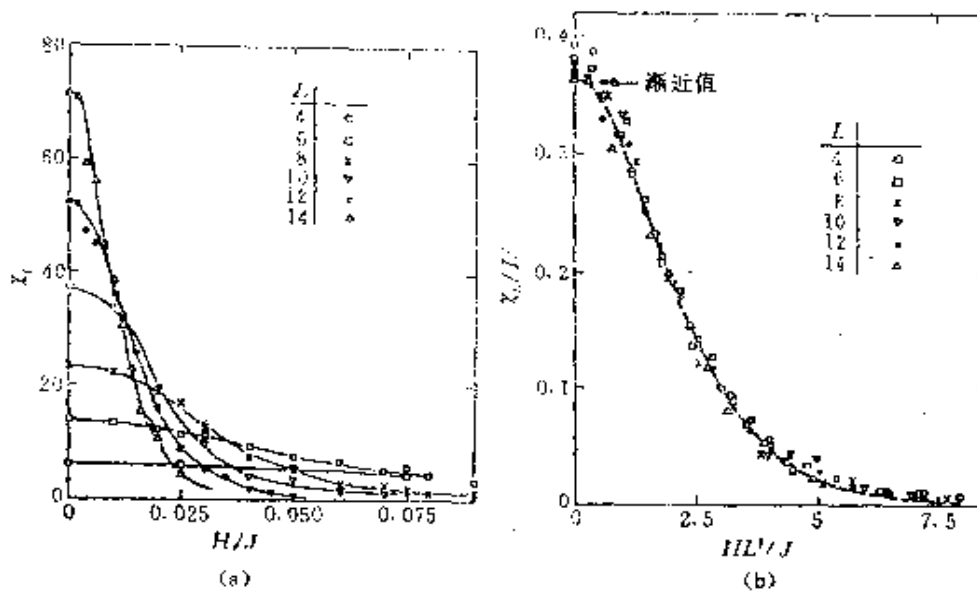


图2.21 (a) 不同 L 下温度 $k_B T/J = 2.1$ 的方格子最近邻Ising模型的磁化率和外磁场的关系 (b) 同样的数据用标度形式重画, $\chi(H, T, L)/L^2$ 和标度后的外场 HL^2/J 的关系。箭头指示从精确解算出的渐近值^[2.104]

$M_{sp}^2 J/k_B T$, 注意这个^[2.105] Ising模型的 $k_B T_c = 2.269$ 。短划曲线是标度函数(2.3.38), 相加的修正项 $\chi(L)$ 被忽略 (取自[2.102])

起的一级相变, 从低温下的有序相转变为高温下的无序相。显然, 高温相和低温相之间是没有对称性的, 而且这时的有效转变温度 $T_o(L)$ (代表被平滑化的潜热 δ 函数的圆滑的比热容峰在这个温度上取极大值 C_L^{max}) 相对于真正的转变温度 $T_o(\infty)$ 可能会有移动:

$$T_o(L) - T_o(\infty) \propto L^{-\lambda}, \quad C_L^{max} \propto L^{\alpha_m}, \quad \delta T \propto L^{-\theta}, \quad (2.3.39)$$

这里我们分别为转变温度的移动、峰的高度和发生平滑化的温度间隔 δT 定义了三个指数 λ , α_m 和 θ 。不过后来发现, 这些有限尺寸效应可以再次通过用热力学涨落理论进行的简单讨论来理解, 与(2.3.36)~(2.3.38)式相似。我们只须把(2.1.33)式推广到有两个高斯函数叠加的情况($\Delta T = T - T_c$, $T_o \equiv T_o(\infty)$), ^[2.104]

$$P_L(E) \propto \frac{a_+}{\sqrt{C_+}} \exp\left(-\frac{(E - E_+ - C_+ \Delta T)^2 L^d}{2k_B T^2 C_+}\right)$$

$$+ \frac{a_-}{\sqrt{C_-}} \exp\left(-\frac{(E - E_- - C_- \Delta T)^2 L^d}{2k_B T^2 C_-}\right), \quad (2.3.40)$$

这里无穷大系统中的比热容在 T_c 附近的行为是

$$\lim_{T \rightarrow T_c^-} C(T) = C_-, \quad \lim_{T \rightarrow T_c^+} C(T) = C_+,$$

权重 a_+, a_- 通过两个相的简并度 q_+, q_- 和它们的内能 E_+, E_- 表示为^[2.104]

$$\begin{aligned} a_+ &= \sqrt{C_+} q_+ \exp\left(\frac{\Delta T (E_+ - E_-) L^d}{2k_B T T_c}\right), \\ a_- &= \sqrt{C_-} q_- \exp\left(-\frac{\Delta T (E_+ - E_-) L^d}{2k_B T T_c}\right). \end{aligned} \quad (2.3.41)$$

从(2.3.40), (2.3.41)容易得出能量 $\langle E \rangle_L$ 和比热容 $C(T, L)$ 为

$$\langle E \rangle_L = \frac{a_+ E_+ + a_- E_-}{a_+ + a_-} + \Delta T \frac{a_+ C_+ + a_- C_-}{a_+ + a_-}, \quad (2.3.42)$$

$$\begin{aligned} C(T, L) &= \frac{\partial \langle E \rangle_L}{\partial T} = \frac{a_+ C_+ + a_- C_-}{a_+ + a_-} \\ &\quad + \frac{a_+ a_- L^d}{k_B T^2} \frac{[(E_+ - E_-) + (C_+ - C_-) \Delta T]^2}{(a_+ + a_-)^2} \end{aligned} \quad (2.3.43)$$

从(2.3.43)式很明显, 比热容的极大值出现在

$$\frac{T_o(L) - T_c}{T_c} = \frac{k_B T_c \ln[(q_-/q_+) \sqrt{C_-/C_+}]}{E_+ - E_-} \frac{1}{L^d}, \quad (2.3.44)$$

其高度为

$$C_L^{\max} \approx \frac{(E_+ - E_-)^2}{4k_B T_c^2} L^d + \frac{C_+ + C_-}{2}. \quad (2.3.45)$$

发生 δ 函数峰的平滑化的温度区间 δT , 由取(2.3.41)式中的指数函数的宗量为 1 而给出, $\delta T \approx 2k_B T_c^2 / [(E_+ - E_-) L^d]$. 因此我们得出结论, (2.3.39) 式中定义的指数 λ, a_m, θ 都等于维数:

$$\lambda = a_m = \theta = d. \quad (2.3.46)$$

因此, 由于在一级相变中没有一个发散的征长度, 相对于这个长度系统的线度 L 可与之进行比较, 控制有限尺寸效应^[2.88-2.104]的便是体积 L^d . 图 2.22 示出对一个 $q=10$ 的 q 态 Potts 模型^[2.106]所得到的结果^[2.104], 这个模型的哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\text{Potts}} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{s_i s_j}, \quad s_i = 1, 2, \dots, q. \quad (2.3.47)$$

方格子的 E_+, E_- 和 C_+, C_- 可以从精确解^[2.107]得到, 因而有可能对(2.3.40—2.3.46)式作一次检验. 我们看到, (2.3.40—2.3.46)式中扼要叙述的唯象理论, 的确很好地说明了蒙特卡罗结果的行为. 我们再次大力推荐一些“课外作业”(练习 3.50)请读者完成, 但同时也警告大家, 图 2.22 的精度是在一台超级计算机上花了几百小时的 CPU 时间才达到的!

这个有限尺寸标度理论也给出一个判据, 以系统地分辨一级相变和二级相变. 在计算一个定义为^[2.104]

$$V_L = 1 - \frac{\langle E^4 \rangle_L}{3 \langle E^2 \rangle_L^2} \quad (2.3.48)$$

的量时, 人们发现 V_L 在有效转变温度 $T_c(L)$ 上取极小值 V_L^{\min} . 可以证明, 二级相变的 $\lim_{L \rightarrow \infty} \left[\frac{2}{3} - V_L^{\min} \right] = 0$ (哪怕在温度 T_c 上也是如此), 而在一级相变中, 同一极限则是潜热 $|E_+ - E_-|$ 的量度,

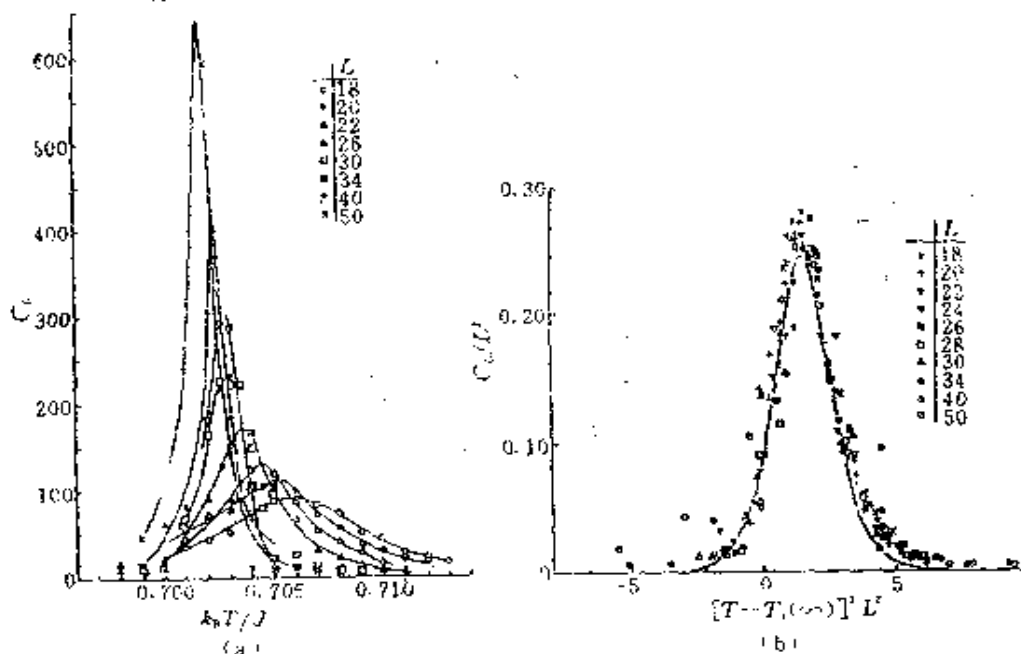


图2.22 (a) 不同大小的方形点格上的10态 Potts 模型的比热容随温度的变化。为了保持图的清晰, 忽略了某些点格尺寸的数据 (b) 比热容数据的标度关系, 所画的是 C_L/L^2 和 $[T - T_c(\infty)]L^{1/2}$ 的关系。在这个模型中 $q_- = q = 10$, $q_+ = 1$ 。实线曲线来自(2.3.43)式, 忽略了其中相加的修正项 $[a_+ C_+ + a_- C_-]/(a_+ + a_-)$, 并取 $C_+/C_- = 0.7$ (取自[2.104])

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \left(\frac{2}{3} - V_L^{\min} \right) = \frac{1}{3} \frac{(E_+ - E_-)^2 (E_+ + E_-)^2}{(E_+^2 + E_-^2)^2} \quad (2.3.49)$$

图 2.23 表明^[2.104], $q = 2, 3$ 时(这时相变是二级的^[2.107]) V_L 的行为同 $q = 10$ 时(这时相变显然是一级的) V_L 的行为的确很不相同。

2.3.8 统计误差的有限尺寸行为和自平均问题

作为和有限尺寸效应有关的最后一个题目, 我们来考虑统计误差的有限尺寸行为^[2.5]。设我们对一个量 A 作 n 次统计独立的观察, 并根据下式计算它的误差[参看(2.2.12)式]:

$$\Delta(n, L) = \sqrt{(\langle A^2 \rangle_L - \langle A \rangle_L^2)/n}, \quad n \gg 1. \quad (2.3.50)$$

现在我们要问, 如果我们使模拟系统越来越大, 即令 $L \rightarrow \infty$, 量

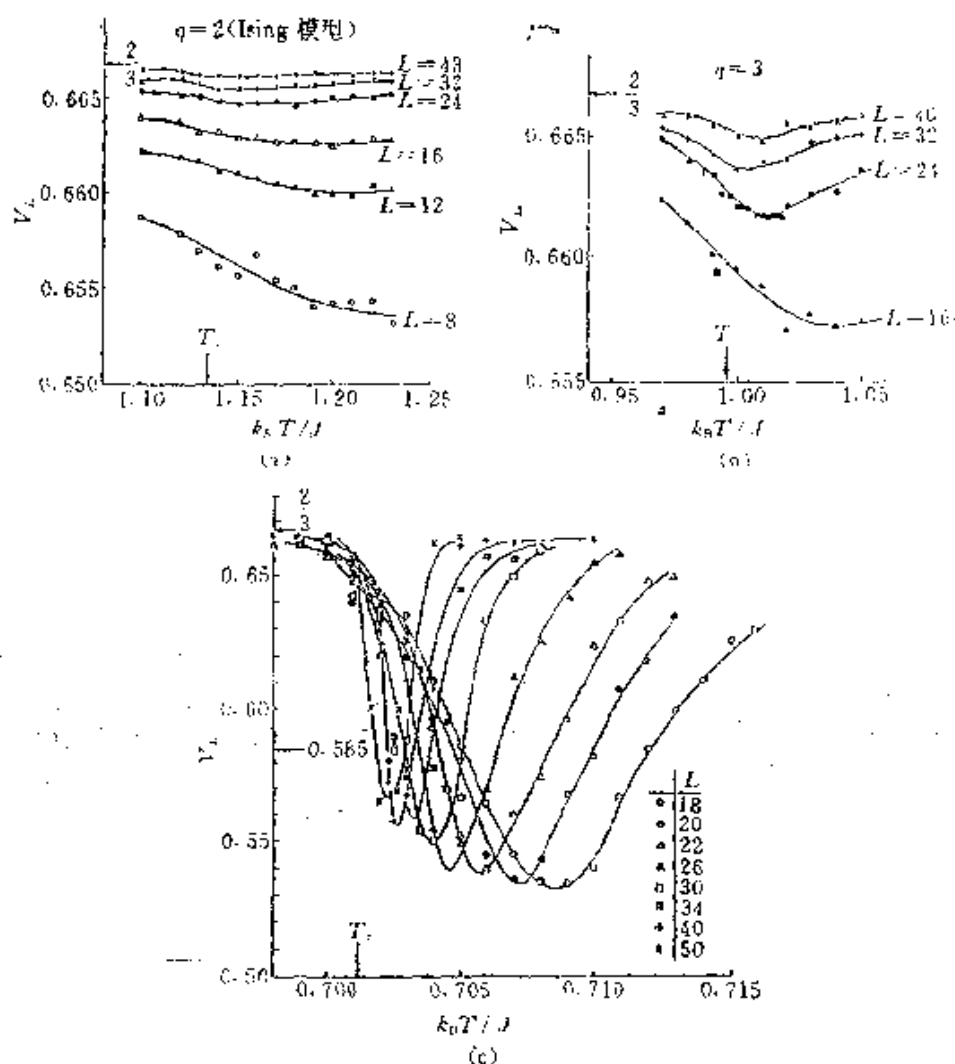


图2.23 不同尺寸 L 的方形点格上的 q 态 Potts 模型的 V_L (2.3.48) 随温度的变化: (a) $q=2$, (b) $q=3$, (c) $q=10$. 精确知道的转变温度 T_c 和 $L \rightarrow \infty$ 时 V_L 的极限值用箭头示出 (取自 [2.104])

A 的这个误差 $\Delta(n, L)$ 会减小到零吗? 如果 Δ 不减小到零, 而是趋向一个与 L 无关的非零极限, 我们就说量 A 缺乏自平均作用。如果 Δ 减小到零, 我们还可以问: 如果我们研究更大的系统, 但是作次数较少的统计独立的观察, 使得总的计算工作量 (以串行机上的计算时间计) 相同, 会得到同样的误差吗? 也就是说, 我们比较两种大小尺寸 L 和 $L' = bL$ (标尺因子 $b > 1$) 下的计算, 并且

对较小的系统记录 n 次观察,对较大的系统记录 $n' = b^{-d}n$ 次观察. Milchev 等人^[2.5]引进了所谓强自平均的观念,一个系统是强自平均的,如果其误差满足关系式

$$\Delta(n, L) = \Delta(n', L') = \Delta(b^{-d}n, bL). \quad (2.3.51)$$

从(2.3.50)和(2.3.51)式我们看到,只有当涨落满足关系

$$\langle A^2 \rangle_L - \langle A \rangle_L^2 \propto L^{-d} \quad (2.3.52)$$

时,强自平均才成立.如果情况像下面这样,

$$\langle A^2 \rangle_L - \langle A \rangle_L^2 \propto L^{-x_1}, \quad 0 < x_1 < d, \quad (2.3.53)$$

这种情况下的量 A 仍是自平均的,但不是强自平均^[2.5].

现在设在一次模拟中观察的量 A 是一个基本的广延量的密度,例如每个座点的能量(E)或每个座点的磁化强度(M),并且暂且只考虑远离临界状态或多相共存态的一个平衡态.于是当 $L \rightarrow \infty$ 时 $\delta A = A - \langle A \rangle$ 的分布为高斯分布

$$P_L(\delta A) = L^{d/2} (2\pi C_A)^{-1/2} \exp[-(\delta A)^2 L^d / 2C_A], \quad (2.3.54)$$

例如,参看(2.1.33, 2.3.14)式.从(2.3.54)式我们立即发现,(2.3.52)式中考虑的涨落和控制分布宽度的参数 C_A (若 $A = M$ 则 $C_A = k_B T \chi$, 若 $A = E$ 则 $C_A = k_B T^2 C$, 等等)是有联系的:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle_L - \langle A \rangle_L^2 = L^{-d} C_A. \quad (2.3.55)$$

于是如果 $\lim_{L \rightarrow \infty} C_A$ 存在, A 的确是强自平均的.因此在 $L \gg \xi$ 时 E, M 这些量满足这个性质.

但是,如果我们想要抽样的量不是一个简单密度的空间平均(如 E, M, \dots),而是从涨落关系推出的量(如 C, χ, \dots),这些涨落关系是用(2.3.55)式从对 E, M 的抽样得出的,那么情况有很大的不同.我们现在来研究这种量的误差,仍然用(2.3.50)式,

但是取 $(\delta A)^2 L^d$ 而不是 A 为考虑中的变量:

$$\Delta(n, L) = L^d n^{-1/2} \sqrt{\langle (\delta A)^4 \rangle_L - \langle (\delta A)^2 \rangle_L^2}. \quad (2.3.56)$$

与(2.3.19)式相仿, 定义约化的四阶累积量为

$$U_L^{(A)} \equiv \frac{3\langle (\delta A)^2 \rangle_L^2 - \langle (\delta A)^4 \rangle_L}{3\langle (\delta A)^2 \rangle_L^2}, \quad (2.3.57)$$

由于高斯分布的这个量为零, 从(2.3.56)式我们得到

$$\Delta(n, L) = L^d n^{-1/2} \langle (\delta A)^2 \rangle_L \sqrt{2} = C_A \sqrt{2/n}. \quad (2.3.58)$$

因此, C_A 的相对误差与 L 无关, 只依赖^[2.5]于 n ,

$$\Delta(n, L)/C_A = \sqrt{2/n}. \quad (2.3.59)$$

于是, 固定 n 增大 L 将显著改善 E 和 M 这样一些量的精度, 但对 χ, C 等量的精度却没有什么好处. 因此, 比较经济的做法是在 $L \gg \xi$ 的条件下选取最小的尺寸 L , 用增大 n 而不是 L 的办法来改善精度.

