

# 集团蒙特卡罗方法对一维量子 X-Y 模型的研究\*

季达人 应和平 陈 锋 张剑波

(浙江大学物理系浙江近代物理中心 杭州 310027)

1993-11-05 收稿

## 摘 要

本文用一种集团 Monte-Carlo 模拟方法对一维量子 X-Y 模型作了研究。在  $L = 32, 64$  和 128 的自旋点阵上和  $\beta J = 1.0-10.0$  的温度区域内, 仔细分析了该方法的动力学性质, 给出了相应的热力学量的模拟计算结果。该方法可以发展应用于格点费米子系统。

**关键词** 集团蒙特卡罗方法, 量子 X-Y 模型, 自关联时间, 格点场论。

量子 X-Y 模型早在 1956 年就曾用于研究量子流体<sup>[1]</sup>, 随后, 由于低维磁系统的实验和应用方面的进展, 进一步引起了人们的兴趣。对于一维量子 X-Y 模型(以及与其相近的 Heisenberg 铁磁或反铁磁系统), 因为有着较丰富的实验背景, 所以进行数值模拟和解析研究都是很有意义的。在数值研究中所得到的结果, 可以和解析结果作比较; 另一方面, 该数值研究中所采用的方法, 可以有效地推广到二维及更高维的系统上去。

对于量子 X-Y 模型的数值研究, 已有的工作并不很多。J. J. Cullen 和 D. P. Landau 用小 Trotter 数  $m$  的 Suzuki-Trotter 变换<sup>[2]</sup>, 曾经作过很好的研究<sup>[3]</sup>, 取得了一系列成果。但是, 在低温区遇到了迭代效率低的问题, 与准确解偏离较大。对于二维 X-Y 模型, 由于对应的经典系统存在 KT 拓扑相变<sup>[4]</sup>, 最近几年有许多数值研究的工作<sup>[5, 6]</sup>, 以探索其重要的二维特性。本文所采用的是一种“块自旋”的集团 Monte-Carlo 方法, 适用于取大的 Trotter 数和对整个高-低温区的数值模拟, 并且有利于克服传统的 M. C. 模拟所存在的临界慢化问题。这种集团 M. C. 方法在量子 Heisenberg 铁磁和反铁磁系统研究上已取得成功<sup>[7]</sup>。

一个有  $N$  个格点的一维 X-Y 量子系统的哈密顿量定义为:

$$H = J \sum_{i=1}^N (S_i^z S_{i+1}^z + S_i^y S_{i+1}^y) \equiv J \sum_{i=1}^N H_i, \quad (1)$$

式中  $J$  为正值常数,  $S_i$  是定义在第  $i$  个格点上的自旋算符, 如果用 Pauli 矩阵来表示, 则有

\* 国家教委留学归国人员基金和国家自然科学基金资助。

$$S^x = \frac{1}{2} \sigma^x, \quad S^y = \frac{1}{2} \sigma^y. \quad (2)$$

由于采用周期性边界条件, 所以有:  $S_{N+1} = S_1$ .

分解哈密顿量  $H$  为两部分:

$$H = H_I + H_{II};$$

$$H_I = J \sum_{i=\text{odd}} H_i, \quad (3)$$

$$H_{II} = J \sum_{i=\text{even}} H_i.$$

于是, 按照 Suzuki-Trotter 公式, 相应的配分函数写作:

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta H)] = \lim_{m \rightarrow \infty} \text{Tr}[\exp(-\varepsilon H_I) \exp(-\varepsilon H_{II})]^m, \quad (4)$$

