

问题描述

本项目旨在使用 Monte Carlo 模拟研究二维 Potts 模型在具有周期性边界条件的 $N \times N$ 正方格点上的相变行为. q 态 Potts 模型的 Hamiltonian 量定义为:

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta_{\sigma_i \sigma_j} - h \sum_i \sigma_i, \quad \sigma_i \in \{1, 2, \dots, q\}, \quad (1)$$

其中 $J = 1$, $k_B = 1$. 对于 $q = 3$ 和 $q = 10$, 我们研究以下内容:

1. 计算并绘制内能 u 和比热 c 随温度 T 的变化曲线. 并确定相变的临界温度 T^* .
2. 计算并绘制不同温度 T 下磁化强度 m 随外场 h 的变化曲线.
3. 研究空间关联函数 $C(i, j)$ 和关联长度 ξ 随温度 T 的变化关系.
4. 在假设标度律的前提下, 研究比热 c 和关联长度 ξ 在临界温度 T^* 附近的行为.

观测量

- 内能: 每格点的内能计算公式为:

$$u = \frac{U}{N^2}, \quad U = \langle H \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} H(\sigma) e^{-\beta H(\sigma)} \quad (2)$$

- 比热: 每格点的比热计算公式为:

$$c = \frac{C}{N^2}, \quad C = k_B \beta^2 \text{Var}(H) \quad (3)$$

- 磁化强度: 每格点的磁化强度计算公式为:

$$m = \frac{M}{N^2}, \quad M = \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle \quad (4)$$

- 关联长度: 关联长度 ξ 通过空间关联函数 $C(i, j)$ 定义为:

$$C(i, j) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \quad (5)$$

- $\Gamma(k)$ 的近似计算公式为:

$$\Gamma(k) \approx \frac{1}{4N^2} \sum_i \sum_{j \in S_i} C(i, j) \quad (6)$$

其中 $S_i = \{j | i - j = \pm(k, 0) \text{ 或 } \pm(0, k)\}$

临界标度律

在临界温度 T^* 附近, 物理量的标度行为为:

$$c \sim c_0 \epsilon^{-\gamma}, \quad \xi \sim \xi_0 \epsilon^{-\delta}, \quad \epsilon = |1 - T/T^*| \quad (7)$$

我们通过数值拟合确定 γ 和 δ .

关键实现步骤

Monte Carlo 模拟

我们采用 Swendsen Wang 算法模拟 Potts 模型的采样过程, 具体步骤如下:

1. 随机初始化格点状态, 令 $\sigma_i \in \{1, 2, \dots, q\}$.
2. 对于相邻同状态的两个格点, 以概率 $1 - e^{-2\beta J}$ 生成 bond.
3. 使用并查集算法识别以 bond 为边的连通分支.
4. 对每个连通分支以概率 $P(\sigma) \propto e^{\beta h \sigma}$ 更新到新状态.
5. 重复上述过程, 直到系统达到平衡并计算观测量.

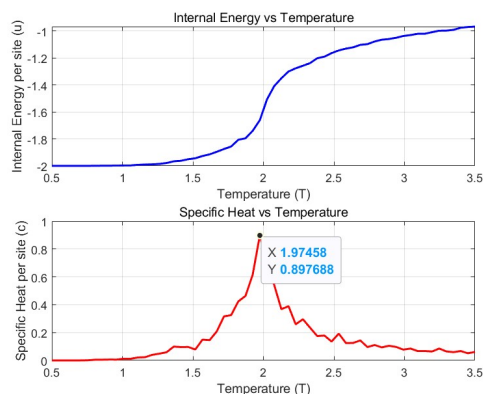
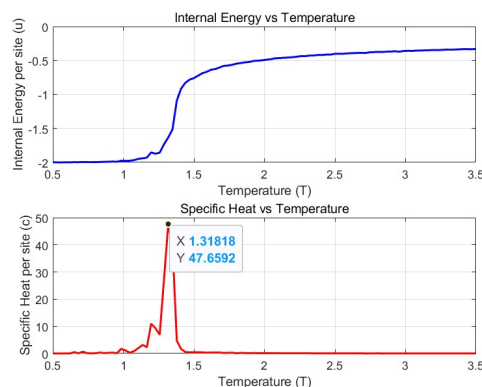
实现过程中意识到的问题

1. 做 (a) 问时一开始采样过程采取的是 single flip 算法, 即每次变化一个格点的状态, 但发现这采样过程太慢系统很难平衡, 于是采用了 Swendsen Wang 算法, 即 cluster flip 算法大幅加快了采样过程.
2. 做 (a) 问时观察到在温度 T 较小时, 比热 c 异常地大, 后来发现需要先对初始状态进行“预热”, 即先使用 S-W 算法采样几十次后再使用采样结果, 这样会大幅降低对初值地依赖性, 比如温度较低时, 随机取一个初值, 它实际出现的概率是很低的, 不可直接使用.

