Binder ratio, cumulant 以及模型对称性

郭文安

October 17, 2018

我们考虑模拟的模型的序参量$\mathbf{m}$是n元矢量. $n = 1$对应Ising 磁化强度，$n = 2$你可以设想是XY模型，$n = 3$对应Heisenberg模型或O(3)模型. 但这样的序参量并不限于这个几个模型，比如钟表模型(clock model)其序参量是$n = 2$的矢量。4态Potts模型序参量可以看作3元矢量.

在蒙卡模拟中我们经常用到的无量纲量(dimensionless quantity)是4阶Binder ratio

$$R_2 = \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2}. \tag{1}$$

其中$\mathbf{m}$是序参量. $m^2 = \mathbf{m} \cdot \mathbf{m}$. 有时也用二阶Binder ratio

$$R_1 = \frac{\langle m^2 \rangle}{\langle |m| \rangle^2}. \tag{2}$$

在模拟量子模型的时候，由于序参量几个分量不对易，有的算法不方便计算$\mathbf{m}$, 此时我们可以计算某个分量的Binder ratio. 比如

$$R_2^{(z)} = \frac{\langle m_z^4 \rangle}{\langle m_z^2 \rangle^2}. \tag{3}$$

在相变点T_c, R_2 (以及R_1)是与尺寸无关的常数（忽略正比于$L^{-\omega_i}$的标度修正, 其中$\omega_i > 0, i = 1, 2, \ldots$，当$L \to \infty$时这些修正项消失). 利用这一特性我们可以定出相变点，甚至临界指数ν. 这一常数R_{2C} (R_{1C})也是普适的，由相变普适类决定，前提是要固定边界条件，包括系统长宽比之类的。

在高温无序相和低温有序相，序参量的分布几率分别是两种不同的高斯分布. 据此我们可以直接算出

$$R_2 \to \frac{n+2}{n}, \text{当处于无序相} T > T_c,\ L \to \infty \tag{4}$$

$$R_2 \to 1, \text{当系统处于有序相},\ L \to \infty \tag{5}$$

因此我们可以定义所谓的Binder cumulant（累积量）

$$U_2 = \frac{n+2}{2}\left(1 - \frac{n}{n+2}R_2\right) \tag{6}$$

它有很好的性质：当$T > T_c$, U_2随尺寸趋于0；$T < T_c$, U_2随尺寸趋于1. Figure 1是$n = 1$的Ising情形.

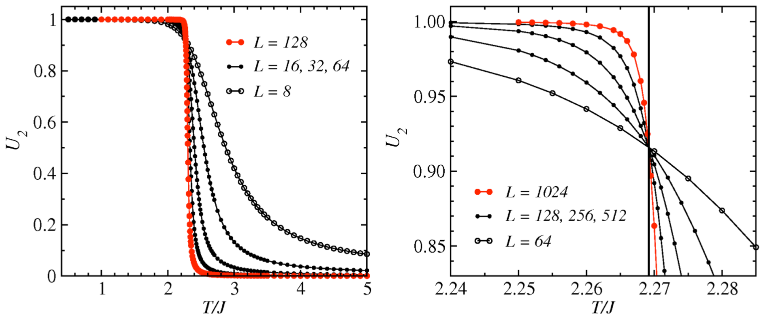

Figure 1: U_2 of 2D Ising model, $n = 1$.

我们来证明Eq. (4).

考虑到高温相$\mathbf{m}$在原点附近涨落

$$p(m_1, m_2, \ldots, m_n) = \frac{\prod_i^n \exp(-\lambda m_i^2)}{N} = \prod_i^n p(m_i) \tag{7}$$

其中归一化因子

$$N = \prod_i^n \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda m_i^2) \mathrm{d}m_i. \tag{8}$$

即：每个分量是独立的高斯分布，中心在$m_i = 0$:

$$p(m_i) = \frac{\exp(-\lambda m_i^2)}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda m_i^2) dm_i}. \tag{9}$$

因此

$$\langle m^2 \rangle = \sum_i \int_{-\infty}^{\infty} m_i^2 p(m_i) \mathrm{d}m_i. \tag{10}$$

利用高斯积分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\lambda x^2) dx = \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}}, \tag{11}$$

