计算物理第十二次作业报告

曾郅琛 PB20071431

摘要： 本次作业为理论推导部分，解决以下问题“ **推导正方格子点阵上键逾渗的重整化群变换表达式** $p' = R(p)$**，求临界点**p_c**与临界指数**ν**，与正确值（表1.6.1.3-1）相比较**”，通过重整化群的方法以及不动点求解的思路，对二维正方点阵键逾渗临界浓度、临界指数进行定量计算，并与理论值相比照。最后在此基础上进行更为“美妙”的对称性分析得到同样结论。

1 重整化群（Renormalization Group）

在理论物理中，**重整化群**（**renormalization group**）是一个在不同长度标度下考察物理系统变化的数学工具。

标度上的变化称为“标度变换”。重整化群与“标度不变性”和“共形不变性”的关系较为紧密。共形不变性包含了标度变换，它们都与自相似有关。在重整化理论中，系统在某一个标度上自相似于一个更小的标度，但描述它们组成的参量值不相同。

在利用重整化群方法解决临界现象问题中，我们利用标度变换方法，将格子点阵区域分成小块元胞，每个元胞最初尺度为a，我们接着对体系的长度尺度连续变换$a' = ba$，其中b为放大因子；最终当迭代很多次后，重整化群变换将趋向于一个不动点上的数，也就是我们求得临界点p_c.

2 正方格点键逾渗计算

2.1 正方格点重整化

与教材上座逾渗描述不同，在推导键逾渗过程中不再以格子导通为目标，而是在某一方向上看是否有键构型使得导通连接。对于正方格点而言，键逾渗的元胞重整化如下图所示：

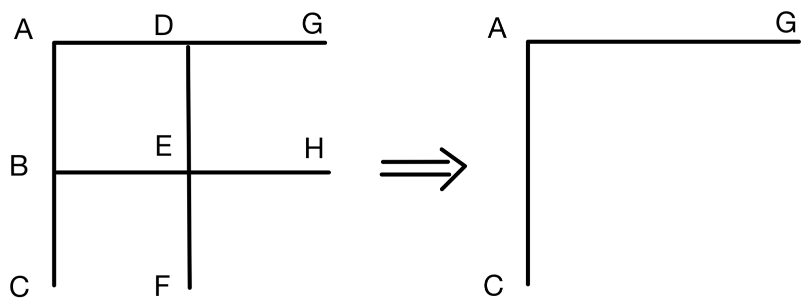

图1：正方格子键逾渗重整化

我们首先找到一个正方格子的最小周期性单元，最初我选择用1×1的小正方格点去描述最小元胞，然而发现，在选用如此的最小单元时，在平移过程中边也就是我们题目中的键会相互重叠，产生很多冗余的边，故而使得问题变得很复杂。

于是，我们考虑如图1所示的结构——选用正方格子的两条邻边作为周期单元，图1显示了正方格点重整化的过程，其中放大因子表示为：

$$b = N^{1/d} = 4^{1/2} = 2$$

2.2 临界点p_c的分析计算

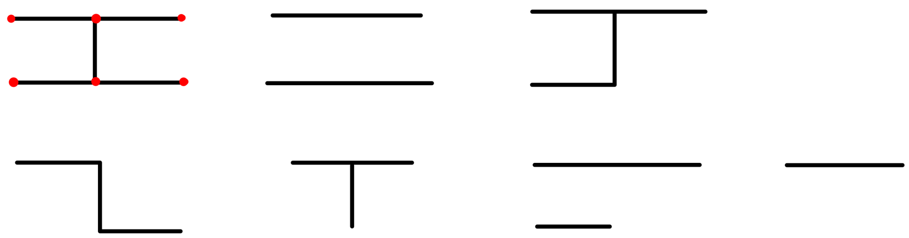

图2：正方格子键逾渗导通条件

接下来我们通过分析在重整化后导通的条件，即左右通过键导通。如上图2所示，展示了每种导通的代表情况，设每根键导通的概率为p，则有：

$$p' = R(p) = p^5 + p^4(1-p) + 4p^4(1-p) + 2p^3(1-p)^2 + 2p^3(1-p)^2 + 4p^3(1-p)^2 + 2p^2(1-p)^3$$

即：

$$R(p) = p^5 + 5p^4(1-p) + 8p^3(1-p)^2 + 2p^2(1-p)^3 = 2p^5 - 5p^4 + 2p^3 + 2p^2$$

利用不动点解法有：

$$R(p^*) = 2p^{*5} - 5p^{*4} + 2p^{*3} + 2p^{*2} = p^*$$

解得p^*的三个不动点：

$$p^* = 0 \ or \ 1 \ or \ 0.5$$

通过分析可得，$p^* = 0 \ or \ 1$为两个平凡解，而$p^* = 0.5$才为我们所求的临界值点$p_c = 0.5$.