这一考虑反过来又表明, 对于大尺寸系统, 用数值微分方法来得出 χ, C 等量可能要比对涨落作抽样更好. 为了完整起见, 我们对这一点作一明白的说明. 我们从磁化强度对外场的依赖关系得出磁化率 χ :

$$\chi \approx [M(H + \Delta H) - M(H)]/\Delta H, \quad (2.3.60)$$

其中 H 值必须这样选取, 使得非线性效应可以忽略不计. 为了使用(2.3.60)式, 我们必须要求 $M(H)$ 和 $M(H + \Delta H)$ 的误差远小于差值 $\chi \Delta H$:

$$\Delta(n, L) = \sqrt{k_B T \chi / n L^d} \ll \chi \Delta H$$

即

$$1 \ll n L^d \left(\frac{\Delta H}{k_B T} \right)^2 k_B T \chi. \quad (2.3.61)$$

于是 χ 的相对误差为

$$\frac{\Delta\chi}{\chi} \approx \sqrt{2} \frac{\Delta(n, L)}{\Delta H \chi} = \sqrt{2} \frac{k_B T}{\Delta H} \frac{1}{\sqrt{k_B T \chi n L^d}}, \quad (2.3.62)$$

因子 $\sqrt{2}$ 说明这一事实： $M(H)$ 和 $M(H + \Delta H)$ 的误差是统计独立的。由于这个误差正比于 $(nL^d)^{-1/2}$ ，因此由磁化强度求导数定出的磁化率是强自平均的。对于作为内能对温度的微商而求出的比热，相应的考虑也成立^[2.61]。

但是，在临界区域内 $L \gg \xi$ 不成立，序参量（在 Ising 铁磁体中是磁化强度 M ）和能量的分布不再是高斯分布。别样的描述像(2.3.20, 2.3.21)便代之而起。这时我们求得

$$\Delta M = \sqrt{(\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)/n} = L^{-\beta/\nu} n^{-1/2} \sqrt{\chi(L/\xi)}. \quad (2.3.63)$$

在温度 T_c ，（无穷大系统的）相关长度 ξ 为无穷， $\chi(0)$ 是一个有限常数。因此，(2.3.63)式是自平均的弱形式而非强形式的一个例子（ $x_1 = \beta/\nu$ 比 d 小得多）。用(2.3.63)式来判断必要的模拟工作量，必须考虑到，在两个状态之间必须流逝一段量级为 L^z 的时间(2.3.27)，这两个态才会是统计独立的，像(2.3.28)式表明的那样。对于从磁化强度涨落抽样得出的磁化率 χ 的误差。从(2.3.57)和(2.3.21)式可求出它仍是缺乏自平均作用的：

$$\frac{\Delta\chi}{\chi} = n^{-1/2} \sqrt{2 - 3U_L(L/\xi)}. \quad (2.3.64)$$

我们认出此式是(2.3.59)式的推广，但这时常数 $\sqrt{2}$ 换成更小的量 $\sqrt{2 - 3U_L(L/\xi)}$ 。

对于能量的奇异部分 $\delta E \equiv E(T_c)$ ，类似于(2.3.20)的描述是

$$P_L(\delta E) = L^{(1-\alpha)/\nu} \tilde{P}(E)(\delta E L^{(1-\alpha)/\nu}, L/\xi), \quad (2.3.65)$$

其中的 $\tilde{P}(E)$ 是一个适当的标度函数。从(2.3.65)式得到比热容为

$$C = L^d [\langle (\delta E)^2 \rangle_L - \langle \delta E \rangle_L^2] / k_B T^2 = L^{d/\nu} \tilde{C}(L/\xi) / k_B T^2. \quad (2.3.66)$$

对于能量的误差，这时再次得到自平均的一个弱形式，它的 $x_1 = (1 - \alpha)/\nu$ ，

$$\Delta(\delta E) = n^{-1/2} L^{-(1-\alpha)/\nu} \sqrt{\tilde{C}(L/\xi)}, \quad (2.3.67)$$

而对于比热容的误差，则得到一个与(2.3.64)式类似的公式。如同文献[2.5]中讨论过的，这些考虑也可以用到非平衡态蒙特卡罗计算中，像对磁畴生长动力学研究^[2.46]。我们也要强调，(2.3.54—2.3.59)式中对重要性抽样的误差的这些考虑，同我们在对随机行走问题的简单抽样误差的讨论(2.1.25—2.1.29)中已经遇到的那些考虑，实质上是相同的。

2.4 关于本章（理论章）的内容范围

在本章里，我们扼要叙述了“静态”（简单抽样）蒙特卡罗方法（这种方法生成的不同位形是彼此统计独立的）和“动态”（重要性抽样）蒙特卡罗方法的主要方面。前者是通过对随机行走和自回避行走、逾渗转变等问题的应用来说明的，后者是通过对点格问题的应用来说明的，点格问题既有分立自由度的问题（Ising模型、Potts模型等），也有连续自由度的问题（XY磁体、 ϕ^4 模型等）。我们试图表明，用于这些应用的模拟程序应当如何组织，所得出的蒙特卡罗“数据”应当如何分析。我们比较详细地讨论了这些方法由有限尺寸效应和有限观测时间效应引起的局限性，并从不同的观点讨论了所谓的“统计误差”。我们指出，通过有限尺寸标度理论对有限尺寸效应所作的详细分析，对二级相变和一级相变都提供了有用的信息。我们也提到了蒙特卡罗方法对研究动力学现象的应用，但注意力集中在静态问题上；同样，我们

的重点是讨论“大块性质”，对分界面、表面、缺陷附近的局部性质的研究被搁置在一边。

由于对本书的内容加了这个限制，许多重要问题，像如何对量子力学问题(而不是经典或准经典哈密顿量)进行模拟、如何从重要性抽样蒙特卡罗方法对熵和自由能估值、或用 MCRG 方法分析临界现象和多临界现象等等，在本章中就不能讨论，有兴趣的读者可以参阅列在参考文献清单一开头的“一般性文献”，以了解更详细的情况。不过，我们希望，本章能为这个领域的新手提供一个有用的文献指南，使他们能够从模拟他们自己的几个物理问题出发来进入这一领域，并且留给他们这样的印象：蒙特卡罗模拟是一个成果丰硕的方法，它同统计物理学的许多基础方面都有联系，同时它是一个适用于多方面的和非常有用的工具。

3 蒙特卡罗方法实际工作指南

这个指南的结构，是从“容易的”模拟方法和算法向更复杂的推进。对于每一种方法，我们用逐步细化的方式来表述算法。我们首先讲述总的想法和基本轮廓，接着我们把较大的逻辑结构和算法结构分成更小的结构，直到到达单个基本语句这一级为止。有时我们也可能故意不讲得这么细，而要求读者补足留下的空白。

由于这是对计算物理学的一个指南，我们觉得有必要对程序设计作一些一般性的评论。逐步细化的方法对实际工作也是有用的。它引进一种思维和程序设计的规则，这种规则有助于减少所犯(逻辑)错误的个数。我们从自己的经验知道，没有什么东西比一个条理不清楚的程序更有危害性了。错误可能就隐藏在条理不清的后面，虽然条理清楚的程序里也可能有错误。

条理不清的程序可能反映一种杂乱无章的思想方法，它把许多小主意简单地拼凑在一起。这就好像是以多少有些随机的方式往河里扔石头来建造一座桥，在每两块石头之间我们架上一条语句，使得最终可以过河。但是这种建筑方法却有许多缺点，应当受到批评。

对一个算法使用逐步细化，我们就必须对算法的各部分以及部分中的部分加上标题以作为指引。这些标题对编制实际程序的文字说明资料也是极为有用的工具。当你把程序移交给一个合作者时，这些文字资料迟早是有用的。如果这个程序附有恰当的文字说明，那么你的这位同事就不会感到迫切需要对整个程序进行改写，而读懂和信任这个程序。

一些练习散布在正文中，这些练习是本指南的组成部分。没有它们，第 2 章里所述的学习计算机模拟的全部想法都得放弃。

一共有四种不同的练习。前面标有▷号的练习，例如

▷练习3.1

是本指南必不可少的一部分。不做这些练习，就很难理解本书的内容。它们是必做的。通常这种练习是紧接在对已讲过的一个论据或一个算法的展开过程中的重要一步之后。读者在完成这个练习之前不要继续往前赶。为了更醒目地表明这一点，我们在这种练习的后面再加一个符号

STOP

第二种练习标了一个 1 号，例如

1 练习3.2

这类练习也是本指南必不可少的。在这种练习中，从一个稍微不同的角度来对待迄今讲过的内容。做这些练习对内容的理解很有帮助，我们要求读者完成它们。在大多数情况下，这种练习包含的是前面在正文或某个带▷的练习中讨论过的一个算法的变型。它通常需要对已有的程序作一些改变。

除了不标任何特殊记号并且完全任选的第三种正规练习之外，还有标一个星号的第四种练习，例如

*练习3.24

这种练习叙述的问题更多地属于研究类型，可以忽略它们而不致影响读懂本书内容。

在本指南中我们用一种赝程序设计语言来陈述算法。这种赝程序设计语言和 ALGOL, PASCAL 等非常相像。由于我们将讨论的那些算法的结构，它们用这种语言表述要比用 FORTRAN 那样的程序设计语言显得更加自然和优美。选择一种人造的语言而不是一种常用的语言也突出了算法本身，使它的基本想法不至埋

在一堆程序设计语句中。

这种语言基本上不需要解释，任何一个对至少一种计算机语言有些经验的人都应当读得懂。为了举例说明这种语言，考虑例 3.1。它模拟掷骰子。一个骰子有六面，我们定义一个有六个分量的整数值矢量。初始时各分量为 0。如“do”循环所示，我们掷 N 次骰子。每次试验我们从集合 $\{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ 中随机地抽选一个数。若抽出的面是“1”，我们就把面 1 的出现次数加 1，其它各面仿此。在作完 N 次试验后，我们可以分析任何一面在样本中出现的频度。语句 `analyze-dice-face` (分析骰子面) 实际上代表一个语句块，同“do”循环中“begin end”之内的语句块相似。

例 3.1

```
do sample := 1 to n-of-samples
  begin
    do step := 1 to N
      begin
        generate-one-step      (产生一步)
      end
    end
    accumulate-results        (累积结果)
  end
```

我们的经验是，大部分选修一门计算机模拟课程的学生，至少知道 PASCAL 语言。因此读懂所讲的算法和把这些算法编成程序 (例如用 PASCAL) 应该是不成问题的。在大部分个人计算机上都装有效率相当高的 PASCAL 语言。在个人机上使用 PASCAL，发现对教学目的是非常成功的。那些在个人计算机上运行程序的人，很快就会遇到个人机在速度和存贮量方面的限制，但是就教学目的而言 (有时甚至对科研来说)，我们发现个人机的性能已经足够了。

前面已经说过，本指南中的算法是用一种类程序设计语言给

出的。但是，我们觉得其中的某一些应当以“直接”的形式给出，因为在使用本指南时，人们把算法的想法转换为“真实的”程序设计语言有时会遇到困难。这种转换并不是那么轻而易举的！它需要对程序设计语言有良好的理解和工作知识。

为了解决这个问题，这里所讲的某些算法在附录中以可执行的形式给出。在这里，必须对程序设计语言作一选择。前面指出过，许多学生是从学习 PASCAL 来启蒙的。这个语言对教学目的最合适。但是，在实践中，即在实际从事大规模模拟时，大多数情况下现在是用 FORTRAN 语言。因此这些算法的程序是用 FORTRAN 编的，其清单给出在附录中。对那些更喜欢 SIMULA, ALGOL 或 PASCAL 的人，把正文中给出的算法转换为可执行的形式应该是不成问题的。

本书中陈述的算法是打算用在标量机上的。首先，因为用得最广泛的计算机是标量机，像大部分巨型机和个人计算机。其次，我们觉得，给流水线（pipeline）计算机或甚至并行机用的相当复杂的算法会使基本想法变得模糊不清。不过，我们还是加进来一些练习，给那些有机会使用这些机器并且想要改编算法的人做。随着传输式计算机（transputer）^[3.1-3.3] 和程序设计语言 OCCAM^[3.4-3.7] 的出现，现在已有可能用一台个人计算机作为并行体系结构的宿主机，来编写和试验并行算法^[3.8-3.10]。

3.1 本指南的目标

在第 2 章里我们引进了对复杂系统物理问题进行数值处理用的一些概念。在这一部分，我们要赋予这些抽象概念以生命。我们要更深刻地理解这些概念并且把它们应用于具体问题。

我们为本指南挑选的问题是非常初等的。初等在这里并不意味着没有价值！实际上，这里讲述的问题是非常基础性的，并且

对物理学非常重要。不仅对物理学本身，而且对计算物理学也很重要。它们代表了统计力学问题的一个有代表性的剖面。当然，本书的篇幅有限，不可能选一个很广阔的剖面。挑选一个问题的主要判据，是对该问题应用数值方法在教学法上的价值。

基本上本书一共介绍了三种数值求解统计力学问题的方法：

简单抽样；

偏倚抽样；

重要性抽样。

它们排列的顺序在一定意义上表明这些概念的复杂程度。它们绝没有穷尽一切可能的概念。已发展出许多别的概念，例如伞式抽样(umbrella sampling)。有兴趣了解以上三种概念之外更多的概念的读者，请参看参考文献清单开始处给出的一般性文献。

但是，上述三种方法是实际使用的方法中用得最多的。不仅如此，它们也是从教学法观点看最有意义的。而且，由于本书预定是要作为蒙特卡罗方法的一个入门，我们认为不应当在这里详细讨论更复杂的概念。

在简单抽样方法中，使用最原始的方法来处理给定的问题。我们暂且考虑一个非物理学的例子。假设您，作为一个物理学家，被一家电视台雇用了。您的工作是对电视台正在播映的一些节目受欢迎的程度作一次民意调查。您对调查对象的情况一无所知，因此您推断，要去一一询问每一个有可能收看这些节目的观众几乎是不可能的。但是您学过统计物理课程，了解统计方法的威力，您决定取一个样本。您是新来到这个城市的，因此您着手干这件工作的方式，是从全城随机地选一些观众，询问他们喜爱这些节目的程度。

我们可以用同样的方式对一个统计力学问题的相空间进行抽样。我们在相空间中随机地选取一些样点，并用这些随机样点来求平均。虽然这个概念看来的确很简单，但是却很有力。全部统

计学概念都潜藏在它后面。对于许多问题，它甚至是得出一个解的唯一可行的方法。

在本指南中我们将用简单抽样方法处理统计力学中的两个基本问题。第一个是随机行走及这种类型的其他问题。不要由于其表面上的简单而低估随机行走问题。如果读者真正学通了简单抽样那一节(随机行走问题就在那里讨论)，他将获得足够的经验以掌握其他的方法。随机行走问题同物理学的关系，很像果蝇同遗传学的关系。在随机行走问题中，已会遇到统计力学问题数值求解固有的许多困难。懂得对这个问题的数值处理，对于普遍理解数值模拟物理学的工作过程大有好处。

根据随机行走的基本特征，我们将分出不返回随机行走和自回避随机行走这两个分支来研究。这些例子将清楚揭示出简单抽样概念的限度，并且指出通往其他抽样方法的道路。

第二个问题是逾渗问题。简单抽样概念对这个问题的应用同对随机行走的应用很相似。这里我们把重点放在分析上。分析包括两方面。首先，物理学中的许多问题需要识别图形。您可能对磁畴或液滴的生长感兴趣。在逾渗问题中，作为研究对象的图形是集团(cluster)。如何鉴定一个给定的逾渗位形中的各个集团？

其次，逾渗问题还将用来引进数据分析方法。我们想要在本书中着重讨论的数据分析方法是

相变点的确定；

标度的确定。

我们将用第 2.3 节中所述的累积量方法来确定相变点。通过求不同大小系统的累积量曲线的交点，可以把相变点确定到很高的精度。系统大小的有限性还将以第 2.3 节讨论的有限尺寸标度的形式在标度分析中加以利用。

在复杂程度上更上一层楼的是倚倚抽样的概念。您工作了一段时间之后便会得知，还有别的进行民意调查的方法。在研究城

市地图之后您发现，城内有各个居民聚居区，在每个聚居区内观众的习惯看来有一定的分布。但是，这些分布并不都相同，而且，聚居区在城市地图上也不是均匀分布的。您决定沿这条线索做下去，并对您能控制的偏倚进行改正。

这个概念可以用于何处的一个例子是自回避行走的抽样。我们将发现，应用简单抽样方法，对较长的行走抽样是极其困难的。自回避行走几乎总是在很早的阶段就结束，结束是因为下一步要去的座点在更早的时候已经去过，不过，以引进一个偏倚为代价，有办法使行走继续。

在这个岗位上再干了一阵之后，您变得更能干了。您断定，虽然您的工作一直干得很出色，但是您还可以比迄今为止干得更省力一些。您已从经验中得知常有这样的情况：当您从某一地区挑出一户时，这一家却根本没有电视机；在别的一些家庭中，坐在荧光屏前的小时数很少；还有一些家庭，耗在电视屏幕前的时间是非常不定的。于是您就得知，对您的统计数据的重要贡献来自何处了。

应用于统计力学问题的重要性抽样与此非常相似。虽然对于大多数问题，我们预先并不知道重要贡献来自何处，但我们可以设计一个算法，它会肯定地把我们引导到那里。

还有一只果蝇，那就是 Ising 模型。在一个有 N 个座点的点格上，系统一共可以取 2^N 个状态。这些状态中的大部分只对结果有很小的贡献，因此对状态的一个简单随机抽样，其结果的收敛性是很差的。实际上，这很像大海捞针，这些针就是对确定某个量贡献最大的那些状态。

用重要性抽样方法处理 Ising 模型将是应用重要性抽样的主要例子。在这里我们将再次重提在逾渗问题中开始的对数据分析方法的讨论。

3.2 简单抽样

本指南从应用简单抽样概念的例子开始。两个主要的例子将用来说明如何将这一概念应用于随机行走问题和逾渗问题的数值求解。我们还将分出专门的两小节讨论不退行随机行走和自回避随机行走。

3.2.1 随机行走

在头一个例子里我们要用简单抽样蒙特卡罗方法处理随机行走(RW)问题。具体地说，我们的目标是计算一次随机行走的端距作为步数的函数。

一个计算随机行走的端距和其他量的算法需要几个输入参量。首先，当然需要行走者走的步数 N 。这个参量我们希望能够变化，以建立端距和步数之间的函数关系。第二个参量，我们需要规定想要产生多少个 N 步随机行走样本。我们以 $n\text{-of-samples}$ 表示这个参量。

模块化记号中随机行走蒙特卡罗简单抽样方法如算法3.1示。

算法3.1 随机行走

```
do sample : = 1 to n-of-samples
  begin
    do step : = 1 to N
      begin
        generate-one-step    (产生一步)
      end
    end
    accumulate-results      (累积结果)
  end
```