表 1 链生长和翻转几率

初 态		链生长方向	末 态	翻转几率
编号	组态			
1	[1, 1, 1, 1]	↑ 方向 对 角 × 方向	[-1, 1, -1, 1] [-1, 1, 1, -1] [-1, -1, 1, 1]	$P_1$ $1 - P_1$ 禁止
2	[-1, -1, -1, -1]	↑ 方向 对 角 × 方向	[1, -1, 1, -1] [1, -1, -1, 1] [1, 1, -1, -1]	$P_1$ $1 - P_1$ 禁止
3	[1, -1, 1, -1]	↑ 方向 对 角 × 方向	[-1, -1, -1, -1] [-1, -1, 1, 1] [-1, 1, 1, -1]	$P_2$ 禁止 $1 - P_2$
4	[-1, 1, -1, 1]	↑ 方向 对 角 × 方向	[1, 1, 1, 1] [1, 1, -1, -1] [1, -1, -1, 1]	$P_2$ 禁止 $1 - P_2$
5	[1, -1, -1, 1]	↑ 方向 对 角 × 方向	[-1, -1, 1, 1] [-1, -1, -1, -1] [-1, 1, -1, 1]	禁止 $1 - P_3$ $P_3$
6	[-1, 1, 1, -1]	↑ 方向 对 角 × 方向	[1, 1, -1, -1] [1, 1, 1, 1] [1, -1, 1, -1]	禁止 $1 - P_3$ $P_3$

这里  $\beta = \frac{1}{T}$  是温度的倒数, 而  $\varepsilon = \beta/m$  是欧氏“时间”方向的格距。在(4)式的各因子间都插入  $\sigma^z$  本征态  $|+1\rangle$  和  $|-1\rangle$  的完全集, 一维量子系统就映射为一个具有类 Ising 变量  $s(x, t) = \pm 1$  的  $1+1$  维经典系统。配分函数(4)的  $m$  阶近似可写为:

$$Z^{(m)} = \prod_{(x,t)} \sum_{s(x,t)=\pm 1} \exp(-S\{s(x,t)\}), \quad (5)$$

其中的  $S\{s(x,t)\}$  表示在  $1+1$  维点阵上一个阴影方格的四自旋相互作用(图1)。在图

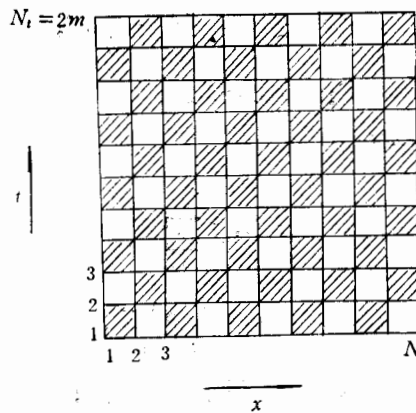


图1 元格相互作用的二维自旋系统,每个格点上定义了一个 Ising 自旋变量  $s(x,t)$

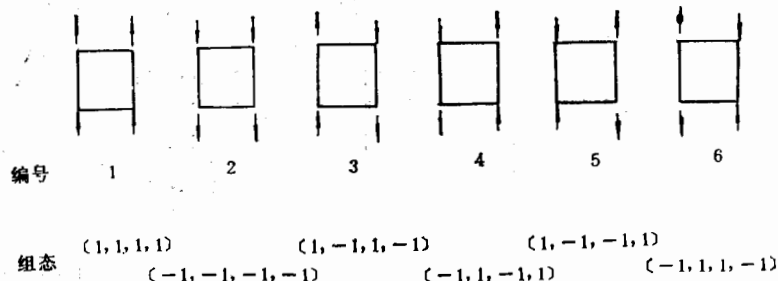


图2 六种允许的四自旋组态

2 中,列出了允许的六种四自旋组态,按照图上的标号,相应的相互作用矩阵元是:

$$\begin{aligned} T(1) &= T(2) = 1 \\ T(3) &= T(4) = \text{ch}(\varepsilon\beta J/2) \\ T(5) &= T(6) = \text{sh}(\varepsilon\beta J/2), \end{aligned} \quad (6)$$