数值结果及分析

(a) 内能, 比热, 相变温度 T^*

我们针对 $q = 3$ 和 $q = 10$, 使用 Swendsen-Wang 算法采样并算均值计算了内能 u 和比热 c 在不同温度下的变化关系. 下图展示了 u 和 c 随温度 T 的变化曲线.

图 1: $q = 3$ 图 2: $q = 10$

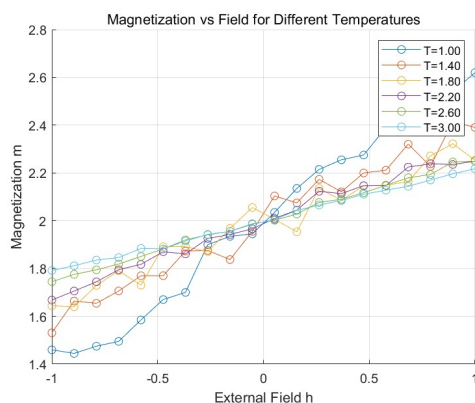
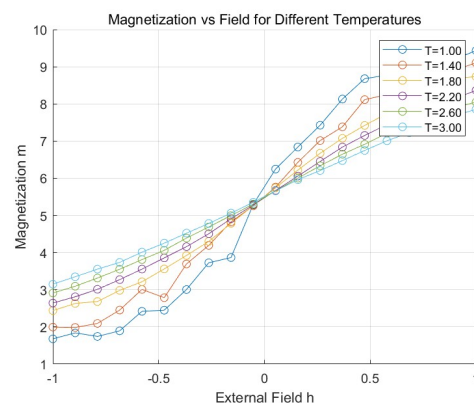
可以看到内能 u 在中间一小段温度内开始陡增, 证明这里出现了相变.

比热 c 的数学表达式是 Hamiltonian 量的方差, 其表示的是 Hamiltonian 量的变化剧烈程度, 在温度较低时模型趋向与待在稳定态, 所以比热会较低, 温度较高时, 模型趋向于随机在各个状态间跳动, 此时比热也不会很高, 但在相变温度附近时, 模型趋向于在稳态与活跃态之间跳转, 此时模型有在两个极端来回徘徊的趋势, 所以方差会比较大, 对应的比热也会比较大. 故比热 c 的最大值点可以认为是相变温度.

最后算得 $q = 3$ 时, 相变温度为 $1.97 \sim 1.99$, $q = 10$ 时, 相变温度为 $1.31 \sim 1.34$.

(b) 磁化强度

同第一问使用 Swendsen-Wang 算法采样并取均值, 此时由于外场强度 h 不是 0, 所以每次更新时需考虑以不同概率更新到各个状态(关键步骤里已提), 下面是磁化强度 m 随外场 h 在不同温度下的变化曲线, 结果如下图所示.

图 3: $q = 3$ 图 4: $q = 10$

可以看到随着外场强度增大, 磁化强度也随之增大, 并且随着温度 T 升高, 磁化强度对外场 h 的敏感性降低, 这与理论预期一致.

并且通过取 $h = 0$ 可以看到 $q = 3$ 时磁化强度均为 2, $q = 10$ 时磁化强度均为 5.5, 这刚好是所有状态的均值, 这是因为在外场 $h = 0$ 时所有状态出现的概率是均等的, 由此可以进一步佐证结果的正确性.

(c) 关联长度

针对 $h = 0$, 相关函数 $\Gamma(k)$ 表示的是固定温度下距离为 k 的所有格点的关联性, 假如两个格点独立, 则可通过公式知道它们的关联函数为 0. 于是相关函数 $\Gamma(k)$ 越大表示距离为 k 的点的关联性越高.

在温度低于相变温度时, 模型状态趋于稳态, 所有格点趋于相同, 此时无论距离 k 是多少, $\Gamma(k)$ 都比较大, 并且与 k 的关系不大. 此时 $\Gamma(k)$ 主要在一个常数附近波动, 很难用指数函数进行拟合, 如左图.

当温度高于相变温度时, 此时格点比较活跃, 在距离 k 比较大时, 两个格点几乎没有关联, 所以此时 $\Gamma(k)$ 会趋于 0, 此时 $\Gamma(k)$ 随 k 有随指数函数递减的趋势, 可以较好地被指数函数拟合, 如右图.