这是端距的简单抽样的基本积木块。外循环控制我们想要得到一个 N 步行走的端距的样本个数。把每次试验产生的结果积累起来，然后在大小为 *n-of-samples* 的全部样本上取平均。对任何一次试验都不偏重，样本中的一切试验都有完全一样的权重。于是我们取的平均是简单算术平均。令 r_i 代表第 i 次试验的端距，则

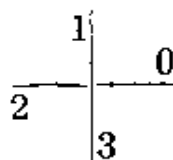
$$\langle R \rangle = \frac{1}{n\text{-of-samples}} \sum_{i=1}^{n\text{-of-samples}} r_i. \quad (3.2.1)$$

通过一个算术平均来计算端距并不是随机行走的端距的简单抽样方法的真正特征。它的真正特征在于一次试验行走的产生方法。

算法 3.1 中最里面的循环用来实际生成步数为 N 的随机行走的一个样本。为了确定起见，我们来研究在简单方格子上的二维随机行走(图2.1)。每个随机行走者都从同一个原点 $(x,y)=(0,0)$ 出发。这纯粹是为了方便，因为它使计算端距更容易。

我们手头的任务是对算法 3.1 中的标题 *generate-one-step* (产生一步)进行分解。记住，简单抽样的概念意味着不在任何一级给予任何一样东西以任何偏重。

一个随机行走者在每一步可以选择 4 个方向中的一个，每个方向的概率为 $1/4$ 。即每个方向都是等概率的。我们把各个方向编号为



在算法上实现这一点的办法是：产生一个随机数，它以同样的概率取值 0,1,2 或 3：

$ir := \text{random}(0,1,2,3).$

一旦我们选定了一个方向，随机行走者就推进到一个新位置。设随机行走者先前是在 (x, y) 位置上，那么新位置将是：

```
case ir
  0 :  $x := x + 1.0$ ;
  1 :  $y := y + 1.0$ ;
  2 :  $x := x - 1.0$ ;
  3 :  $y := y - 1.0$ ;
end
```

我们已经差不多把算法 3.1 中标题为 *generate-one-step* 的模块分解完了，剩下的问题是怎样得到随机数。为此，我们暂时假定，有一个现成的过程，它能给出在 0 和 1 之间均匀分布的随机数。利用编程语言的舍入和截断特性，我们就可以得到想要的那 4 个数。如果我们把一个实数赋给一个整型变量，这个实数或者被截断，弃去其小数部分而保留其整数部分，或者被舍入为其最接近的整数。眼下我们需要的是截断，使数 3.99... 被截成 3。在我们的人工语言中，我们假定每当把一个实值变量赋给一个整型变量时，都会丢失其小数部分。否则我们就必须明显指出该变量被舍入为最接近的整数。于是现在我们可以写

```
ir := random(iseed) * 4.
```

其中 *iseed* 是启动随机数发生器所需要的一个种籽。在作了以上的这些讨论之后，实行随机行走的端距的一个简单抽样的算法如算法 3.2（见 94 页上）所示。

对那些没有用过随机数发生器的读者，同时也对那些用过的读者(!)，我们将提供一个随机数发生器。我们取算法 3.3（见 94 页下）中的函数作为随机数发生器的一个例子。

在这里应当作一些注释，我们要求读者不要改动参量 *mult* 和 *modulo* 的值及使用别的数值。这个程序应当用一个奇数值的种

算法3.2 随机行走

```
do sample: = 1 to n-of-samples
  begin
    x := 0; y := 0;
    do step: = 1 to N
      begin
        ir := random(iseed) * 4;
        case ir
          0: x := x + 1.0;
          1: y := y + 1.0;
          2: x := x - 1.0;
          3: y := y - 1.0;
        end
      end
    end
    accumulate-results (累积结果)
  end
```

算法3.3 同余随机数发生器

```
real function random (iseed)
  integer mult, modulo, iseed;
  real rmodulo;
  begin
    mult := 1277;
    modulo := 2 ** 17;
    rmodulo := modulo;
    iseed := iseed * mult;
    iseed := mod (iseed, modulo);
    random := iseed / rmodulo
  end
```

籽起动。最后一个注释是关于求余数的函数 mod 的，我们假定这个函数存在。

▷练习3.1 把算法 3.3 编成程序供随机行走的简单抽样用。改变步数和样本大小，记录在 x 和 y 方向（分别地！）的平均端距、这些量的涨落和程序的平均执行时间作为步数的函数。

STOP

我们要求读者在做完上述练习之后再继续往下读。我们觉得带有▷号的练习对于理解本书内容是必不可少的。不应当跳过它们。

现在我们来考察用上面概述的简单抽样方法产生的随机行走的端距的结果。行走者的 x 方向和 y 方向是同等概然的，因此，我们对 x 方向和 y 方向的平均端距应当得到同样的结果。图 3.1 表示用上面给出的随机数发生器所得出的结果。两个方向上的端距差不多是一样的。我们还知道，结果必须是

$$\langle R^2 \rangle_{\text{oct}}, \quad (3.2.2)$$

但是从数值处理的结果我们不得不推断出一条不同的定律。

是什么出错了呢？概念本身是不可能错的！在这里，我们需要回过头来再看一下随机数的产生。随机数在蒙特卡罗方法中居中心地位，不论蒙特卡罗方法是采用简单抽样、偏倚抽样还是重要性抽样。一次蒙特卡罗模拟的结果是否成功（正确与否），关键在于所产生的随机数的质量。

我们来看一个更敏感的测试手段。从第 2.3.8 节我们得知，端距是没有自平均作用的。它的误差必定与步数无关。图 3.2 示出端距的误差的结果。这个误差不是常数！

我们不想详细讨论，有别的书^[3.11-3.15]讨论如何产生随机数（更精确地说是伪随机数）的问题。这里我们只作一简单介绍。

今天所用的最普及和最流行的随机数发生器是同余发生

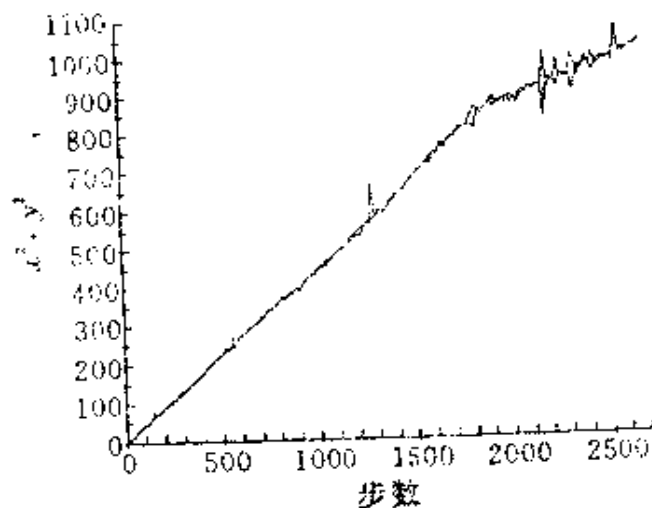


图 3.1 随机行走者的平均端距， x 方向和 y 方向分别画出，
结果是用算法 3.3 的随机数发生器得出的

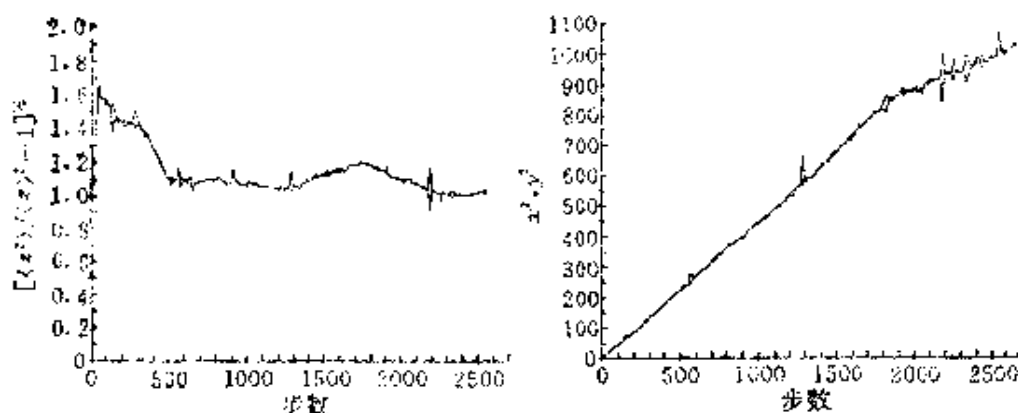


图 3.2 (左)端距的误差(它应当是常数)作为步数的函数，
其中 z 分别代表 x^2 或 y^2 ；(右)对应的端距。
结果是用算法 3.3 的随机数发生器得出的

器，上面已给出这种发生器的一个例子。尽管我们这次对这种发生器有过一次不成功的经验，但是我们不能因此而完全否定它。

同余发生器是 Lehmer^[3,10] 发明的。令 m, a, c, x_0 为整数，并且 $m > x_0$ 及 $a, c, x_0 > 0$ 。用来产生一个随机数的基本想法是一种折叠机制，它同混沌理论中研究的映射非常相似。所生成的数列

显得是高度不可预言的。

这种发生器的名称表明，折叠过程的关键是对模求余数的函数。伪随机数数列 x_i ($i = 1, 2, \dots$) 中的 x_i 按下述递推公式由 x_{i-1} 得出：

$$x_i = ax_{i-1} + c \pmod{m}.$$

从我们对参量 m, a 和 c 的值的 首次选取可以猜到，它们对产生的数的统计性质有决定性的影响。一组不好的选取将毁掉一次蒙特卡罗模拟的结果。已提出对这些参量的几种选取方法^[3.11-3.15]，请读者参看引用的文献。

不过，有一点应当在这里说一下，一个问题的数值处理常常需要大量的随机数。因此数列重复的周期必须相当大，它应当比该次模拟中所需要的随机数个数大得多，否则就会出现错误的结果。读者通过选择参量使周期很小来进行随机行走模拟，很容易相信这一点。图 3.1 中所示数据表明，我们最终到达了随机数发生器的周期长度。

大部分计算机装置和某些编程环境都提供一个随机数发生器。从上面的经验应当很清楚，在你还没有对一个随机数发生器进行过测试之前，你不应当信任它！遗憾的是，大多数统计测试，并不能发现后来出现在对统计力学问题的模拟结果的偏差中的种种相关性。也许最好的测试是把这个随机数发生器应用于一个实际问题，这个问题的结果是已知的，或者从这个问题可以推断随机数发生器一定出了什么毛病^[3.17]。

在上面的例子中(图3.1, 3.2)我们看到，随机数之间的关联有时可以通过一种微妙的方式显露出来。某些量可能只受到很微弱的影响。我们看到，对于步数较少的行走，周期长度还不成为一个问题，平均端距的结果同预期还是符合的。但是，端距的误差就不同了，它在这种情况下是一种更灵敏的测试手段。

有一种快速测试是任何随机数发生器都应当通过的。通过试

图完全填满一个 d 维点格，可以看出一个随机数发生器的质量。我们在上面已看到， $(0,1)$ 区间可以映射到整数的一个分立集合 $\{0,1,\dots,L-1\}$ 上。这个映射使我们可以在一个 d 维超立方体中构成整数分量的随机向量 (x_1,\dots,x_d) 。用随机数发生器生成这样的随机向量，把这种随机向量的终端所在的每个座点都标识出来。一个好的随机数发生器必须覆盖整个超立方体。

在二维下用模同余发生器做的这样一次测试的结果如图 3.3 所示。显然这个发生器的性能很糟糕，它表现出二重相关性，并且只能到达部分座点。许多座点根本没有光顾过！在三维下，情况更引人注目。

练习3.2 写一个程序对一个随机数发生器作上述测试。未得到光顾的座点数目应当如何随填满格子的努力次数的增加而减少？

应当注意的是，上述方法是蒙特卡罗算法中实际用到的。常常要求我们随机地走过一个自旋点格。结果表明，当使用一个不

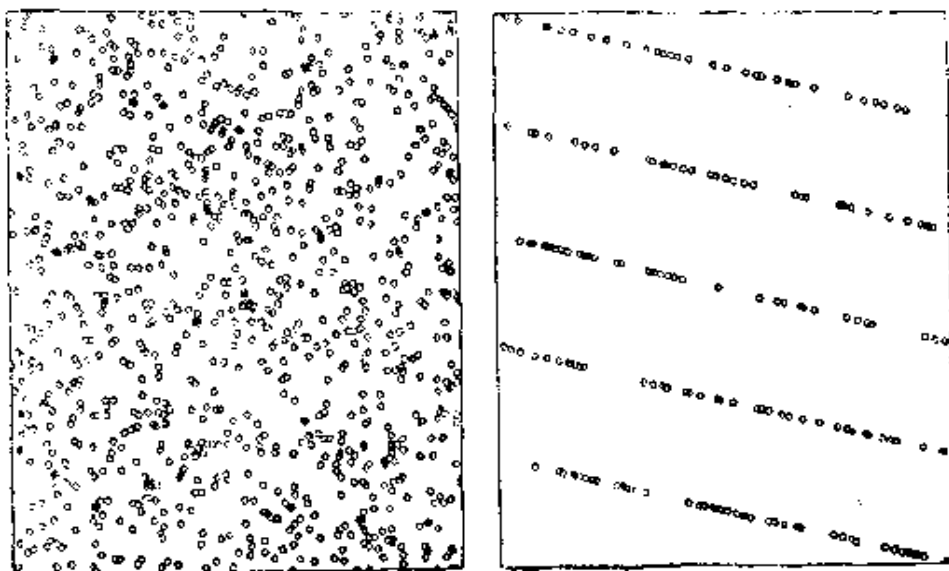


图 3.3 对一个随机数发生器的一次测试的例子。由随机数发生器得出随机向量，它们在二维点格上到达的座点用圆圈表示

好的随机数发生器时，某些座点永远不会被光顾，因而结果是带偏差的。

练习3.3 在二维、三维和四维空间进行模拟，从数值上验证 Einstein 定律

$$\langle R^2 \rangle \propto t.$$

练习3.4 带偏向的随机行走。算法3.1很容易加以修改，以研究带偏向的随机行走。为了使事情容易一些，我们考虑一维情形。在这个问题中，走+1步的概率为 p ，走-1步的概率为 q ，并且 $p+q=1$ 。在为这个问题修改过算法3.1之后，我们仍然是在作简单抽样吗？

练习3.5 用例3.1中给出的算法测试前面给出的随机数发生器。增加分组数目，检验均匀性和偏斜度。

练习3.6 扩散置限聚集。在扩散置限聚集问题中，开始时设一个 d 维点格上有一颗种子。一个随机行走者从点格的边缘出发。如果该行走者走到种子的一个紧邻座点上，它就和种子粘上，二者构成一个两个座点的聚集体。然后释放一个新的随机行走者。如果它走到聚集体的一个紧邻座点上又被粘到一起，如此等等。写一个程序以产生一个扩散置限的聚集体结构。

练习3.7 建立一个算法以产生长 N 步的随机行走，算法中不用“case”语句。

练习3.8 决定一次无规行走中兜圈子的总数作为步数 N 的函数。

练习3.9 为随机行走问题发明一个在具有 p 个处理器的并行机上运行的算法，这 p 个处理器你可以按你喜欢的任何方式连结。

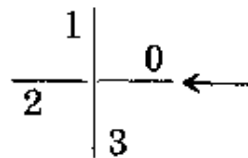
3.2.2 不退行随机行走

不退行的行走不允许立即折回，每一步都必须“向前”。我

们所谓的“向前”指的是，不允许行走者立即后退，但是允许行走者的路径交叉，也允许过一段时间后重蹈早先走过的若干步（图2.1）。

为了用简单抽样方法对不退行随机行走(NRRW)进行数值处理，我们至少有两条可能的路线可以遵循。总体上看，现在的算法和随机行走的简单抽样的算法是相同的。只有行走的产生方式（一次尝试）必须加以修正，以把约束条件考虑进来。

一种可能性是在每一步（除了从原点出发的一步外）都暂且不管行走者是来自某处这一事实。如果行走者的一步使它回到它出发的地方，那么再作一次尝试，直到得出一个“向前”步为止。这里在每一步我们以概率 $1/4$ 选择二维问题中的4个座点之一：



如果赶巧我们选中了标号为“0”的方向。那么下一步立即退回原来的座点，并作一次新的走一步的尝试，直到挑出一个合用的方向为止。在本例中，只要出现了 $\{1,2,3\}$ 三个数中的一个，就走了合用的一步。

另一种可能性是记住随机行走者来自何处，并且只在三个可能的近邻座点之中进行选择，对于三个可能方向中的每一个，取其概率为 $1/3$ 。永远有三个方向可以选择，哪怕行走者可以去的全部座点都已在以前的某一时刻被光顾过。只有在当前一步之前刚刚访问过的那个座点是被禁止的。

这个方法要求证认出各个可以去的最近邻，并且生成一个由它们构成的表。从这个有三个成员的表中以相等的概率选出一个成员。

目前，我们取前一种方法，可以在关着的门上敲若干次。这种方法只需对上一节给出的基本随机行走算法作很少的修改。例

如，我们可以引进新变量

x_{pre}, y_{pre}

以记住前一个位置，并且检查所选的新位置是否与前一个位置相同。如果相同，就重复产生一步，直到前一个位置和新位置不同为止。见算法3.4。

算法3.4 不退行随机行走

```
x := 0; y := 0;
xpre := 0; ypre := 0;
do step := 1 to N
  begin
    repeat
      xtem := x; ytem := y;
      generate-one-step(x, y)    (产生一步)
    until ((xpre ≠ x) or (ypre ≠ y));
    xpre := xtem; ypre := ytem;
  end
```

▷练习3.10 对算法3.4编程，以对不退行随机行走抽样。改变步数和样本大小，记录 x 方向和 y 方向(分别地!)的平均端距、这些量的涨落和程序的平均执行时间作为步数的函数。比较你的数值结果和精确答案。

STOP

1练习3.11 为不退行随机行走问题开发一种算法，这种算法在每一步总是从一个简单的 d 维点格上的 $2d-1$ 个可能的最近邻座点中选择一个。

练习3.12 比较算法3.4和练习3.11算法的功能。

3.2.3 自回避随机行走

产生自回避随机行走的算法，要比一般的随机行走或不退行随机行走的算法更复杂一些。在一般的随机行走问题中，对行走者可以光顾的可能座点没有加任何约束，行走者在每一步都完全忘记了它是来自何处。每个座点都看成一个原点，从它出发，可以有 $2d$ 个(对于一个简单 d 维点格)可能的方向走，而自回避随机行走(SAW)则不是一切座点都允许前去，不允许它同自己的路径交叉，也不允许行走者退行。它在每个座点上能暂时地记住它是来自何处，因而最多只有 $2d-1$ 个允许的选择。由于不退行约束条件， $2d$ 个最近邻中总是要减掉一个选择，而由于不允许路径交叉的条件，局部环境还可能禁止别的一些选择。有这样的情形存在：这时根本没有任何选择留下！

一次这种行走的一个例子如图3.4所示(又见图2.1)，随机行走者从原点出发后走了12步，如果第13步是向右走或向下走，那么行走者就会走到一个以前曾访问过的座点上去。这两种情形都是不允许的，向下走属于立即退行，而向右走则行走者会两次访问同一个座点，结果，行走在步数为12步时结束。