它们就是各相应组态的权重。

现在从任意一个格点出发,在其所属的相互作用元格里构造一条“链”,它可以是沿该元格方块的  $x$  方向、 $t$  方向或者是对角线的方向。如果翻转该链两端的自旋,该元格上就生成了一个新的组态。这种翻转的几率可以由细致平衡条件求得。根据表 1 所列,相应的归一化几率为:

$$\begin{aligned} P_1 &= [1 + \exp(-\varepsilon\beta J/2)]/2 \\ P_2 &= [1 + \exp(-\varepsilon\beta J/2)]/[ \exp(\varepsilon\beta J/2) + \exp(-\varepsilon\beta J/2) ] \\ P_3 &= [ \exp(\varepsilon\beta J/2) - 1 ]/[ \exp(\varepsilon\beta J/2) + \exp(-\varepsilon\beta J/2) ]. \end{aligned} \quad (7)$$

在具体实施集团 M. C. 迭代的时候,其基本思想来自 Wolff-Swendsen-Wang 的算法<sup>[4]</sup>。从随机选取的某一点  $(x,t)$  出发,如果  $s(x,t) = +1$ ,在它所属的“时间”增加方向的相互作用元格中以相应几率选取一链;如果  $s(x,t) = -1$ ,则在相应较早“时间”的相互作用元格中取链。而后,以该链的另一端点作为新的起点,继续生长下一条链,直到形

成一个链的闭合圈,也就是回到初始出发点为止。最后,集体翻转该闭合圈上所有格点的自旋,即原来自旋为+1的改为-1,-1的改为+1,这就构成了一个新的系统自旋组态,以作 M. C. 抽样。

如果  $E_j^{(m)}$  是在  $m$  取定值之下,由第  $j$  个系统组态得到的能量,那么

$$Z^{(m)} = \sum_j \exp(-\beta E_j^{(m)}), \quad (8)$$

而  $m$  阶近似的平均能量为:

$$E^{(m)} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z^{(m)} = \frac{1}{Z^{(m)}} \sum_j E_j^{(m)} \exp(-\beta E_j^{(m)}) = \langle F^{(m)} \rangle, \quad (9)$$

这里  $\langle \dots \rangle$  指 M. C. 平均,而且

$$F_j^{(m)} = \frac{\partial}{\partial \beta} (\beta E_j^{(m)}). \quad (10)$$

对于比热,则有

$$c^{(m)} = -\beta^2 \frac{\partial E^{(m)}}{\partial \beta} = \beta^2 [\langle F^{(m)2} \rangle - \langle F^{(m)} \rangle^2]; \quad (11)$$

其中

$$G_j^{(m)} = \frac{\partial}{\partial \beta} F_j^{(m)}. \quad (12)$$

关于均匀磁化率  $\chi_u$  和参差磁化率  $\chi_s$  的公式是

$$\chi^{(m)} = \beta [\langle M^{(m)2} \rangle - \langle M^{(m)} \rangle^2], \quad (13)$$

对于均匀磁化率  $\chi_u$ , 上式中第  $j$  个组态的磁矩为:

$$M_j^{(m)} = \frac{1}{2m} \left[ \sum_i \sum_x s(x, i) \right]_j \quad (14)$$

而对参差磁化率  $\chi_s$ , 相应地有:

$$[M_j^{(m)}]_s = \frac{1}{2m} \left[ \sum_i \sum_x (-1)^{i+x} s(x, i) \right]_j \quad (15)$$

M.C. 模拟是在  $L = 32, 64$  和  $128$  的点阵上进行的,而在“时间”方向,  $N_t$  的取值总是保证  $\varepsilon = \beta/m = 2\beta/N_t < 0.1$ , 以控制由此引起的系统误差小于 1%。  $\beta$  的取值在  $1.0 \sim 10.0$  区间内,对于  $L = 32$  和  $L = 64$ , 各取 12 个  $\beta$  值来进行计算,对  $L = 128$ , 则取了