和

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\lambda x^2) dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda^3}}, \tag{12}$$

得到

$$\langle m^2 \rangle = \frac{n}{2\lambda}. \tag{13}$$

再来计算$\langle m^4 \rangle$.

$$\langle m^4 \rangle = \sum_{ij} \langle m_i^2 m_j^2 \rangle = n\langle m_i^4 \rangle + n(n-1)\langle m_i^2 m_{j\neq i}^2 \rangle. \tag{14}$$

利用

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 \exp(-\lambda x^2) dx = \frac{3}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\lambda^5}}, \tag{15}$$

得到

$$\langle m^4 \rangle = (3n + n^2 - n)\frac{1}{4\lambda^2}. \tag{16}$$

因此

$$R_2 = \frac{n+2}{n}. \tag{17}$$

再来证明Eq.(5).

尽管我们假设序参量是n维矢量，但模型的对称性可以不同. 然而我们会看到在低温相Binder ratio “看不到”这些.

比如：假设模型Hamiltonian是O(n)的. 那么在低温相序参量不为零，且分布仍然是O(n)对称的（对Ising来说是$\pm m_0$两个点)：$\mathbf{m}$的分布与角度无关，其极大值出现在某个$m_0 \neq 0$的球面上. 这是由于我们模拟的是有限尺寸系统，系统对称性并不真正破缺到某个方向.

对角度积分之后的几率分布为

$$p(m)dm = \frac{m^{n-1}\exp(-\lambda(m-m_0)^2)dm}{N} \tag{18}$$

with

$$N = \int_0^{\infty} dm m^{n-1} \exp(-\lambda(m-m_0)^2) \tag{19}$$

在尺寸$L \to \infty$时，可以认为$\lambda \to \infty$,分布就是'厚度为零的球面'分布：

$$p(m) = \delta(m - m_0). \tag{20}$$

于是$\langle m^4 \rangle = m_0^4, \langle m^2 \rangle = m_0^2$. 所以$R_2 = 1$. Figure 2 (a)就是XY 模型序参量的分布图。

以上结果也可硬算出来。

$$\langle m^2 \rangle = \frac{\int_0^\infty m^{n+1} \exp(-\lambda(m - m_0)^2) dm}{N} \tag{21}$$

把m写成$m = (m - m_0 + m_0)$，对m的积分变成对$m - m_0$的积分。由于$\lambda \to \infty$, 积分限可以认为是从负无穷到正无穷。展开$((m - m_0) + m_0)^{n+1}$, 积分. 只有最后一项m_0^{n+1}最重要，与分母中m_0^{n-1}项相约后，得到m_0^2.

$\langle m^4 \rangle$的结果可以类似得到.

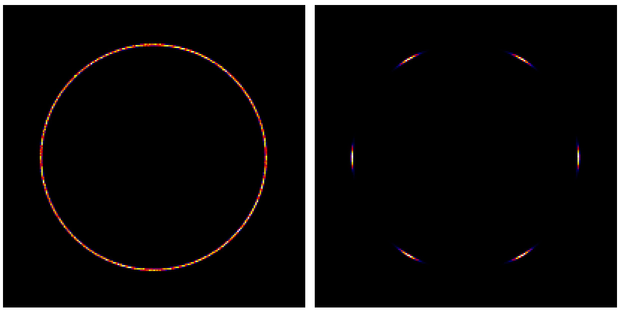

Figure 2: (a) 3D XY模型，$T = 1.5$, $L = 32$ $\mathbf{m}$的分布；(b) 3D XY model 加$q = 6$的各向异性场，同样温度, 尺寸。

如果模型并不是O(n)的, 比如是具有Z_q对称性的‘软’钟表模型(soft clock)

$$H = -J \sum_{<ij>} \cos(\theta_i - \theta_j) - h \sum_k \cos(q\theta_k) \tag{22}$$

其中自旋是二维单位矢量, θ_i是其指向。

在低温下, 其序参量不为零, 分布是如图2(b)所示的Z_q对称分布. 可以写成如下

$$p(\mathbf{m}) = \frac{1}{q} \sum_i^q \delta(\mathbf{m} - \mathbf{m}_i). \tag{23}$$

容易算出$\langle m^2 \rangle = |m_i|^2 = m_0^2, \langle m^4 \rangle = m_0^4$, 因此$U_2 = 1$.