自回避行走简单抽样的一个要害之处是，一旦从 $2d-1$ 个近

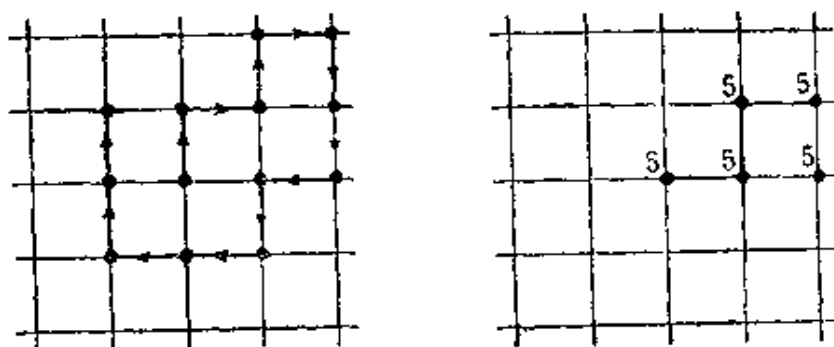


图3.4 (左)自回避随机行走的一个例子 (右)随机行走者带着一个标号5，他把这个标号留在他访问过的每一个地方

邻座点中选出一个以前曾被访问过的座点时行走就结束。我们可以提出意见说，该座点本来就是禁止去的，那么，为什么不从我们实际可以去的那些座点中进行选择呢？在下一节讨论偏倚抽样对自回避行走问题的应用时，我们将跟随这一思路。

以前在对种种随机行走的模拟中，我们完全不注意行走的实际路径或轨迹。对于自回避随机行走，我们在每一步都必须检查这一步是否符合规定。这样，我们就必须记录行走者在点格上的径迹(算法3.5)。行走本身的产生和随机行走问题相同。

算法3.5 自回避随机行走

```
do sample:=1 to n-of-samples
  begin
    step:=0;
    repeat
      generate-one-step;      (产生一步)
      step:=step + 1,
    until(step-invalid or step = N)
  end
  accumulate-results      (累积结果)
end
```

这个算法中唯一的新东西是，我们不是像在随机行走问题中那样产生正好 N 步，而是产生不可预告的步数。由于约束条件，行走可以在任何一步上结束。为了提供不可预言的步数，我们把关于 N 步的无条件循环换成这样一个循环，每产生一步，就检查相应的移动是否不合规定或最大步数 N 是否已达到。只要发生这两种情形的随便哪一种，行走就结束。行走的步数永远小于等于 N 。而对于随机行走它永远等于 N 。

怎样检查所走的一步是符合规定的呢？我们赋予每个行走者一个独特的标号。对第一个行走者我们赋给他标号“1”，对第二个行走者赋给他标号“2”，如此等等。这样的标号是随着外循环对行走者进行编号而自动赋予的。行走者一边前进，一边在他访问过的座点上加上他独特的标号(见图 3.4)。在进到下一个座点时，他要检查这个座点是否带有和他相同的标号。如果是，那就说明这个座点以前曾被访问过，自回避条件就使这次具体的行走试验结束。

现在我们处于一个岔路口上，我们必须决定怎样产生单独一步。同产生不退行随机行走一样，我们现在有两种选择。一种是不管来自何处，使用和一般的随机行走问题一样的算法来产生单独一步；另一种是，我们预先就限定只从 $2^d - 1$ 个可能符合规定的座点中选择。眼下我们选用第一种算法。

现在，加标号的方法还分辨不出一个座点是上一次访问的呢，还是更早的时候访问的。如果它是上一次访问的，那么我们必须重新再试。如果它是更早访问的，那么行走结束。

但是，加标号的方法是可以判断一步是否符合规定的。我们可以再次利用标号的唯一性。在推进到下一座点之前，先把当前所在的座点的标号暂时再加 1。行走者推进之后，就可以检查下一步将到的座点是否带有本次行走的标号(这时行走应中断结束)，或者为此标号加 1(这时行走者退行，应再试验一次)*。

实现标号机制以追踪行走的径迹的一个办法是引进一个代表点格的数组 *lattice*。在其他例子中，不论是一般的随机行走还是不退行随机行走，我们都不需要这样一个数组。这个数组该多大呢？行走者至多可以走过一段距离 N 。虽然走过距离 N 的机遇极小，我们还得为这种极端情况作准备。由于行走者可以在任何方

* 原书中下一段的叙述有些毛病，翻译时参照算法 3.6 作了修改。——译者

向走，我们把数组 *lattice* 的大小定为(算法3.6)

integer *lattice*(-N:N, -N:N)

算法3.6 自回避随机行走

```
integer lattice(-N:N, -N:N);
do sample := 1 to n-of-samples
  begin
    step := 0;
    x := 0; y := 0;
    xc := 0; yc := 0;
    repeat
      repeat
        generate-one-step(xnew, ynew);      (产生一步)
      until lattice(xnew, ynew) ≠ sample + 1;
      if lattice(xnew, ynew) = sample then
        terminate := true
      else
        begin
          lattice(x, y) := sample;
          x := xc; y := yc;
          lattice(x, y) := sample + 1;
          xc := xnew; yc := ynew;
          step := step + 1;
        end
      until (terminate or step = N);
    accumulate-results      (累积结果)
  end
```

▷练习3.13 把自回避随机行走的简单抽样的算法3.6编成程序。打印出行走结束时的长度(以步数表示)。画出自回避行走次数同步数 N 的函数关系。从成功的尝试所占的比率 $W(N)$ ，用关系式 $S - S_0 = \ln[W(N)]$ 得出熵 S ，式中 S_0 是对一般的随机行走的结果。

STOP

我们不知道一次行走将在何时结束。不同的试验中一次行走 在结束前有不同长度(步数)。从上面的练习我们得到了步数变化 多大的一些经验。如果我们想要得到有关长 N 步(N 很大)的行走 的端距的结果，那么有许多次行走将在步数小于 N 时中断，见 (2.1.16)式。对于大的 N ，简直不可能汇集足够的统计数据！我 们不把步长小于所要的长度的试验结果白白扔掉，而把它们记录 下来，得到长度在1到 N 之间整个范围内的行走的端距的结果。 但是，不同长度的统计资料构成是不同的。长度短的的样本大小 要比长度较长的大得多。这使自回避行走的简单抽样，对于100 步或更长的长度，简直是不可能的。

▷练习3.14 把自回避随机行走抽样的算法3.6编成程序。这 里不要求输出行走结束时的长度，而是要记录 x 和 y 方向上分别 的端距。还要计算端距的涨落，并记录在你的计算机所能处理的 最大长度下仍能得到足够好的统计数据所必需的执行时间。检验 这时的误差是能够控制的。

STOP

！练习3.15 为SAW问题开发一个算法，它在每一步从 d 维 简单立方点格上的 $2d - 1$ 个可能的最近邻座点中选一个。

练习3.16 你能想出另一种记录行走者路径的方法吗？(提

示：使用一个栈。)

主旋律的变奏

练习3.17 蠕行(reptation)聚合物同自回避行走之间的联系导致产生自回避行走的又一个想法。设我们有一个长度为 N 步的自回避结构。在链条的一端拆下一个“环节”。在链条的另一端取一个随机的方向(从 $2d-1$ 个可能的方向中选取)，并且把拆下的环节按此方向安放在这里。如果这一挪动违反了自回避条件，就不接受它，否则就得出一个新结构。重复以上手续。这个算法适用哪一种抽样概念？在本指南的末尾可以看到这个问题的答案。

3.2.4 逾渗

表面看来，逾渗问题的简单抽样方法，似乎是一个比前几节讨论的随机行走问题更简单的问题。简单抽样在这里意味着，各个位形的产生和对它们的分析均以各个位形有均匀的统计权重为前提来进行。在平等的基础上对待每个位形。

我们简短地回忆一下，对于逾渗问题，我们感兴趣的是求几何相变点 p_c (第2.3.1节)。在 p_c 之下只存在有限集团。在 p_c 之上至少有一个无穷大集团。这个几何相变是热系统中在临界温度 T_c 发生的二级相变的类似物。趁此机会，除了逾渗理论的专门问题之外，还要开始研究和分析相变。

在谈到种种指数之前，我们先来决定阈值 p_c 。对简单抽样，我们想要产生逾渗位形的 N 个抽样，并对从这些位形得出的种种物理量进行平均。这样做的基本算法是算法3.7(见108页上)。

在逾渗问题(更精确地说是座逾渗问题)中，我们考虑以概率 p 来填充一个点格(为了方便，我们仍假定为二维点格)。在简单抽样机制中，每种填充被看成一个位形。为了产生一个位形，我们必须访问点格上的每个座点一次，并决定是填充它呢还是不填

充。这可以用算法3.8办到。

算法3.7 逾渗

```
do no-of-config:=1 to N
  begin
    generate-a-configuration;      (产生一个位形)
    analyze-the-configuration;    (分析位形)
    calculate-quantities;         (计算各个量)
    accumulate-results;          (累积结果)
  end
perform-averaging;              (进行平均)
```

算法3.8 generate-a-configuration (产生一个位形)

```
do i:=1 to L
  do j:=1 to L
    if  $p < \text{random}(\text{iseed})$  then
      lattice(i,j):=0;
    else
      lattice(i,j):=1;
```

其中 *random* 是一个实函数,它送回一个在(0,1)区间内的随机数, *iseed* 是一个整数,它在首次调用时使随机数发生器初始化。

▷练习3.18 把产生座逾渗问题的一个位形的算法 3.8 编成程序。选择不同的填充概率 p , 打印出位形,并对它们进行视察。

STOP

通常是通过清点该位形中各种集团的大小和数目来分析一个生成的位形的。如前所述，相变的序参量是通过集团定义的。

现在需要开发一个算法，以在生成的一个座点位形中证认出一个集团。我们记得，一个集团是这样定义的：两个被占据的座点，如果它们是最近邻，就属于同一集团。因此，一个集团是被占座点的一个子集合：对属于该子集合的每一座点，我们可找到它的一个最近邻座点也属于这个子集合。

我们可以把格子中的被占座点总体看成一个图。这个图可以有许多不相连的子图，如图3.5所示。有只含一个孤立座点的图，也有包含两个座点的集团，等等。我们的任务是要列举出一切子图，即共有多少个子图，每个子图中有多少个座点。

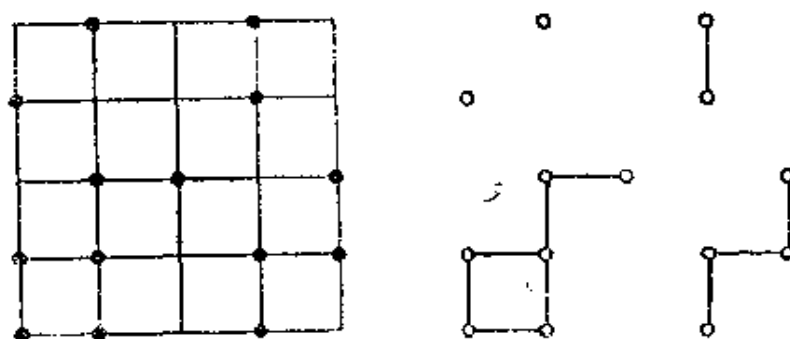


图3.5 (左) 一个座逾渗位形 (右) 上一位形中的子图

在试图证认和列举出一个给定的位形中的全部集团之前，我们给自己提一个简单一些的任务：证认一个无穷集团。这个任务更简单，因为它要对付的不是全部集团而只是一部分。换句话说，有没有这样一条通路，把我们从点格的一边带到对边。找到这样一条通路的概率也定义了一个序参量 P_c ，可以用来决定转变点。在 P_c 之下找到这样一条通路的概率为零，只存在有限集团，它在热力学极限下不能通到对边。在这个阈值之上存在一个无穷大集团，它能从一边通到对边，序参量为 1。在 P_c 点，序参

量从零跳到 1。

▷练习3.19 发明一个算法以判定在座逾渗问题的一个位形中是否能从点格的一边过渡到对边。这样的一个集团叫做跨越集团 (spanning cluster)。决定不同点格尺寸和不同概率 p 下的序参量 P_s 。

STOP

做了练习3.19的读者将会发现，在所考察的点格尺寸下，序参量的行为是光滑的，不会在一个独特的概率值 p 上发生从 0 到 1 的跳变。我们在这里第一次遇到了相变问题中的有限尺寸效应。我们暂且稍微推迟讨论有限尺寸效应，而回到如何证认一个给定的位形中的集团的问题上来。从我们对序参量 P_s 的经验，我们预期从最大集团导出的序参量 P_s 也会有类似的特性。

也许证认全部集团的最自然的方法是一个递归算法。为了说明这一想法，我们把问题简化：不是工作在一个方格子上，而是工作在一棵二叉树上。这样一棵树的例子如图3.6所示。

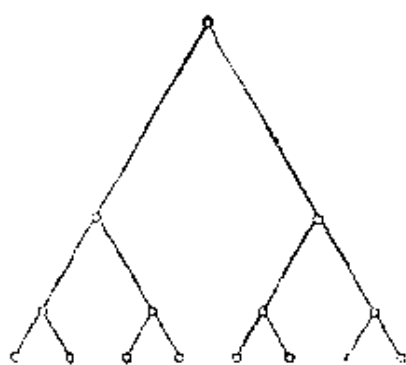


图3.6 一棵二叉树
我们在其上研究逾渗位形

对于每一个座点，只有下方的两个最近邻和上方的一个先行者。逾渗问题本身仍像上面那样定义：访问每个座点，并以概率 p 占有这个座点（或以概率 $1-p$ 不占这个座点，留为空白）。

考虑此树上由被占座点和空白座点构成的一个位形。挑出一个被占座点，为了判断还有哪些座点和这个座点属于同一集团，我们要穿越整棵树，直至一切可能的路径被勘察过为止。由于每个座点在下方至多有两个被占的最近邻，因此至多有两个可能的方向要勘察。我们把这两个方向

用来访问属于同一集团的所有座点的策略是，首先沿着这个集团尽可能远地向前走，直到走到这棵树的一片叶子，或者用逾渗问题的术语说，走到一个终端点 (dangling end) 为止。而找到这样一个终端点的具体做法则是尽可能向左走。在图3.7中画出了这样一条路径。一旦我们到达不能进一步向左走的一点，如果可能就向右走一步，然后继续向左走，这样持续下去。最终我们会到达一个座点，它既无左邻，又无右邻，这个座点就是一个终端点。我们取消这个座点，把点数这个集团中座点数目的计数器的计数加1，然后退回到上一点。

A diagram of a tree structure with nodes and directed edges. The root node is at the top. It has two children. The left child has two children of its own. The right child has one child. Arrows indicate a path from the root to the left child, then to the left child's left child, and finally to the left child's left child's left child.

这个算法产生终端点，然后把它从集团上摘下来或烧掉。最后，整个集团都被烧掉，只剩下那些与当前集团不相连结的座点。然后，可以选择一个新的座点，并重复焚烧座点的过程。如果已没有座点剩下，整棵树都已烧掉，算法就停止。

* 原书这一段有错。译者在征得作者同意后作了修改。此外，算法 3.9 也有一些问题，它没有反映出绕掉终端点后沿二叉树向上退回前一点的移动。不过从前面的说明中读者已可以了解整个算法。在读这个算法时应记住，它是递归的。——译者

下标代表左邻或右邻，数组元素之值可以为0，也可以取集合{1, ..., N}中的一个整数。如果为0，此座点没有邻居；否则就得到指向下一座点的指针。

算法3.9 对二叉树的 analyze-the-configuration (位形分析)

```
burned := 0;
repeat
    select-an-unburned-site(i)    (选择一个没烧掉的座点)
    n := 1
    go-through-tree(i, n)
    burned := burned + n
until occupied-sites = burned
procedure go-through-tree(i, n)
begin
    if tree(i, 1) ≠ 0 then go-through-tree(tree(i, 1), n);
    if tree(i, 2) ≠ 0 then go-through-tree(tree(i, 2), n);
    tree(i, 1) := 0;
    tree(i, 2) := 0;
    n := n + 1;
end
```

▷练习3.20 把证认二叉树上座逾渗问题的集团的算法3.9编成程序。

STOP

我们选择在一棵二叉树上展示逾渗问题的焚烧算法当然是有意的。在正规点格上算法要复杂一些。走过一个集团的总的想法仍然相同。二叉树的简化之处在于它不会出现兜圈子的现象。在

正规点格上可能出现图3.8所示的循环圈。

为了消除循环圈的问题,我们再次利用示踪方法.算法访问过但未烧掉(即置成零)的每个座点被赋以值 2。因此只要检验下一个座点是否带有值 2,就可以检测出一个循环圈。于是把这个座点暂且放在一边,而烧掉此循环圈中在此之前的座点。

用集团给出的相变问题的序参量的定义是:取一个给定位形中的最大集团,然后除以被占座点的总数。当然我们必须对许多个位形求平均,以得到对序参量 P_∞ 的一个精确估计。

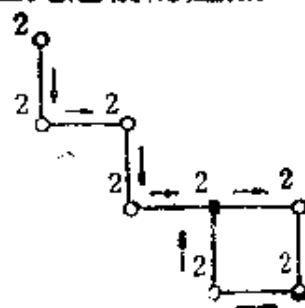


图3.8 一个集团和它的图,显示怎样检测一个循环圈

在相变点 p_c 附近我们预期
(第2.3节)

$$P_\infty \propto |p - p_c|^\beta,$$

其中 β 为指数。在这里我们对如何计算 β 不感兴趣,而是要决定 p_c 。

迄今我们暗中都假设边界是自由的。点格的大小为 L^2 ,一旦 i 或 j 大于 L 就越过了边界。点格的实际大小被设为 $(L+2)^2$,边界上之值置为零。这里我们首次遇到边界条件问题。对边界有两种可能的选取。我们可以选择

自由边界;

周期性边界。

更复杂的边界条件对某些问题是有用的。我们将在重要性抽样那一节的练习中讨论这些边界条件。这里我们只考虑自由边界条件和周期性边界条件。

对于周期性边界条件,我们对 i, j 取值作以下规定: $L+1=1$ 及 $0=L$ 。对于二维点格,其结果是一个充气轮胎似的环面。模拟结果依赖于边界条件的选择吗?

▷练习3.21 上面简单介绍了在方格子上的座逾渗问题中证明集团的算法,把它编成程序.对不同的点格尺寸和不同的概率 p 决定序参量 P_∞ . 分别在自由边条件和周期性边条件下做.

STOP

这里我们再次遇到系统的有限大小问题. 我们预期, 在阈值 p_c 之上, 我们求得的序参量应呈幂函数行为; 在阈值之下, 序参量应恒等于零. 但是实际上我们求得的, 对任何尺寸的系统都是一条光滑的 S 形曲线图 2.9.