与所给理论值$p_c = 0.5$对比，两者结果完全一致，证明了该重整化方法的合理性。

2.3 临界指数ν的分析计算

重整化过程中为了保持标度律不变，选择重整化后的关联长度$\xi' = \frac{\xi}{b}$。在接近p_c时，有

$$\xi(p) = |p - p_c|^{-\nu}$$

故有

$$|p' - p_c|^{-\nu} = \frac{1}{b}|p - p_c|^{-\nu}$$

在p_c附近，做Taylor展开保留一级近似有：

$$p' - p_c = R(p) - R(p_c) = \lambda(p - p_c)$$

其中：

$$\lambda = \frac{dR(p)}{dp}|_{p=p_c} = 1.625$$

进一步推导得到：

$$|p' - p_c|^{-\nu} = \lambda^{-\nu}|p - p_c|^{-\nu}$$
$$b = \lambda^{\nu}$$
$$\Rightarrow \nu = \frac{ln(b)}{ln(\lambda)}$$

由2.2中计算得到的临界值$p_c = 0.5$得：

$$\nu = \frac{ln2}{ln(1.625)} \approx 1.428$$

与理论值$\nu = 4/3 \approx 1.333$，相比近似程度很高，在经过此重整化方法近似计算后非常接近。

2.4 讨论

同时，虽然对于$b = 2$的简单计算，已经可以得到近似程度相当好的结果了。

但是，对于这样的元胞，其边界效应不可忽略，这就影响了计算的精度。这是因为，这个方法中假定元胞的占据态与其他元胞无关，这个假定对原始格子点阵是成立的，但是即使进行一次重整化群变换，也有可能破坏原来的占据态连接路径，原来是连接的变成是不连接的，或不连接的成为连接的，该边界效应对于大的元胞尺度来说影响要小，因此取大的 b 值可以改善计算结果。

3 其他分析

另外，通过调研发现我们可以考虑从对称性的角度尝试去定性分析此问题。

我们可以通过下面的论证来证明这一点。

- 首先通过在现有格上所有方格的中间放置点来建立另一个格子点(见图3(a))，并在新格子点上尚未被旧键隔开的每对相邻点之间架起一根键(见图3(b))。通过这种方式，我们产生了一个新的渗透系统，它基于一个与旧的网格完全相同的大小和形状，白色的互补格点可能导通的概率为：

$$q = 1 - p$$

  其中p为原始晶格导通的概率。

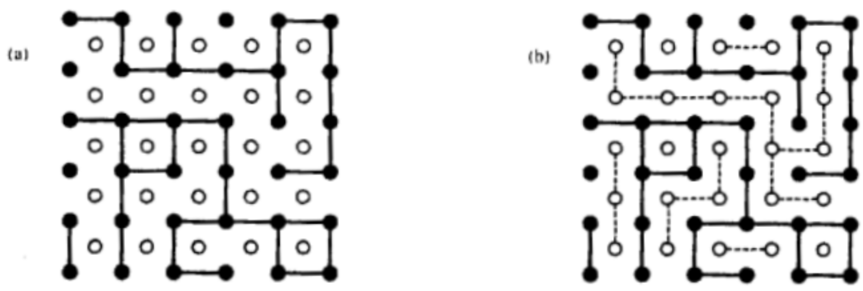

图3：正方格子键逾渗“互补格点”

- 现在，如果原来的渗透系统高于它的渗透阈值$p > p^*$，因此存在一个无限大小的连接点集群(在无限晶格上)，那么新的系统一定低于它的渗透阈值；不可能有一条路径从新晶格的一边一直延伸到另一边，因为这样的路径必须在某个地方穿过旧晶格上的无限簇，而这是我们用来在新晶格上放置键的规则所禁止的。相反，如果我们不知道原来系统的状态，但我们知道新系统低于渗透阈值，我们可以立即得出结论，旧系统一定高于它的阈值——旧晶格上一定有一个无限大的簇，以阻止新晶格上的点连接形成一个无限大的簇。因此：

$$p > p^* \iff q < q^*$$

- 同理，反过来，如果新系统高于其渗透阈值，则旧系统必须低于其渗透阈值，反之亦然:

$$q > q^* \iff p < p^*$$

- 从这两种关系可以得出结论:当一个系统处于渗流阈值时，另一个系统也一定处于渗流阈值。

$$q^* = 1 - p^*$$

- 但由于新体系与旧体系相同，其渗流阈值必然相同$q^* = p^*$，因此可以得到$p^* = 0.5$.

在此情况下我们可以通过对称性分析得到最终临界点值，但并没有办法得到ν的近似结果。但仍不失为一个好的分析方法。

4 参考文献

【1】Hisao Nakanishi, Peter J. Reynolds, Site-bond percolation by position-space renormalization group, *Physics Letters A*, 1979, Pages 252-254

【2】P J Reynolds, H E Stanley, and W Klein, A real-space renormalization group for site and bond percolation, *J. Phys. C: Solid State Phys.* 1977, 10 L167

【3】Moshe Schwartz, Shmuel Fishman, Real space renormalization group study of the random bond Ising model, *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 1980, Pages 115-125

【4】Dr. Kim Christensen, Percolation Theory, Blackett Laboratory, October 9, 2002

【5】J.J. Binney, N.J. Dowrick, A.J. Fisher, and M.E.J. Newman. The Theory of Critical Phenomena. Oxford University Press, 1993.