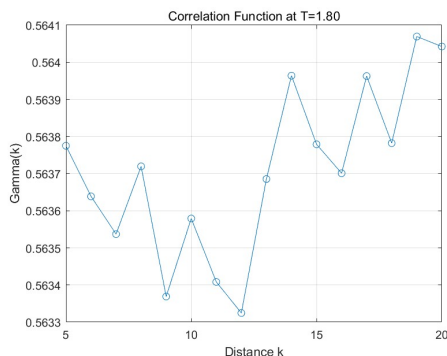


图 5: $q = 3, T = 1.80 < T^*$

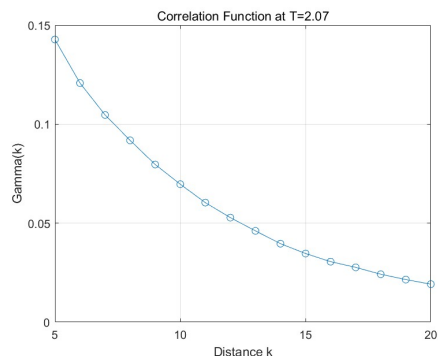


图 6: $q = 3, T = 2.07 > T^*$

所以我们仅对温度 T 大于相变温度 T^* 的情况, 对 $\Gamma(k)$ 用指数函数拟合. 此时拟合得到关联长度 ξ 随 T 的变化如下

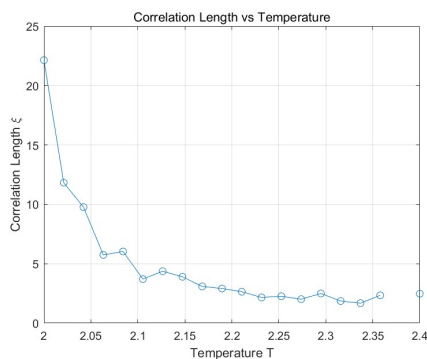


图 7: $q = 3$

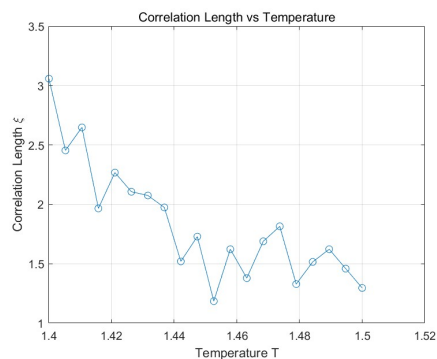
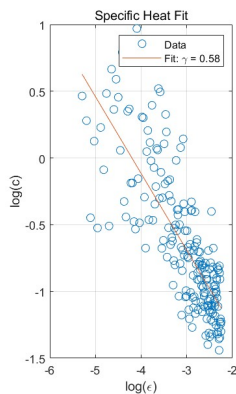
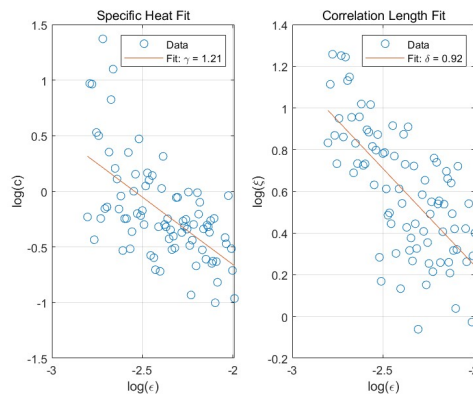


图 8: $q = 10$

(d) 临界行为

取 $q = 3$ 的相变温度为 1.99, $q = 10$ 的相变温度为 1.32, 温度 T 在 $[T^*, T^* + 0.2]$ 区间均匀分布, 画出的双对数图如下

图 9: $q = 3$ 图 10: $q = 10$

可以看到画出的点确实是可以被比较好地线性拟合的. 此时计算出的 $q = 3$ 的指数为:

$$\gamma \approx 0.58, \quad \delta \approx 0.81 \quad (8)$$

$q = 10$ 的指数为:

$$\gamma \approx 1.21, \quad \delta \approx 0.92 \quad (9)$$

结论

通过蒙特卡罗模拟, 我们研究了二维Potts模型的相变行为, 主要结论如下:

- 通过比热峰值确定了临界温度 T^* .
- 观察到磁化强度随 h 和 T 的变化规律.
- 计算了相关函数 $\Gamma(k)$ 并用指数函数拟合.
- 在 T^* 右侧, 关联长度 ξ 递减.
- 验证了标度律, 并数值确定了指数 γ 和 δ .