在一个有限点格中, 是容纳不下一个发散的相关长度的! 趋近相变点时, 相关长度按下式发散:

$$\xi \propto |p - p_c|^{-\nu} \quad (3.2.3)$$

但是, 相关长度至多只能是 $\xi \approx L$. 为了处理这种情况, 对不同的系统尺寸下的数据进行一次有限尺寸标度分析 (第 2.3.2 节). 我们将把这样一个分析推迟到讨论 Ising 模型的数据的有限尺寸效应时再进行. 这里我们只想说一点, 那就是模拟的结果依赖于对边界条件的选择. 对于自由边条件和周期性边条件, 有限尺寸效应是不同的!

对于实用的目的, 上面所给的算法是没有用处的. 对于人们想研究的大点格, 递归层数达到如此之深, 以致内存容量很快就耗尽了. 实际工作中人们使用一个不同的算法, 我们将在附录中讨论, 并给出一个 FORTRAN 程序清单.

练习3.22 点格动物 (Lattice animals). 考虑一个规则点格上不包含循环圈的集团. 这样的集团叫做点格动物*. 你能想出一个办法对含 N 个座点的一切点格动物使用简单抽样方法吗?

* “人们把这些位形叫做‘点格动物’, 因为它们同多细胞生物有某种相似, 如果你数它们的时间太长, 晚上就会做恶梦梦见它们。”——译者转引自 D. Stauffer, *Introduction to Percolation Theory*, p.25.

练习3.23 反常扩散。考虑一只蚂蚁被空投到一个逾渗位形上^[3,18]。它刚一着陆就在所在集团上开始一次随机行走。蚂蚁只能在被占座点上行走。计算其方均位移作为时间和 p 的函数：

$$\langle R^2 \rangle_p \propto t^x,$$

并得出幂指数 x 。

*** 练习3.24** 您能为并行机想出一种证认集团的算法吗？

主旋律的变奏

练习3.25 键逾渗。在键逾渗问题中人们还是考虑一个格子。对于座逾渗问题，座点之间所有的键都出现。只有座点才是重要的。而对于键逾渗问题，所有的座点都被占，我们以概率 p 占据一个键，以概率 $1-p$ 使键为空。集团的定义方法同座逾渗问题中相似。定出二维键逾渗问题的序参量。对序参量的两种定义（用出现跨越集团定义的序参量 P_∞ 和用最大集团的质量定义的序参量 P_m ）做这个问题。

练习3.26 座-键逾渗。我们也可以把键逾渗和座逾渗合在一起研究。记住对座逾渗问题所有的键都存在，而对键逾渗问题所有的座点都存在。在座-键逾渗问题中，座点以概率 p_s 出现。只有在被占座点之间才可能有键存在。如果两个相邻的座点被占，那么键出现的概率为 p_b 。研究二维情形下逾渗阈值 p_{bc} 作为 p_s 和 p_b 的函数。

练习3.27 动态逾渗。对于有些问题，我们对一个给定的逾渗位形中全部集团并不感兴趣，而只是对最大的集团感兴趣。例如，正好在逾渗阈值 p_c 上时，最大集团是一个分形，我们想要对它的性质了解得更多些。我们可以靠一种生长过程生成一个大的逾渗集团，从这个生长过程我们还可以得知生长规律，即回

旋半径*如何随时间增大。这个算法如下。从单个座点开始，列一个最近邻清单。以概率 p 占据清单中的每一个座点，然后作一个新的最近邻清单（注意，你已访问过但决定不占据的那些座点标为空白的）。把这个算法编成程序，并计算回旋半径作为 p 和时间的函数。

练习3.28 连续区逾渗.逾渗问题也有一个连续区提法.想象有一个方形区域，你手头有许多圆盘，你把它们随机地扔到方形区域上。为此，你用一个随机数发生器产生一个 x 坐标和一个 y 坐标.以概率 p 把圆盘中心放在这个坐标上.如果你能够通过交叠的圆盘从方形的一边过渡到对边，那么就找到了一个跨越集团。打印出你的试验结果，用视察判断是否存在一个跨越集团。

3.3 偏倚抽样

对自回避行走问题的讨论着重表明了简单抽样方法的限度。虽然这个方法应用起来很直截了当，但是对许多问题它的用途受到限制。即使是对不大的步数，也难以汇集足够的统计数据。随着步数的增加，困难程度按指数律增加。偏倚抽样有助于（至少是部分地）克服这个困难。为了说明偏倚抽样怎样能提高效率，我们仍然讨论自回避行走问题。这也使读者能够对简单抽样的性能与偏倚抽样方法的性能立即作一比较。

3.3.1 自回避随机行走

为了对自回避行走问题的偏倚抽样开发出一个算法，我们再看一下在讨论简单抽样处理方式时开发的基本算法。现在管这个算法叫算法3.10。

* 回转半径 (radius of gyration) 是描写空间随机结构的线度的一个重要参量，其定义为其各个成员到其公共重心的距离的方均根值。——译者

算法3.10 自回避随机行走

```
do sample := 1 to n-of-samples
  begin
    step := 0;
    repeat
      generate-one-step;    (产生一步)
      step := step + 1;
    until (step-invalid or step = N)
  end
  accumulate-results    (累积结果)
end
```

▷练习3.29 如果你曾跳过某一个有关自回避随机行走的简单抽样的练习未做，那么这里你应当停下来并且做这些练习。

STOP

简单抽样的真正缺点在于一次行走迅速结束，即损耗问题。如果我们恰巧选中一个以前光顾过的座点，行走就结束，即使别的座点并未被占。设我们不断产生一个现在尚未被占的最近邻清单。在一个 d 维超立方格子上，这个清单的长度永远小于这个格子的配位数减 1 即 $2d - 1$ 。令这个清单的长度为 l 。在偏倚抽样中，我们只从这个清单中进行选择，其中每个成员有同样的概率被选中。因而每个成员被选中的概率为 $1/l$ 。

只从可用的座点中进行挑选的主意并不能保证行走一直继续下去，直至走满 N 步为止。在走满 N 步之前行走就遇到终端点的问题仍然存在，但是行走继续到 N 步的概率增加了。

算法3.11 自回避随机行走

```
integer lattice(-N:N,-N:N) ;
do sample := 1 to n-of-samples
  begin
    step := 0;
    repeat
      produce-valid-neighbor-list(x,y) (产生可用近邻清
                                          单)

      if list = empty then
        terminate := true
      else
        begin
          choose-new-site-from-list(xnew, ynew); (从清
                                                  单中选一座点)

          x := xnew ; y := ynew ;
          step := step + 1;
        end
      until (terminate or step = N);
    accumulate-results (累积结果)
  end
```

▷练习3.30 把自回避随机行走的偏倚抽样的算法3.11编成程序。打印出行走结束时的步数。

STOP

对于这个算法，就像以前对不退行随机行走和自回避随机行走一样，标号是一个有用的工具，它有助于追踪走过的路径，有助于

产生一个可以访问的近邻座点清单。

做过练习3.30的读者将会发现，在一次行走结束前我们可以抽样的行走长度（步数）增大了。我们为这一改进所付的代价是引进了一个偏倚。我们对一次行走的某些位形比较偏重。对于简单抽样，每一行走在求平均量（如端距）时带有相同的权重。对于偏倚抽样，每个长 N 步的行走带有权重

$$W = \prod_{i=1}^N \frac{l_i}{(2d-1)}, \quad (3.3.1)$$

在计算平均时必须考虑这一点。

▷练习3.31 用自回避随机行走的偏倚抽样方法计算平均端距。把你的结果同简单抽样得出的结果作一比较。

STOP

主旋律的变奏

！练习3.32 k -重 SAW。 k -重自回避随机行走同正规的自回避随机行走非常相似。在正规的 SAW 中，对一个座点至多可以访问一次，而 k -重行走则获准访问一个座点至多 k 次。用偏倚抽样概念为这个问题写一个算法*。

练习3.33 GSAW。生长的自回避随机行走（GSAW）的定义同正规的自回避行走几乎完全相同。唯一的区别是，到一个座点的转移概率是自由座点数的倒数。用偏倚抽样概念为这个问题写一个算法。

3.4 重要性抽样

在有些问题中，对物理量的贡献几乎完全来自相空间中的某

* k -重 SAW 可分为允许逆行和不允许逆行两种。本题中假设为不允许逆行（NRRW）。——译者

些区域。对于这些问题，简单抽样或偏倚抽样概念是不便于实用的。对相空间进行均匀抽样将要求极大的工作量。可以利用关于重要贡献主要来自哪些区域的知识，主要在这些区域中抽样。这一概念应用的一个典型例子是 Ising 模型。

3.4.1 Ising 模型

同前面的例子一样，我们只在二维空间中研究这个问题。考虑 Ising 模型的哈密顿量

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j, \quad (3.4.1)$$

其中 J 是最近邻座点之间的交换相互作用，它既可为正（铁磁体），也可为负（反铁磁体）。变量 S 代表一个自旋，其值为 $+1$ 或 -1 。我们限于简单方格子的情形，这时符号 $\langle i, j \rangle$ 代表座点 (i, j) 的四个最近邻：

$$\begin{array}{ccc} & (i, j-1) & \\ & \vdots & \\ (i-1, j) & \text{---} & (i+1, j) \\ & \vdots & \\ & (i, j+1) & \end{array}$$

令 x 代表一个自旋位形。

回想起第二章和本章开头处对重要性抽样概念的讨论，可以知道，这时是要产生一个 Markov 链

$$x_0, x_1, \dots, x_n$$

使位形 x_{i+1} 仅仅依赖在它之前的位形 x_i 。由 x_i 到达 x_{i+1} 的概率由一个跃迁概率

$$W(x_{i+1} | x_i)$$

给出。

为什么我们需要一条 Markov 链呢？重要性抽样的想法，是

从对一个量（例如磁化强度）有最大贡献的那些场合进行抽样。我们想要对 Boltzmann 因子 $\exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T]$ 取峰值的自旋位形抽样。但是预先我们并不知道这种区域在什么地方！假设我们可以发明一个过程，通过这个过程可以生成对磁化强度或任何别的可观察量作重要贡献的状态。这个过程是一个 Markov 过程，具有一个适当的从一个位形到另一个位形的跃迁概率。

跃迁概率是这样选择的，使得各状态 $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ 的分布最终为 Boltzmann 分布

$$P(\mathbf{x}) \propto \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\mathbf{x})}{k_B T}\right).$$

我们必须怎样选择跃迁概率，以保证状态分布服从 Boltzmann 定律呢？在第2.1节和第2.2节，我们已经详细讨论过这一点。直观地可论证如下。设我们限于处理只反转单个自旋 S_i 的试图。假设把一个自旋从 S_i 反转为 $-S_i$ 时会损失能量。由于我们总是想要处于或靠近模型的基态，我们应当以概率为 1 接受这一变动。因此，在能量变化 $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathbf{x}_{\text{new}}) - \mathcal{H}(\mathbf{x}_{\text{old}})$ 为负的情形下，我们有 $W(\mathbf{x}_{\text{new}}|\mathbf{x}_{\text{old}}) = 1$ 。但是，这样一来我们肯定会陷在一个局部能量极小中。为了避免发生这种情况，我们也得接受使能量增加的变动。但是，我们只允许使能量增加很多的变动很少发生，因此它们发生的概率应当很低。反之，如果能量变化很小，即老位形同新位形的能量接近，那么我们允许这种变动以相当高的概率发生。这样我们就能向上攀登，挣脱局部能量极小。

在能量变化 $\Delta\mathcal{H}$ 为正的情况下，我们该怎样选取跃迁概率呢？一种直观上看来合理、而且也可以精确证明（第2.1和2.2节）的选取是

$$W(\mathbf{x}_{i+1}|\mathbf{x}_i) = \min\left[1, \exp\left(-\frac{\Delta\mathcal{H}}{k_B T}\right)\right], \quad (3.4.2)$$

它叫做 Metropolis 函数。但是，这并不是对跃迁概率的唯一可能

的选取。还有别的选取法，例如取 Glauber 函数

$$\left(\frac{1}{2} (1 - \tanh(\Delta \mathcal{E} / 2k_B T)) \right)$$

▷练习3.34 对简单格子上的二维最近邻 Ising 模型，可能的能量变化有哪些？

STOP

上面我们建立了单个自旋反转的跃迁概率。一旦对所有的自旋都给过一次反转方向的机会，就完成了**一次扫描**。一次扫描也叫做每自旋一蒙特卡罗步，缩写为 MCS。

对整个点格实现一次扫描有几种可能的方法，就扫描这个字的字面意义来说，它意味着有规则地从头到尾走过点格。另一种可能的方法是随机地抽选将要访问的座点。一旦做过的抽选尝试的次数与点格上的座点数目相等，就完成了**一个蒙特卡罗步**。在一蒙特卡罗步中，某些座点可能被考虑过多次，而别的座点则完全未被考虑过。平均来看，若随机数本身没有任何问题(第3.2.1节)，对每个座点给了一次反转的机会。

既然我们知道如何建立 Markov 过程以从对平均值的重要贡献进行抽样，那么我们如何计算比方说磁化强度呢？由于重要性抽样的建立方法(第2.1节)，磁化强度的计算是作为一个简单平均。一个位形的磁化强度由下式给出：

$$M_i = \sum_{j=1}^{L^2} S_j. \quad (3.4.3)$$

于是每自旋的磁化强度为

$$m_i = M_i / L^2. \quad (3.4.4)$$

每自旋的平均磁化强度是对多个位形的算术平均

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \sum_i^N m_i. \quad (3.4.5)$$

我们必须用某个初始位形 S_0 来启动重要性抽样, 然后源源不断生成新状态. 那么我们应当选取哪一个初始自旋位形呢? 这个问题的答案取决于我们感兴趣的问题的类型. 设我们想要研究 Ising 模型在某些温度下的平衡性质, 像磁化强度和磁化率. 并假设我们不是从一个完全有序的自旋位形而是从一个随机的自旋位形出发. 这时将会发生什么情况呢? 随机的自旋位形对应于自发磁化强度为零的无穷大温度状态 $T = \infty$. 我们感兴趣的温度是低于临界温度的, 因此自发磁化强度不为零. 现在我们用例如 Metropolis 函数使系统在时间中演化. 实质上, 我们是实行了一次淬火, 从相图中的无序区进入有序区. 这需要经过一段极长的时间才能建立起一个平衡态. 在平衡态建立之前必须先去掉超额的能量.

为了避免这个问题, 我们从一个有序位形出发, 这时 Markov 链中的初始暂态过程 (它对应于非平衡态) 要短得多. 随着离开转变点的距离的增加, 弛豫过程的速度按指数律增大. 在转变点附近发生什么情况已在第 2.3 节讨论过了. 为了方便起见, 我们从一个所有自旋都朝下, 即磁化强度为 -1 的位形出发. 或者, 如果我們是在升温的话, 我们也可以从在某一温度产生的最终位形出发.

我们已经差不多准备就绪, 可以写部分算法了. 还必须考虑的是样本的大小. 我们暂时把这个问题放在一边, 并且把我们想要取的样本个数叫做 *mcsmax*.

算法 3.12 Ising 模型

```
(*初始化点格*)
do i : = 1 to L
  do j : = 1 to L
    lattice(i, j) : = -1
```

```

    (*蒙特卡罗部分*)
do mcs := 1 to mcsmax
  begin
    generate-one-step;      (产生一步)
    if mcs  $\geq$   $n_0$  then
      do-analysis          (分析)
  end

```

在算法3.12中 n_0 是暂态过程的位形数，我们必须弃去它们，因为它们不对应于所要的温度下的平衡态位形。

我们回到跃迁概率上来。显然，位形 x_{i+1} 同位形 x_i 不能相差太远。我们只允许单个自旋反转，而不是多个自旋反转，后者将导致两个位形在相空间中离开更大的距离。状态序列可以看成相空间中的轨道（见第2.2.2节中对蒙特卡罗算法的动态解释的讨论）。从这个角度来看，我们可以看出，相继的位形之间必定是有关联的。为了得到状态的一个无偏统计抽样，我们必须在每两个样点之间抛弃 n_0 个状态。究竟必须抛弃多少个不仅和温度有关，而且还同守恒定律有关。见算法3.13。

算法3.13 Ising 模型

```

(*初始化点格*)
do i := 1 to L
  do j := 1 to L
    lattice(i,j) := -1
  (*蒙特卡罗部分*)
count := 0;
do mcs := 1 to mcsmax
  begin
    generate-one-sweep;      (产生一次扫描)

```



```

if  $mcs \geq n_0$  then
  begin
     $count := count + 1$ ;
    if  $count = n_0$  then
      begin
         $count := 0$ ;
        do-analysis;      (分析)
      end
    end
  end
end

```

练习3.35 你能设计另外一种每 n_0 个位形才选取一次的解决方法吗?