如果我们研究的是q态Potts model, q个自旋状态可以理解为指向$q-1$维空间中超四面体的q个对称方向。比如$q=2$时，该‘四面体’是一维空间中的两个端点；$q=3$, ‘四面体’是2维空间中正三角形，3个自旋状态是从原点指向它的三个顶点（原点在三角形中心); $q=4$，‘四面体’是3维空间中的正四面体，自旋可以指向其4个顶点（原点在中心）. 如图3所示.

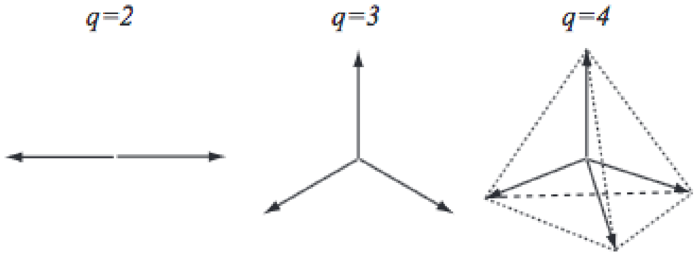

Figure 3: Potts model 中自旋可看作$q-1$维空间中单位矢量.

利用这个矢量图像，Potts 模型的哈密顿可以写成

$$H=\sum_{ij}\frac{1}{q}(1+(q-1)\mathbf{e}_i^{(\alpha)}\cdot\mathbf{e}_j^{(\beta)}) \tag{24}$$

其中$\mathbf{e}^{(\alpha)}, \alpha=1,2,\ldots,q$是$q$个单位矢量，指向超四面体顶角。容易证明

$$\mathbf{e}^{(\alpha)}\cdot\mathbf{e}^{(\beta)}=(q\delta_{\alpha,\beta}-1)/(q-1). \tag{25}$$

通常Potts model的序参量平方定义为

$$m^2=\frac{1}{q-1}\sum_{\alpha=1}^{q-1}\sum_{\beta=\alpha+1}^{q}(\rho_\alpha-\rho_\beta)^2 \tag{26}$$

ρ_i是处于α态的自旋密度。其实就等于

$$m^2=\mathbf{m}\cdot\mathbf{m}=(\sum_\alpha\rho_\alpha\mathbf{e}^{(\alpha)})^2 \tag{27}$$

序参量本身是$n=q-1$维矢量。

根据前面的讨论，我们知道在高温相，$R_2\to(q+1)/(q-1)$; 在低温相，$\mathbf{m}$不为零，其分布应该是‘超四面体’顶点处的δ函数。所以$R_2\to 1$. 如图4. U_2可以改写为

$$U_2=\frac{q+1}{2}(1-\frac{q-1}{q+1}R_2) \tag{28}$$

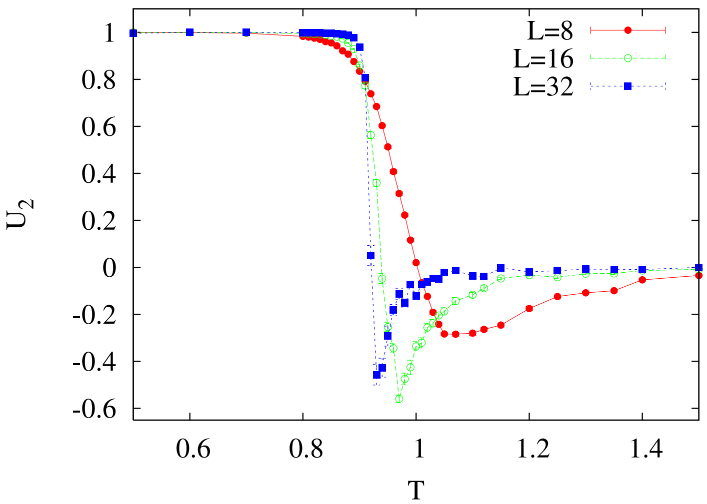

Figure 4: (a) 2D 4态Potts模型