在有了这些准备知识之后, 现在来讨论 Ising 模型的重要性抽样算法的核心部分, 即算法 3.13 中的 *generate-one-sweep* (产生一次扫描)。我们这样设计跃迁概率, 使得总是只试图反转一个自旋, 而不是更多的自旋。扫过点格的一次扫描试图反转所有的自旋。这是一个蒙特卡罗步。在经过一蒙特卡罗步之后我们从旧位形得到了一个新位形。因此第一步是算法 3.14, 其中 L 是点格的线大小。

算法 3.14 *generate-one-sweep* (产生一次扫描)

```

do  $i := 1$  to  $L$ 
  do  $j := 1$  to  $L$ 
    begin
      compute-the-energy-difference;      (计算能量差)
      decide-to-flip-or-not;      (决定是否反转)
    end
  end
end

```

从上面的讨论我们还记得，接受一次反转的概率为 W ，我们取它为 Metropolis 函数。设我们已算出能量差 $\Delta\mathcal{E}$ ，我们就可以算出接受这一反转的概率 W 之值，因为它只依赖于能量差， $W = W(\Delta\mathcal{E})$ 。选一个 0 与 1 之间的随机数。如果这个随机数小于算出的跃迁概率，我们就使自旋反转。否则我们让这个自旋保持它原来的取向（算法3.15）。

算法3.15 *generate-one-sweep* (产生一次扫描)

```

do  $i := 1$  to  $L$ 
  do  $j := 1$  to  $L$ 
    begin
      compute-the-energy-difference,      (计算能量差)
      if  $\text{random}(\text{iseed}) < W(\Delta\mathcal{E})$  then
        flip-the-spin,      (自旋反转)
      end
    end
  end
end

```

我们认识到，没有必要在每次打算反转一个自旋时计算一次函数 W 。能量差一共只有 5 个可能的值（练习 3.34）。这个函数可以预先计算好并存放在一个数组里以备迅速查找。能量差值是

$$\Delta\mathcal{E} = 2S_i \frac{J}{k_B T} \sum_{nn(i)} S_j, \quad (3.4.6)$$

其中符号 $nn(i)$ 代表中心自旋 i 的 4 个最近邻。

算法3.16 备查的表（见最后的完整算法算法3.18）

```

real  $W(-4:4)$ ;
do  $j := -4$  to  $4$  step 2;
  begin
     $W(j) := 1$ ;
  end
end

```

```

    if  $j > 0$  then
         $W(j) := \exp(-2*Jkt*j)$ 
    end

```

现在只留下一个问题。我们必须解决最后一个标题计算能量差（见算法3.14和3.15）。这里有一个岔路口。我们面临着和逾渗问题相同的决定，必须从不同的边界条件中挑选一个。在格子边缘的每个自旋的键不能孤悬在空气中，自旋必须同最近邻相互作用。这里我们选用周期性边条件。

实现周期性边条件的一个办法是使用求余函数。在格边缘，即中心自旋 (i, j) 的 i 为 1 或 L 或者 j 为 1 或 L 的地方，我们用下式来计算最近邻：

$$ip1 = i + 1 \pmod{L}, \quad (3.4.7)$$

$$im1 = i - 1 \pmod{L}, \quad (3.4.8)$$

$$jp1 = j + 1 \pmod{L}, \quad (3.4.9)$$

$$jm1 = j - 1 \pmod{L}. \quad (3.4.10)$$

这个方法是很耗时间的。每次计算求余函数都包括好几个算术运算。时间是关键。最内层循环必须这样构成，使算术运算次数最少。这里的解决办法仍然是使用一个表。实际上我们将需要两个表，一个给“加”运算用，一个给“减”运算用（算法3.17）。

算法3.17 代替求余函数来查的表（见算法3.18）

```

real  $ip(1:L), im(1:L)$ ,
do  $i := 1$  to  $L$ 
    begin
         $ip(i) := i + 1$ ,
         $im(i) := i - 1$ ,
    end

```

```

ip(L) := 1;
im(1) := L;

```

现在，进行二维 Ising 模型的重要性抽样的算法已经完成了。所有的主要部分都已设计好。为了完整起见，我们给出整个算法为算法3.18。

算法3.18 Ising 模型

```

integer lattice(1:L,1:L);
integer ip(1:L),im(1:L);
real W(-4:4)
    (*mod 函数的表*)
do i:=1 to L
    begin
        ip(i) := i + 1;
        im(i) := i - 1;
    end
ip(L) := 1;
im(1) := L;
    (* 指数函数表 *)
do j := -4 to 4 step 2
    begin
        W(j) := 1;
        if j > 0 then
            W(j) := exp(-2*Jkt*j)
        end
    end
    (* 初始化点格 *)
do i := 1 to L
    do j := 1 to L

```

```

    lattice(i,j) := -1
    (* 蒙特卡罗部分 *)
count := 0;
do mcs := 1 to mcsmax
begin
do i := 1 to L
do j := 1 to L
begin
    ici := lattice(i,j);
    ien := lattice(ip(i),j) + lattice(im(i),j)
        + lattice(i,ip(j)) - lattice(i,im(j));
    icn := ici * ien
    if ranf < W(ien) then
        lattice(i,j) := -ici
    end
end
if mcs ≥ n0 then
begin
    count := count + 1;
    if count = n0 then
begin
        count := 0;
        do-analysis; (分析)
    end
end
end
end

```

▷练习3.36 把算法3.18编成程序。对参量 Jkt 取某些值，打印出磁化强度的演化作为蒙特卡罗步数的函数。

STOP

我们的首要目标是要定出简单点格上的二维 Ising 模型的相变点, 即 $J/k_B T_c$ 。当然, 二维 Ising 模型的解析结果是精确^[3,19]知道的。这给了我们判断数据分析工作得好不好的机会。

在第 2.3 节的讨论中我们得知, 有限大小的系统的相变点会变模糊。这些有限尺寸效应与边界条件有关。对于逾渗问题的简单抽样, 关于序参量的结果同关于磁化率的结果是不同的。对于热引起的相变, 也有同样的情况。

在数据因系统大小以及边界条件的不同而不同的情况下, 我们怎样决定相变点呢? 解决问题的关键, 是系统在相变点附近的标度特性。我们预期在相变点附近会得到以下的标度关系:

$$m(T, L) = L^{-\beta/\nu} \hat{f}[(T - T_c)L^{1/\nu}], \quad (3.4.11)$$

$$\chi(T, L) = L^{\gamma/\nu} \hat{g}[(T - T_c)L^{1/\nu}]. \quad (3.4.12)$$

标度函数 \hat{f} 和 \hat{g} 与细节情况例如边界条件有关。

▷ **练习 3.37** 定出序参量并从序参量的涨落定出磁化率作为温度 T 和系统的线度大小 L 的函数。在自由边界条件和周期性边界条件下进行模拟。并计算磁化强度的四阶矩。

STOP

从练习 3.37 得到原始数据之后, 我们可以用有限尺寸标度的概念来分析这些数据。这种原始数据的一个例子如图 3.9 所示。

在实际进行有限尺寸标度分析之前, 我们应当再反思一下原始数据的精度。我们是否曾弃去足够多的初始位形? 记住, 在相变点附近系统弛豫到平衡状态的特征时间 τ 为

$$\tau \propto L^z,$$

其中 z 为 2 的量级, 并且, 各个位形之间是动态关联的, 记住位形之间的动态关联会减少样本的数目(第 2.3.8 节)。

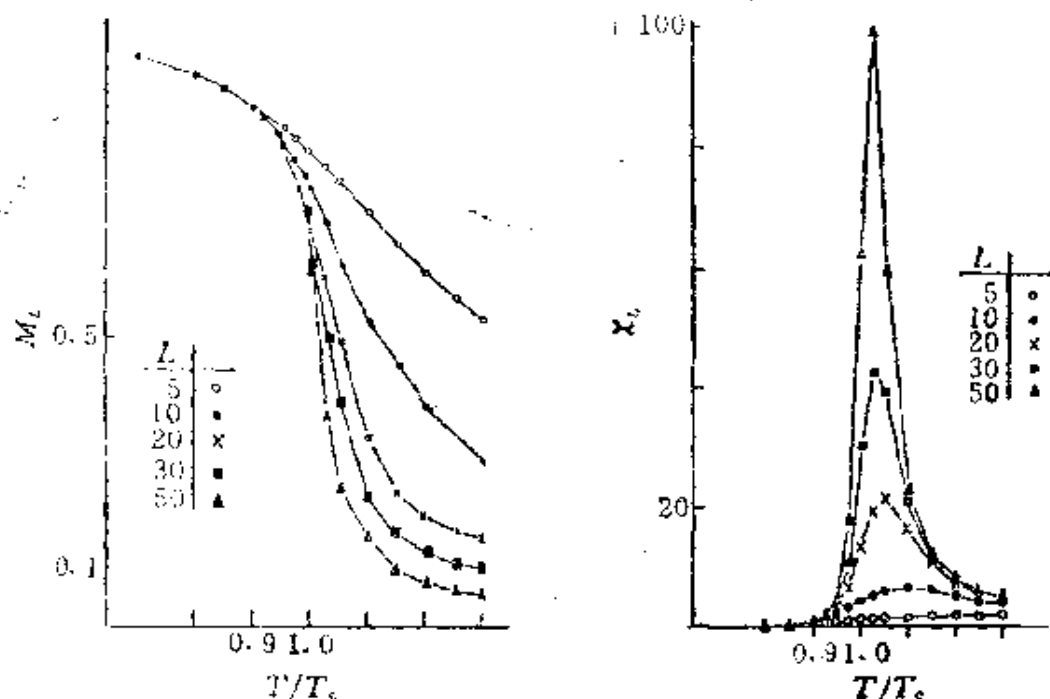


图3.9 磁化强度和磁化率对点格的线大小 L 的依赖关系，
示出的数据是关于二维 Ising 模型的

在继续往下做之前，你能对下述问题作出肯定的回答吗？

你是否积累了磁化强度的绝对值？

如果对这个问题的答案是否，你必须重复全部模拟工作！为什么？

这样做的理由已经在第2.3节讨论过。由于系统的大小有限，我们发现，它在低于相变点时是各态遍历的。在一个无穷大系统中，即在热力学极限下，系统是没有机会从自发磁化的一侧转到另一侧的（如从正转到负）。在有限大小的系统里，存在一个特征时间，其长短与系统的大小有关，经过这段时间系统可转入另一侧。那些细心做过各个练习，特别是练习 3.36 的读者，应当已经注意到这一现象。我们是从负的一侧出发的，全部自旋指向朝下。然后系统弛豫到平衡态，并围绕平衡态涨落。在低于相变点的温度下有时磁化强度会变成正值。发生这种情况的一个例子见

图3.10.

对磁化强度作简单平均将得出不正确的数值。它与系统反转磁化方向的次数有关。为了避免这个问题，通过取磁化强度的绝对值把两侧折叠到一侧去。

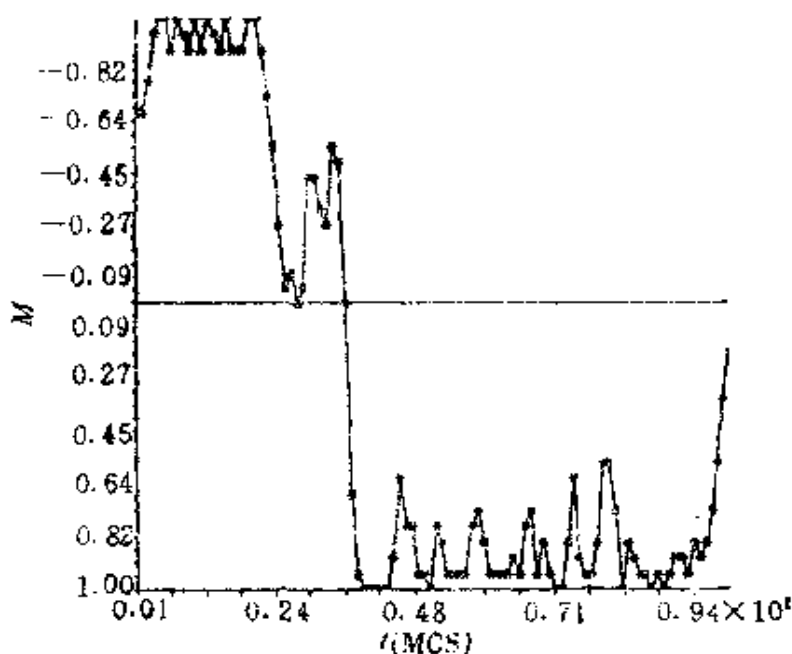


图3.10 磁化强度的演化作为蒙特卡罗步数 (MCS) 的函数，这个图表明，在小系统中，磁化强度改变符号相当经常地发生

在对要做什么和不要做什么讨论了这么长之后，我们可以进而决定相变点了。为此我们使用累积量

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3\langle m^2 \rangle_L^2} \quad (3.4.13)$$

在模拟过程中计算这个量不需要多少额外开销。这里我们必须发布一个警告。数据经常是这样，使得单精度变量达不到所需的精度。用一个单精度变量，有价值的数字位都丢失了，使给出的结果毫无用处。这一点是怎样强调也不算多的。

为了定出相变点，我们选用成对的系统尺寸 (L, L') 。临界

点是一个固定点，在该点有

$$U_L = U_{L'} \quad (3.4.14)$$

在相变点，两个大小不同的系统的累积量必定相交。换句话说，如果我们画出比值 $U_L/U_{L'}$ 和温度的关系曲线，那么对所有各对系统尺寸，我们都应在一个特定的温度找到一个唯一的交点，这就是相变点。

▷练习3.38 实行累积量分析以定出二维 Ising 模型的临界点。把你的答案同精确值 $J/k_B T_c = \ln(1 + \sqrt{2})/2$ 比较。

STOP

图3.11示出对二维 Ising 模型的一次累积量分析。

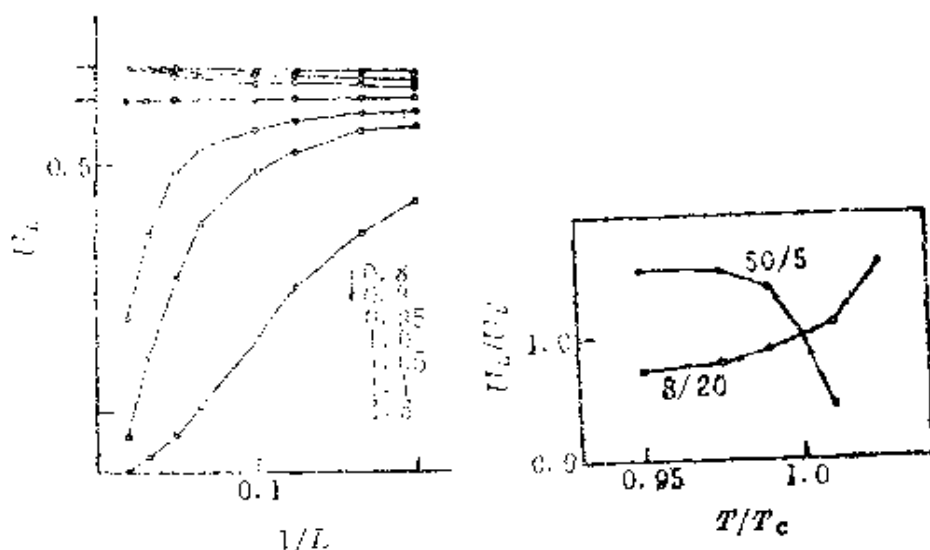


图3.11 二维Ising 模型的累积量分析

实际做起来，分析累积量数据并不像看起来那样简单。为了对所有各对 (L, L') 得到一个唯一的交点，必须在相当接近预期的临界点的地方工作。这通常是一个迭代过程。对温度范围的第一次扫描通过观察磁化强度和磁化率缩小了发生相交的区域。在被怀疑是临界区的区域内选取一些点作进一步模拟。这些点需要

有精度很好的统计数据。用得到的数据作首次累积量分析。在这一阶段常常找不到唯一的交点。需要用更多的点，每点有质量更好的统计数据。

定出了这个模型的相交点之后，就可以接着进行有限尺寸标度分析。这可以使大小不同的系统的磁化强度的全部数据并合成一个标度函数，这个标度函数同边界条件有关。

标度关系也决定性地依赖于指数和相变点。如果相变点还没有足够精确地定出，那么即使我们能找到标度关系，找到的也将是不好的标度行为。如果指数知道得不够精确，这也将标度行为中显露出来。

幸好，对二维 Ising 模型，我们精确地知道指数的值，也精确知道相变点。我们用这种精确知识来看练习3.37中得到的数据的标度行为好不好。如果标度行为不好，那么这反映数据的精度有问题。

为了进行标度分析，我们在 x 轴上画变量

$$x \equiv (T - T_c) L^{1/\nu},$$

在 y 轴上画变量

$$y \equiv m(T, L) L^{\beta/\nu}.$$

若参量 T_c , β 和 ν 选用了正确数值，那么大小不同系统的数据将叠合为单一的一条曲线。其逆定理也正确；如果通过改变参量 T_c , β 和 ν 使全部数据都落到单一的一条曲线上，那么我们就找到了临界点和临界指数。

▷ 练习3.39 对磁化强度实行有限尺寸标度分析。

STOP

在结束这一节时，我们再讨论一下数据的精度问题。我们在第2.3.8节中得知，某些量不是自平均的。在转到较大的系统尺寸时，这些量的误差并不减小。它们的误差与系统大小无关。

磁化率就是这样一个不具有自平均性质的量。换到较大的系统尺寸，我们并不能在精度方面有任何获益，而只是不得不工作得更辛苦。

➤ 练习3.40 用数值方法验证，磁化率不具有自平均性质。

STOP

！ 练习3.41 对磁化率实行有限尺寸标度分析。

！ 练习3.42 Glauber函数。在本节的开头我们介绍了 Glauber 函数，作为单个自旋反转的跃迁概率的另一个可能的选择。把 Glauber 函数加入到你现有的二维 Ising 模型的程序中，重做本节的一些练习。

！ 练习3.43 Ising模型在磁场 H 中的哈密顿量是

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i.$$

对于单个自旋反转，可能的能量变化值 $\Delta \mathcal{H}$ 是哪些？重做练习3.37。

练习3.44 发明一种映射，把二维简单点格映射到一维，使所有的邻居都均匀间隔。使用周期性边界条件。

练习3.45 实现螺旋边界条件(即第2.2.2节中的歪斜周期性边界条件)。

练习3.46 棋盘算法。为了在一台具有流水线体系结构的计算机上高效率地运行一个程序，该算法的形式必须是可以矢量化的。为了使二维Ising模型的一个算法矢量化，把点格分成两个子格会有好处。有好几种方式做这件事。其中之一是把座点像棋盘那样相间涂成黑白两色。反转一个黑色座点的能量变化只依赖于这个座点周围的白色座点。全部黑色座点可以同时更新！为二维Ising模型写一个使用棋盘概念的算法。

练习3.47 什么问题 and Ising 模型中 $T = \infty$ 的极限情况对应？

练习3.48 界面。迄今我们用过的边界条件都是均匀的。边界要么是周期性的，要么边界上的全部座点被迫取一个固定值。考虑下面这样的边界

```

- - - - -
-           -
-           -
+           +
+           +
+ + - + + + + + +

```

这样的边界在系统内产生一个界面。使用你在本节开发的程序并建立上面所示的边界，画出你得到的诸位形。

练习3.49 川崎恭二动力学。迄今我们所用的处理Ising模型的重要性抽样的方式是这样的，它除了选用的温度以外，对系统不加任何约束。有时我们想要引入一条守恒定律。例如，我们要求+1和-1自旋的浓度固定。为了实现浓度固定，我们引入自旋之间的交换代替单个自旋的反转。取具有不同取向的一对最近邻自旋，交换它们。计算能量的改变，并且像单个自旋反转那样，如果这一变动被拒绝这一对自旋就不交换。能量改变 $\Delta \mathcal{H}$ 有哪些可能值？

主旋律的变奏

练习3.50 Potts 模型。Potts 模型的哈密顿量为

$$\mathcal{H}_{\text{Potts}} = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \delta_{q_i} \delta_{q_j}.$$

其中 J_{ij} 是交换耦合，各 J_{ij} 可以是完全相同的。变量 q 可以取值 $\{1, 2, \dots, q\}$ 。定出 2 态 Potts 模型的临界点。

练习3.51 XY 模型。XY 模型是具有连续自由度的模型的一个例子。这个模型中没有只能取离散值的自旋。XY 模型的哈

密顿量的一种写法是

$$\mathcal{H}_{XY} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \cos(\phi_i - \phi_j) - H \sum_i \cos \phi_i,$$

其中 J_{ij} 是交换耦合，它可以全同； H 是外磁场。写一个 XY 模型的重要性抽样算法。

练习3.52 Lennard-Jones 势。迄今为止所有各节讨论的例子，至少都部分涉及到一个点格。这当然并不是应用重要性抽样概念所必需的。考虑一个体积为 V 的盒子中的 N 个点粒子。体积是这样选取的，使得可以在一个特定的密度 ρ 下进行模拟。各个粒子通过如下的 Lennard-Jones 对偶位势彼此相互作用：

$$\phi(r_{ij}) = 4\varepsilon[(\sigma/r_{ij})^{12} - (\sigma/r_{ij})^6].$$

其中 r_{ij} 是粒子 i 和粒子 j 之间的距离； ε 规定能量的单位， σ 规定长度的单位。用标度后的变量工作起来最方便。对 Lennard-Jones 系统的重要性抽样可如下进行：选取一个粒子，产生一个随机数 r ，并且使这个粒子移动一个由此随机数导出的距离 δ 。计算能量的变化。是否接受这个位移的做法与书中讨论的做法完全相似。写一个算法并把它编成程序。计算平均内能、比热容和压强。你怎样加边界条件？

3.4.2 自回避随机行走

还有什么比用一个练习来结束本指南更合适呢：

▷ **练习3.53 扭跳(Kink-jump)。**考虑简单方格子上的自回避随机行走。我们继续和聚合物类比，把自回避行走看成一条有 N 个珠子和连杆(或者座点和键)的链。为了产生新位形，随机取一个珠子(或座点)。如果这颗珠子是末端上的珠子，那么原则上它可以在三个方向上运动。如果这颗珠子不在末端上，那么它可以作一个“扭折”型的运动。

1. 画出一条链子的构形的几个例子，列出各颗珠子的可能的运动。
2. 为扭跳方法发明一种算法。你做的是哪一种抽样？
3. 你看到遍历性出问题没有？
4. 迄今我们没有考虑各颗珠子之间的相互作用。假设珠子之间有一个相互作用 ϵ ，同Ising 模型中的交换相互作用类似。发明一个算法模拟这个模型。你做的是哪一种抽样？

附 录

在本指南中我们遇到了一系列算法。作者希望每个积极参与本指南规定的工作的人能够试验所述的算法。书中给出的所有算法都是用赝程序设计语言写出的。我们认识到，暂时还不是每个读者都熟悉这种算法语言。但是，如果参加者不能坐下来自己在计算机上进行模拟，这本指南就毫无用处。

为了帮助参加者从这种算法语言转换到FORTRAN,我们在这个附录中收入两个基本算法的FORTRAN 程序。参加者现在将对某些问题是怎样解决的有些体会，他们在把给出的 FORTRAN程序去适应书中给出的其他算法时也不会发生困难。

A1 随机行走问题的算法

第一个清单是一个关于随机行走问题简单抽样的程序。

```
C .....
C                                     Algorithm
C          Simple Sampling for the Random Walk
C          Dieter W. Heermann
C          Oct. 1987
C .....
integer nwalk, n, iseed, ip
real r, edx, edy, edxs, edys, xsqr, ysqr
write (*,*) 'step length of walk'
read (*,*) n
write (*,*) 'how many walks'

read (*,*) nwalk
write (*,*) 'seed'
```

```

read (*,*) iseed
edx = 0.0
edy = 0.0
edxs = 0.0
edys = 0.0
do 10 i = 1, nwalk
    x = 0.0
    y = 0.0
    do 20 j = 1, n
C      产生一步
        r = random (iseed)
        ip = r * 4
        if (ip. eq. 0) x = x + 1.0
        if (ip. eq. 1) y = y + 1.0
        if (ip. eq. 2) x = x - 1.0
        if (ip. eq. 3) y = y - 1.0
20    continue
C      积累结果
        xsqr = x * x
        ysqr = y * y
        edx = edx + xsqr
        edy = edy + ysqr
        edxs = edxs + xsqr* xsqr
        edys = edys + ysqr* ysqr
10    continue
C      进行平均
        edx = edx/float (nwalk)
        edy = edy/float (nwalk)

```

```

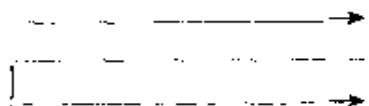
write (*,*) edx, edy, edxs, edys
stop
end

```

A2 用来证认集团的算法

这个算法用来证认一个给定的逾渗位形中的全部集团，它是以 Hoshen 和 Kopelman 首先提出的想法^[A.1]为基础的，这个想法被 Kertesz^[A.2]进一步发展，下面描述的算法广泛地用了他的发展。

这个算法使用加标号的方法，对于书中给出的别的一些算法，我们发现加标号也是很有用的。假设我们从左上角到右上角扫过一个点格，并从左边头一个座点开始继续扫下一行：



等等

这很像一台打印机单向打印时打印头在纸上的运动。我们把第一个被占的座点标号为“1”。如果下一个座点也被占，我们把标号“1”带到该座点上*。如果我们找到另一个被占的座点，它同标号为“1”的集团不连接，就把它标号为“2”，如此等等。设我们现在在格子中的某个座点上，它上方和左方的座点均已访问过。我们更假设当前所在的这个座点是被占的。我们来检查当前座点上方的座点是否被占的，如果是，读出它的标号。下一步再检查左方的座点是否被占的，如果是，读出它的标号。我们应当赋给当前座点哪个标号呢？上方座点的标号同左方座点的标号可能不相同，两个座点可以属于两个直到现在还不相连的集

* 经作者同意，译者对这一段文字作了一些改动，并且改写了下面的程序，改正了其中的错误，并使得更清楚好读。——译者

团，而当前座点就是它们的连接点。两个集团有不同的标号，我们需要一种手段把这两个不同的标号彼此等同起来。

用来使不同的标号等同的办法，是使用一个置换数组。如果标号为“10”的集团成了标号为“7”的集团的一部分，我们就在第10号元素下安置这样一项，指使我们去查标号“7”。

两集团必须看成一个集团的情况当然可以多次发生。标号为“7”的集团又可能同集团“5”连接起来。那么，我们怎样辨认出根源标号（即互相连接的集团的最初标号）呢？

每当两个集团被证认为同一集团时，集团中的座点数要增加，增加的个数多于1。我们从何处得到有关一个集团中的座点数目信息？

上面提出的这两个问题可以一起回答。我们引进两种指针。正整数代表集团中座点个数。负整数则指示你去查找下一个标号。我们穿过置换数组不断查找，直到找到一个正数为止。

落实上面扼要叙述的想法的程序清单如下。

SUBROUTINE CLUSTR (L,LATTIS,LPTR,IFLAG)

C 这是原书 A2 中所附程序的修正，由于这个程序中用了较少
C 的 GOTO 语句，它比原来的程序好读一些。

C *****

C 变量说明：

C 哑元

C LATTIS——发生逾渗的点格，大小为 L*L。

C LPTR——置换数组。LPTR(I)>0，代表第 I 个集团中的座
C 点个数。LPTR(I)<0，代表指针。

C IFLAG——指示是否存在跨越集团。

C 其它

C UP——上邻。

C LEFT——左邻。

- C CL——集团的标号。
- C KL——第一行格点所属集团数
- C ROW——记录当前座点之前一行坐点所属集团。它不是哑元,不能用可调数组
- C NOFS——一个集团中的座点数目。

- ```

 INTEGER LATTIS(L,L), LPTR(1000),UP,LEFT,CL,
 KL, NOFS
 INTEGER ROW(0:100)
 MAXI=99999
 CL=0
C 初始化上邻和左邻的状况。(自由边条件)
 DO 100 IROW=0,L
 ROW(IROW)=MAXI
100 CONTINUE
C 对点格扫描,
 DO 300 IROW=1, L
 DO 200 ICOL=1, L
C 如果座点 (ICOL, IROW) 为空
 IF(LATTIS(ICOL, IROW).EQ.0) THEN
 ROW(ICOL)=MAXI
 GO TO 200
 END IF
C 否则座点(ICOL,IROW)被占.查上邻和左邻属于哪一集团。
 UP=ROW(ICOL)
 LEFT=ROW(ICOL-1)
C 若上邻与左邻全空,那么此座点可能属于一个新集团,赋予
C 一个新标号。

```

IF(UP.EQ.MAXI.AND.LEFT.EQ.MAXI)  
THEN

CL = CL + 1

ROW(ICOL) = CL

LPTR(CL) = 1

GO TO 200

C 如果上邻或左邻被占，更新置换表，推到根源标号。

ELSE

C 上邻：

IF(LPTR(UP).LT.0) THEN

MS = LPTR(UP)

110 LA = - MS

MS = LPTR(LA)

IF(MS.LT.0) GO TO 110

LPTR(UP) = - LA

UP = LA

END IF

C 左邻：

IF(LPTR(LEFT).LT.0) THEN

MS = LPTR(LEFT)

120 LA = - MS

MS = LPTR(LA)

IF(MS.LT.0) GO TO 120

LPTR(LEFT) = - LA

LEFT = LA

END IF

END IF

C 求最小标号并将属于同一个集团的座点数目相加

```
 NOFS = 1
 IF (UP.EQ.LEFT) GO TO 130
 MINI = MINO(UP, LEFT)
 IF (UP.NE.MAXI) THEN
 NOFS = NOFS + LPTR(UP)
 LPTR(UP) = - MINI
 END IF
130 IF (LEFT.NE.MAXI) THEN
 NOFS = NOFS + LPTR(LEFT)
 LPTR(LEFT) = - MINI
 END IF
 ROW(ICOL) = MINI
 LPTR(MINI) = NOFS
200 CONTINUE
 IF (IROW.EQ.1) KL = CL
300 CONTINUE
C 这个位形中有跨越集团吗?
 IFLAG = 0
 DO 310 II = 1, L
 IF (ROW(II).LE.KL) THEN
 IFLAG = 1
 GO TO 320
 END IF
310 CONTINUE
320 RETURN
 END
```

## 参 考 文 献

### 一般性文献

- D.W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg 1986)
- K. Binder (ed.), *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, Topics Curr. Phys., Vol. 36, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg 1987)
- See also [2,8,10]

### 第 2 章

- 2.1 K.Kremer, A. Baumgärtner, K. Binder, J. Phys. A 15,2879 (1982)
- 2.2 P.J. Flory, *Principles of Polymer Chemistry*(Cornell University Press, Ithaca, NY 1953)
- 2.3 P.G.de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics*(Cornell University Press, Ithaca, NY 1979)
- 2.4 A. Baumgärtner, In *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, ed. by K. Binder, Topics Curr.Phys., Vol. 36, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg 1987) Chap.6
- 2.5 A. Milchev, K. Binder, D.W. Heermann, Z. Phys. B 63, 521 (1986)
- 2.6 L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon, Oxford 1958)
- 2.7 N.Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller, J.Chem.Phys. 21, 1087 (1953)
- 2.8 K. Binder (ed.), *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Topics Curr. Phys., Vol. 7, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg 1986)
- 2.9 H. Müller-Krumbhaar, K. Binder, J. Stat. Phys.8, 1 (1973)

- 2.10 K. Binder, In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb, M.S. Green, Vol. 5b (Academic, New York 1976) p. 1
- 2.11 R.J. Glauber, J. Math. Phys. 4, 294 (1963)
- 2.12 K. Kawasaki, In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, ed. by C. Domb, M. S. Green, Vol. 2 (Academic, New York 1972) p. 443
- 2.13 A. Milchev, D.W. Heermann, K. Binder, J. Stat. Phys. 44, 749 (1986);  
又见 A. D. Bruce, J. Phys. A 18, L873 (1985)
- 2.14 A.K. Kron, Vysokomol. Soedin. 7, 1228 (1965) [Polym. Sci. USSR 7, 1361 (1965)]; F. T. Wall, F. Mandel, J. Chem. Phys. 63, 4592 (1975)
- 2.15 P.E. Rouse, J. Chem. Phys. 21, 1272 (1953)
- 2.16 P.H. Verdier, W.H. Stockmayer, J. Chem. Phys. 36, 227 (1962)  
P.H. Verdier, J. Chem. Phys. 45, 2122 (1966);  
P.H. Verdier, J. Chem. Phys. 59, 6119 (1973);  
D.E. Kranbuehl, P.H. Verdier, J. Chem. Phys. 71, 2662 (1979);  
H.J. Hilhorst, J.M. Deutch, J. Chem. Phys. 63, 5153 (1975);  
H. Boots, J.M. Deutch, J. Chem. Phys. 67, 4608 (1977)
- 2.17 A. Baumgärtner, K. Binder, J. Chem. Phys. 71, 2541 (1979);  
J. Chem. Phys. 75, 2994 (1981);  
A. Baumgärtner, Annu. Rev. Phys. Chem. 35, 419 (1984)
- 2.18 W. Oed, Appl. Informatics 7, 358 (1982)
- 2.19 A.B. Bortz, M.H. Kalos, J.L. Lebowitz, J. Comput. Phys. 17, 10 (1975); 又见 K. Binder, [Ref. 2.8, p. 1]
- 2.20 A. Sadiq, J. Comput. Phys. 55, 387 (1984)
- 2.21 H. Maller-Krumbhaar, K. Binder, Z. Phys. 254, 269 (1972);  
K. Binder, H. Maller-Krumbhaar, Phys. Rev. B7, 3297 (1972)
- 2.22 新近的一篇评述, 见 W. Selke, In *Alloy Phase Stability*, ed. by A. Gonis, L.M. Stocks (Nijhoff, Dordrecht 1990)
- 2.23 M.E. Fisher, In *Critical Phenomena*, ed. by M.S. Green

- (Academic, New York 1971);
- M. E. Fisher, M. N. Barber, Phys. Rev. Lett. 28, 1516 (1972)
- 2.24 M. N. Barber, In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, ed. by C. Domb, J. L. Lebowitz (Academic, New York 1983) Chap. 2
- 2.25 K. Binder, Z. Phys. B 43, 119 (1981);  
K. Binder, Phys. Rev. Lett. 47, 693 (1981)
- 2.26 K. Binder, Ferroelectrics 73, 43 (1987)
- 2.27 D. P. Landau, Phys. Rev. B 13, 2997 (1976);  
D. P. Landau, Phys. Rev. B 14, 255 (1976)
- 2.28 S. Wansleben, Comput. Phys. Commun. 43, 315 (1987)
- 2.29 K. Binder, D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. 52, 318 (1984);  
Surf. Sci. 151, 409 (1985)
- 2.30 K. Binder, Phys. Status Solidi 46, 567 (1971); Physica 62, 508 (1972); Z. Angew. Phys. 30, 51 (1976)
- 2.31 V. Wildpaner, Z. Phys. 270, 215 (1974)
- 2.32 对“小系统的模拟”的评述, 见 H. Müller-Krumbhaar, in [Ref. 2.8, Chap. 5]
- 2.33 K. Binder, H. Rauch, V. Wildpaner, J. Phys. Chem. Solids 31, 391 (1970)
- 2.34 K. Binder, D. P. Landau, J. Appl. Phys. 57, 3306 (1986);  
K. Binder, D. P. Landau, D. M. Kroll, J. Magn. Magn. Mater. 54—57, 669 (1986);  
K. Binder, D. P. Landau, D. M. Kroll, Phys. Rev. Lett. 56, 2272 (1986)
- 2.35 K. Binder, D. P. Landau, Phys. Rev. B 37, 1745 (1988)
- 2.36 I. M. Kim, D. P. Landau, Surf. Sci. 110, 415 (1981)
- 2.37 K. Binder, Thin Solid Films 20, 367 (1974)
- 2.38 K. Binder, P. C. Hohenberg, Phys. Rev. B 9, 2194 (1974);  
K. K. Mon, K. Binder, D. P. Landau, Phys. Rev. B 35, 3683 (1987)
- 2.39 H. Müller-Krumbhaar, K. Binder, Int. J. Magn. 3, 113 (1972)
- 2.40 K. Binder, M. H. Kalos, In [Ref. 2.8, Chap. 6],



- K.W. Kehr, K. Binder, In *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, ed. by K. Binder, Topics Curr. Phys., Vol. 36, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg 1987) Chap. 6
- 2.41 K. Binder, D. Stauffer, In [Ref. 2.8, Chap. 8],  
K. Binder, A.P. Young, Rev. Mod. Phys. 58, 867 (1986)
- 2.42 H.J. Herrmann, Phys. Rep. 136, 143 (1986)
- 2.43 A. Baumgärtner, K. Binder, K. Kremer, Faraday Symp. Chem. Soc. 18, 37 (1983);  
A. Baumgärtner, J. Polym. Sci. C. Symp 73, 181 (1985)
- 2.44 H.-O. Carmesin, K. Binder, Europhys. Lett. 4, 269 (1987);  
Z. Phys. B. 68, 375 (1987)
- 2.45 J.D. Gunton, M. San Miguel, P.S. Sahni, In *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 8, ed. by C. Domb, J. L. Lebowitz (Academic, New York 1983) Chap. 3;  
K. Binder, In *Condensed Matter Research Using Neutrons*, ed. by S.W. Lovesey, R. Scherm (Plenum, New York 1984) p.1;  
K. Binder, In *Alloy Phase Stability*, ed. by A. Conis, L.M. Stocks (Nijhoff, Dordrecht 1990) ;  
K. Binder, D.W. Heermann, In *Scaling Phenomena in Disordered Systems*, ed. by R. Pynn, A. Skjeltorp (Plenum, New York 1987) p. 207
- 2.46 A. Sadiq, K. Binder, J. Stat. Phys. 35, 617 (1984);  
K. Binder, Ber. Bunsenges. Phys. Chem. 90, 257 (1986);  
G.S. Grest, P.S. Sahni, Phys. Rev. B 30, 2261 (1984);  
E.T. Gawlinski, M. Grant, J.D. Gunton, K. Kaski, Phys. Rev. B 31, 281 (1985);  
K. Binder, D.W. Heermann, A. Milchev, A. Sadiq, In *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics*, ed by L. van Hemmen, I. Morgenstern, Lect. Notes Phys., Vol. 275 (Springer, Berlin, Heidelberg 1987) p. 154
- 2.47 A. Sadiq, K. Binder, Surf. Sci. 128, 350 (1985)
- 2.48 有关用主宰方程描述随机 Ising 模型和与之有关的模型的背景知识, 见

[2.12]

- 2.49 N. Madras, A.D. Sokal, J. Stat. Phys. 50, 109 (1988)
- 2.50 A. Sariban, K. Binder, Macromolecules 21, 711 (1988)
- 2.51 这个时间被以下的作者讨论过: Binder and Young [2.41b], by Binder et al. [2.46e] and by R.G. Palmer, Adv. Phys. 31, 669 (1982)
- 2.52 M.Y. Choi, B.A. Huberman, Phys. Rev. B 29, 2796 (1984)
- 2.53 例如, 同 [Ref. 2.8, p. 33] 中所述的算法 3 比较,
- 2.54 R. Kutner, K. Binder, K.W. Kehr, Phys. Rev. B 26, 2967 (1982); Phys. Rev. 28, 1846 (1983)
- 2.55 K.W. Kehr, R. Kutner, K. Binder, Phys. Rev. B 23, 4931 (1981)
- 2.56 对分子动力学的最新评述见: W.G. Hoover, *Molecular Dynamics*, Lect. Notes Phys., Vol. 258 (Springer, Berlin, Heidelberg 1986); and D.W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg 1986) Chap. 2
- 2.57 R. Friedberg, J.E. Cameron, J. Chem. Phys. 52, 6049 (1970)
- 2.58 K.E. Schmidt, Phys. Rev. Lett. 51, 2175 (1983);  
G. Parisi, In *Progress in Gauge Field Theory*, ed. by G. 't Hooft et al. (Plenum, New York 1984) p. 531  
G.G. Batrouni, G. Katz, A. Kronfeld, G. Lepage, S. Svetitsky, K. Wilson, Phys. Rev. D 32, 2736 (1985);  
J. Goodman, A. Sokal, Phys. Rev. Lett. 56, 1015 (1986);  
R.H. Swendsen, J.S. Wang, Phys. Rev. Lett. 57, 2607 (1986), and preprint;  
S. Duane, Nucl. Phys. B 257 [FS 14], 652 (1985);  
J. Kogut, Nucl. Phys. B 275 [FS 17], 1 (1986);  
E. Dagotto, J. Kogut, preprint
- 2.59 P.C. Hohenberg, B.I. Halperin, Rev. Mod. Phys. 49, 435 (1977)
- 2.60 D. Stauffer, Phys. Rep. 54, 1 (1979), *Introduction to Percolation Theory* (Taylor and Francis, London 1985)

- 2.61 集团计数算法在以下文献中有描述: H. Muller-Krumbhaar [Ref. 2, 8, Chap. 5];  
J. Hoshen, R. Kopelman; Phys. Rev. B 14, 3438(1976);  
D. Stauffer; In *Disordered Systems and Localization*, Lect. Notes Phys., Vol. 149 (Springer, Berlin, Heidelberg 1981) p. 9; and in [2.62]. 一种不同的方法是集团生长方法 [P.L. Leach; Phys. Rev. B 14, 5046 (1976)]
- 2.62 K. Binder, D. Stauffer; In *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, ed. by K. Binder, 2nd ed. (Springer, Berlin, Heidelberg 1987) Chap. 8
- 2.63 D.W. Heermann, D. Stauffer, Z. Phys. B 40, 133 (1980)
- 2.64 S. Kirkpatrick, In *Ill-Condensed Matter*, ed. by R. Balian, R. Maynard, G. Toulouse (North-Holland, Amsterdam 1979) p. 321
- 2.65 A.P. Young, S. Kirkpatrick, Phys. Rev. B 15, 440 (1982)
- 2.66 E. Stoll, K. Binder, T. Schneider, Phys. Rev. B 8, 3266 (1973)
- 2.67 K. Binder, H. Rauch, Z. Phys. 213, 201 (1969)
- 2.68 D. Stauffer, K. Binder; Z. Phys. B 30, 313 (1978); 41, 237 (1981)
- 2.69 H.E. Stanley, *An Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena* (Oxford University Press, Oxford 1971)
- 2.70 K. Binder, Phys. Rev. A 25, 1699 (1982)
- 2.71 K.K. Kaski, K. Binder, J.D. Gunton; Phys. Rev. B 29, 3996 (1984)
- 2.72 M.N. Barber, R.B. Pearson, J.L. Richardson, D. Touissaint; Phys. Rev. B 32, 1720 (1985)
- 2.73 D.P. Landau; J. Magn. Magn. Mater. 31-34, 11 (1983)
- 2.74 C.S.S. Murty, D.P. Landau; J. Appl. Phys. 55, 2429 (1984);  
M.S.S. Challa, D.P. Landau; Phys. Rev. B 33, 437 (1986)
- 2.75 D.P. Landau, K. Binder; Phys. Rev. B 31, 5946 (1985)
- 2.76 K. Binder, M. Nauenberg, V. Privman, A.P. Young; Phys. Rev. B 31, 1493 (1985);

- K. Binder, Z.Phys. B 61, 13 (1985)
- 2.77 R.N. Bhatt, A.P. Young, Phys. Rev. Lett. 54, 924 (1985);  
A. Chakrabarty, preprint
- 2.78 B. Dunweg, K. Binder, Phys. Rev. B 36, 6935 (1987)
- 2.79 G.S. Pawley, R.H. Swendsen, D.J. Wallace, K.G. Wilson,  
Phys. Rev. B 29, 4030 (1984)
- 2.80 G. Bhanot, D. Duke, R. Salvador, Phys. Rev. B 33, 7841  
(1986); J. Stat. Phys. 44, 985 (1986)
- 2.81 G. Parisi, F. Rapuano, Phys. Lett. 157 B, 391 (1985)
- 2.82 A. Hoogland, A. Compagner, H.W.J. Blöte, Physica 132A,  
457 (1985)
- 2.83 K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B 21, 1941 (1980)
- 2.84 D.P. Landau, Phys. Rev. B 27, 5604 (1983)
- 2.85 S. Krinsky, D. Mukamel, Phys. Rev. B 16, 2313 (1977)
- 2.86 R.H. Swendsen, S. Krinsky, Phys. Rev. Lett. 43, 177 (1979)
- 2.87 J. Oitmaa, J. Phys. A 14, 1159 (1981)
- 2.88 M.P. Nightingale, Phys. Lett. A 59, 436 (1977)
- 2.89 M. Nauenberg, B. Nienhuis, Phys. Rev. Lett. 33, 944 (1974)
- 2.90 M.N. Barber, W. Selke, J. Phys. A 15, L617 (1982)
- 2.91 S. Miyashita, H. Takano, Prog. Theor. Phys. 73, 1122 (1985)
- 2.92 S. Wansleben, D.P. Landau, J. Appl. Phys. 61, 3953 (1987),  
and to be published
- 2.93 Z. Racz, Phys. Rev. B 13, 263 (1976);  
M.E. Fisher, Z. Racz, Phys. Rev. B 13, 5039 (1976)
- 2.94 R. Kretschmer, K. Binder, D. Stauffer, J. Stat. Phys. 15  
267 (1976)
- 2.95 K. Binder, Z. Phys. B 45, 61 (1981)
- 2.96 关于粗化转变的评述, 见 J.D. Weeks, In *Ordering in Strongly  
Fluctuating Condensed Matter Systems*, ed. by T. Riste  
(Plenum, New York 1980) p. 293
- 2.97 关于一级相变的一个一般性的评述, 见 K. Binder, Rep. Prog.  
Phys. 50, 783 (1987)
- 2.98 Y. Imry, Phys. Rev. B 21, 2042 (1980)

- 2.99 M.E. Fisher, A.N. Berker, Phys. Rev. B 26, 2507 (1982)
- 2.100 H.W.J. Blöte, M.P. Nightingale, Physica A 112, 405 (1982);  
J.L. Cardy, M.P. Nightingale, Phys. Rev. B 27, 4256(1983);  
P.Kleban, C.-K. Hu, Bull. Am. Phys. Soc. 27, 92 (A)(1982)
- 2.101 V. Privman, M.E. Fisher, J. Stat. Phys. 33, 385 (1983)
- 2.102 K. Binder, D.P. Landau, Phys. Rev. B 30, 1477 (1984)
- 2.103 M.E. Fisher, V. Privman, Phys. Rev. B 32, 447 (1985)
- 2.104 M.S.S. Challa, D.P. Landau, K. Binder, Phys. Rev. B 34,  
1841 (1986)  
对[2.104]中有关权重 $\alpha_i$ 的一个错误的更正, 见 C. Borgs, R. Kote-  
cky, J. stat.Phys. 61, 7390)
- 2.105 C.N. Yang, Phys. Rev. 85, 508 (1951)
- 2.106 R.B. Potts, Proc. Cambridge Philos. Soc. 43, 106 (1952);  
对它的评述见 F.Y. Wu, Rev. Mod. Phys. 54, 235 (1982)
- 2.107 T. Kihara, Y. Midzuno, T. Shizume, J. Phys. Soc. Jpn. 9,  
681 (1954);  
R.J. Baxter, J. Phys. C 6, L445 (1973)

### 第 3 章

- 3.1 *Transputer Reference Manual* (Inmos Ltd., Bristol 1986)
- 3.2 *Transputer Development System* (Inmos Ltd., Bristol 1986)
- 3.3 K. Bowler, A.D. Bruce, R.D. Kenway, G.S. Pawley, D.J.  
Wallace, Phys. Today 10, 40 (1987)
- 3.4 *Occam Programming Language* (Prentice-Hall, Englewood  
Cliffs, NJ 1984)
- 3.5 R. Steinmetz, *Occam 2* (Huthig Verlag, Heidelberg 1987)
- 3.6 G..Jones, *Programming in OCCAM* (Prentice-Hall, Engle-  
wood Cliffs, NJ 1987)
- 3.7 K.C. Bowler, R.D. Kenway, G.S. Pawley, D. Roweth,  
*Occam 2 Programming Language* (Prentice-Hall, Englewood  
Cliffs, NJ 1984)
- 3.8 W. Paul, D. W. Heermann, R. C. Desai, Mainz Preprint  
87/47 (1987)

- 3.9 R.C. Desai, D.W. Heermann, K. Binder, Mainz Preprint 87/44 (1987)
- 3.10 W. Paul, D.W. Heermann, R.C. Desai, Mainz Preprint 87/46 (1987)
- 3.11 D. Knuth, *The Art of Computer Programming*, Vol. 2 (Addison-Wesley, Reading, MA 1969)
- 3.12 D.W. Heermann, *Computer Simulation Methods in Theoretical Physics* (Springer, Berlin, Heidelberg 1986)
- 3.13 M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Clarendon, Oxford 1987)
- 3.14 M.H. Kalos, P.A. Whitlock, *Monte Carlo Methods*, Vol. 1 (Wiley, New York 1986)
- 3.15 J.H. Ahrens, U. Dieter, *Pseudo Random Numbers* (Wiley, New York) in preparation
- 3.16 D.H. Lehmer, In Proc. 2nd Symp. on Large-Scale Digital Computing Machinery, Vol. 142 (Harvard University Press, Cambridge, MA 1961)
- 3.17 A. Milchev, K. Binder, D.W. Heermann, Z. Phys. B 63, 521 (1986)
- 3.18 H.E. Stanley, J. Stat. Phys. 36, 843 (1984)
- 3.19 L. Onsager, Phys. Rev. 65, 117 (1944)

## 附 录

- A.1 J. Hoshen, R. Kopelman, Phys. Rev. B 14, 3438 (1976)
- A.2 J. Kertesz, Private communication



## 补充文献

近五年(1987--1992)来,蒙特卡罗模拟方法在许多方面都有进一步的发展。下面列出一些有关的出版物,它们是本教程内容的补充,以向读者提供有关最新文献的初步指南。当然,这里只能给出有限的文献,其选择带有一些主观性。

### 减弱慢化现象(集团算法,多栅蒙特卡罗方法等)

- Edwards R.G., J. Goodman, A.D. Sokal; Multigrid MC: Two-dimensional XY model. Nucl. Phys. V 354, 289 (1991)
- Janke W.; Test of single cluster update for the three-dimensional XY model. Phys. Lett. A 148, 356 (1990)
- Goodman J., A.D. Sokal; Multigrid MC for lattice field theory. Phys. Rev. Lett. 56, 1915 (1986)
- Goodman J., A.D. Sokal; Multigrid MC method: Conceptual foundations. Phys. Rev. D 40, 2633 (1989)
- Hasenbusch M., S. Meyer; Cluster update acceleration of interface roughening in the 3d Ising model. Phys. Rev. Lett. 66, 530 (1991)
- Kandel D., E. Domany, A. Brandt; Simulations without critical slowing down; Ising and three state Potts models. Phys. Rev. B 40, 333 (1989)
- Sokal A.D.; *Monte Carlo Methods in Statistical Mechanics; Foundations and New Algorithms* (Cours de Troisième Cycle en Suisse Romande, Lausanne 1989)
- Swendsen R.H., J.S. Wang; Nonuniversal critical dynamics in MC simulations. Phys. Rev. Lett. 58, 86 (1987)
- Swendsen R. H., J.S. Wang, A.M. Ferrenberg; New MC methods for improved efficiency of computer simulations in statistical

cal mechanics, in *The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*, ed. by K. Binder, Topics Appl. Phys., Vol.71(Springer, Berlin, Heidelberg 1992) Chap.4

Wolff U., Lattice field theory as percolation process, Phys. Rev. Lett. 60, 1461 (1988)

Wolff U., Collective MC updating for spin systems, Phys. Rev. Lett. 62, 361 (1989)

## 蒙特卡罗方法与分子动力学混合算法，傅里叶加速法等

Batrounis G.G., G.R. Kalz, A.S. Kornfeld, G. P. Lepage, B. Svetitsky, K. G. Wilson, Langevin simulations of lattices field theories, Phys. Rev. D 32, 273 (1985)

Duane S., Stochastic quantization versus the microcanonical ensemble, Getting the best of both worlds, Nucl. Phys. B 257, 652 (1985)

Duane S., A.D. Kennedy, B. J. Pendleton, D. Roweth, Hybrid MC, Phys. Lett. B 195, 216 (1987)

Mehlig B., D. W. Heermann, B.M. Forrest, Hybrid MC for condensed matter systems, Phys. Rev. B 45, 679 (1992)

## 直方图分析

Deutsch H. P., Optimized analysis of the critical behavior in polymer mixtures from MC simulations, J. Stat. Phys. 67, 1039 (1992)

Ferrenberg A.M., R. H. Swendsen, New MC technique for studying phase transitions, Phys. Rev. Lett. 61, 2635 (1988)

Ferrenberg A.M., R.H. Swendsen, Optimized MC data analysis, Phys. Rev. Lett. 63, 1195 (1989)

Swendsen R.H., A.M. Ferrenberg, Histogram methods for MC data analysis, in *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics II*, ed. by D.P. Landau, K.K. Mon, H.B. Schuttler, Springer Proc. Phys., Vol.45 (Springer, Berlin, Heidelberg 1990) p.179

## 有限尺寸标度

- Binder K., J.S. Wang, Finite size effects at critical points with anisotropic correlations, Phenomenological scaling theory and MC simulations. J. Stat. Phys. 55, 87 (1989)
- Binder K., H.P. Deutsch, Crossover phenomena and finite size scaling analysis of numerical simulations. Europhys.Lett. 18, 667 (1992)
- Binder K., Phase transitions in reduced geometry. Ann. Rev. Phys. Chem. 43 (1992) in press
- Borgs C., R. Koticky, A rigorous theory of finite size scaling at first order phase transitions. J. Stat. Phys. 61, 79 (1990)
- Borgs C., R. Koticky, S. Miracle-Sole, Finite size scaling for Potts models. J. Stat. Phys. 62, 529 (1990)
- Chen K., D.P. Landau, Finite size effects on the first-order phase transition of the Heisenberg model. preprint
- Ferrenberg A.M., D. P. Landau, K. Binder, Statistical and systematic errors in MC sampling. J. Stat. Phys. 63, 867 (1991)
- Gelfand M.P., M.E. Fisher, Finite size effects in fluid interfaces. Physica A 166, 1 (1990)
- Leung K.-T., Finite size scaling at critical points with spatial anisotropies. Int'l J. Mod. C, in press
- Privman V. (ed.) : *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems* (World Scientific, Singapore 1990)
- Privman V, Finite size scaling, New results. Physica A 177, 241 (1991)

## 应用

蒙特卡罗方法的新应用多得无法列举。我们只向读者介绍几本新出版的及即将出版的综合书籍：

Binder K. (ed.) : *The Monte Carlo Method in Condensed Matter*

- Physics*, Topics Appl. Phys., Vol.71 (Springer, Berlin, Heidelberg 1992)
- Landau D. P., K.K. Mon, H.-B. Schüttler; *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics IV*, Springer Proc. Phys., Vol.72 (Springer, Berlin, Heidelberg 1992)
- Landau D.P., K.K. Mon, H. -B. Schüttler; *Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics V*, Springer Proc. Phys., Vol.75 (Springer, Berlin, Heidelberg 1993)

# 索引

(按汉语拼音方案顺序排列)

- ANNI模型 32,67  
半无穷系统 33,36  
薄膜 33,36  
比热容 69,77  
边条件 32,33  
    螺旋~ 135  
    斜周期性~ 33,33,135  
    周期性~ 32,33,47,63,127  
    自由~ 33,47  
遍历 37,  
    ~时间 54,61,68  
标度  
    ~定律 48  
    ~函数 48,63,133  
Boltzmann 分布 121  
超标度 70  
成核现象 36  
弛豫  
    ~函数 42  
    ~时间 31  
    非线性~函数 44  
    内禀~时间 61,67  
    时移~函数 41  
重正化 63  
重正化耦合常数 58  
抽样  
    简单~ 6,3,16,17,43,91  
    偏倚~ 88,116  
    重要性~ 6,21,36,88,119  
畴 69  
川崎恭二 又见自旋反转 25,136  
磁化率 46,56,80  
    逾渗~ 46  
磁化强度 80  
    自发~ 31,53  
粗化转变 70  
大分子 10  
 $\delta$ 函数奇异性 72  
递归算法 110  
点格动物 114  
动力学解释 36,41  
对称性破缺 61  
    造成~的场 61  
Einstein定律 99  
反铁磁体 32,65  
 $\phi^4$ 模型 27,59,64  
分维 48  
分子动力学 41  
概率分布 53  
高温级数展开 66  
格子 25  
各向同性自旋系统 54  
Glauber 又见自旋反转 25,30,122,135  
观测时间 54

合金 41  
 Heisenberg 模型 6,25  
 Ising 模型 6,20,24,25,28,57,120  
 集团 44,109,141  
   ~的大小分布 48  
   跨越~ 49,110  
   无穷大~ 44  
 极限维数 70  
 计算机  
   并行~ 68  
   向量~ 30,68  
   专用~ 58  
 界面 136  
 界面张力 56  
 近邻表 100  
 纠缠 28  
 扩散 11,36,41,115  
   旋转~ 54  
 扩散受限聚集 36,99  
 Lennard-Jones 势 137  
 列表法 31  
 临界  
   ~幅度 55,61  
   ~慢化 44  
 收缩转变 13  
 累积量  
   ~交点方法 58  
   四阶~ 58,67,132  
 Markov  
   ~过程 36  
   ~链 22,120  
 Metropolis函数 121  
 蒙特卡罗  
   ~步(MCS) 22,30,36,68,122  
   ~重正化群 58,65  
 配分函数 11  
 平均 又见自平均  
   非平衡态的~ 40  
   热~ 15  
   时间~ 59  
   系综~ 39  
 平均场 70  
 破缺对称性 51  
 Potts模型 82,136  
 棋盘算法 30,135  
 潜热 76  
 缺陷 83  
 热长度 70  
 热力学极限 52,57  
 Rouse 模型 28  
 蠕行 26,27,107  
 扫描 122  
 生长现象 39  
 守恒定律 25,136  
 树 110  
 数据并合 63  
 数值积分 8  
 随机数  
   ~的关联 97  
   ~发生器 9,34,94,96  
   伪~ 9,23,29,45,60  
 随机行走 13,18  
   不退行~ 10,99  
   带偏向的~ 19  
   自回避~ 10,102,116,137



体斥相互作用 11,13,15

统计

~权重 8,11,37

~无效度 43

~误差 41

无穷势 37

误差 41

相对~ 80

XY 模型 6,9,25,58,65,113

细致平衡 22,37

系综

初始态的~ 25

巨正则~ 25

微正则~ 25

正则~ 20,25

相关

时移~函数 38

~长度 32,48,70

~时间 30

相变 20,32,44,51

相变点 131

相空间 8,20,27,37

序参量 44,53,59,63

方均根~ 54

损耗问题 13

跃迁概率 22,29,120

跃迁矩阵

有限尺寸

~标度 49,93,150,134

对~标度的改正 63,67

~效应 25,38,44,110,130

渗透 19,44,107,141

动态~ 115

键~ 45,52,115

连续区~ 116

~概率 46

~阈值 107

座~ 107

座键~ 115

择优表面座点选取 35

指数 13,51,63,70

终端点 11

主宰方程 36

子系统 57

自回避随机行走 又见随机行走

~电~ 119

生长~ 119

自平均 77,134

缺乏~ 18,78

强~ 18,79

弱~ 82

自旋玻璃 36,53,58,70

自旋反转

单个~ 24,28,122,135

交换~ 24,31