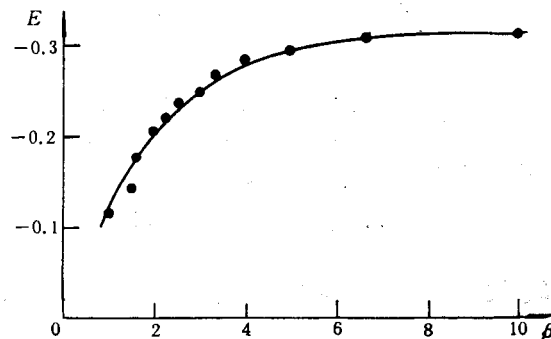


图 3 一维量子 X-Y 模型( $L = 64$ ) 的能量  $E$  随  $\beta$  变化(图上实线为准确解<sup>[9])</sup>)

比热峰值附近的五个  $\beta$  值,作数据对比.每个数据点都经过 10000 次“预热”和 40000 次 M. C. 取样测量. 计算结果发现,对于各可观测量的测量结果,在保证  $\epsilon < 0.1$  的条件下,都不随  $L$  和  $N_t$  的改变而有明显的变化. 在图 3 至图 5 里,画出了在  $L = 64$  时,能量  $E$ 、比热  $c$  和均匀磁化率  $\chi_u$  随  $\beta$  变化的情形,并且和 S. Katsura 的准确解结果<sup>[9]</sup>作了比较,两者符合得相当好.

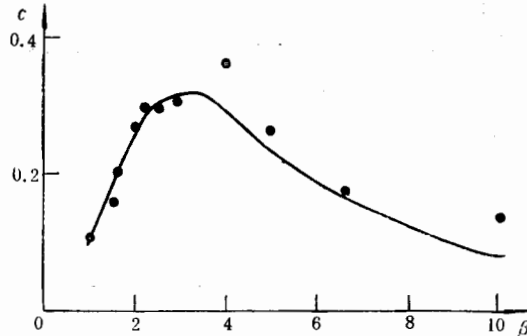


图 4 一维量子 X-Y 模型( $L = 64$ )的比热  $c$  随  $\beta$  变化(图上实线为准确解<sup>[9]</sup>)

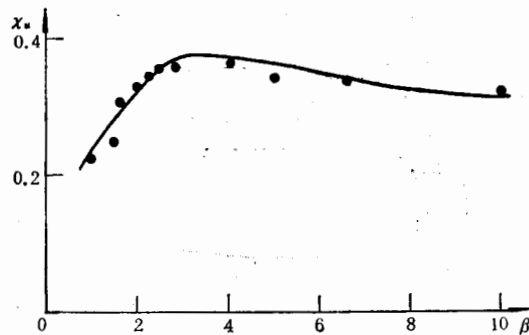


图 5 一维量子 X-Y 模型( $L = 64$ ) 的均匀磁化率  $\chi_u$  随  $\beta$  变化(图上实线为准确解<sup>[9]</sup>)

更感兴趣的是检验这种闭合圈集团算法的有效性. 为此,对能量  $E$  和参差磁化率  $\chi_s$  的自关联时间作了计算和分析. 首先,测量该可观测量  $O$  的自关联函数  $C_0(t)$ :

$$C_0(t) = \langle O(t_0) \cdot O(t_0 + t) \rangle, \quad (16)$$

然后,可以得到

$$\exp(-1/\tau_0^2) = \frac{\sum_{t=1}^{\infty} C_0(t)}{\sum_{t=0}^{\infty} C_0(t)}. \quad (17)$$

考虑到每次 M. C. 测量相应的闭合圈大小不一,所以最后得到的指数自关联时间  $\tau_0$  是

$$\tau_0 = \tau_0^L \times \text{闭合圈大小} / (L \times 2m), \quad (18)$$

计算结果列于表 2.

动力学临界指数  $Z_0$  可以由  $\tau_0 \propto 1/\epsilon^{Z_0}$  取  $\epsilon \rightarrow 0$  的连续极限而确定,根据数值模拟结果,可以得出(图 6):

$$Z_e = 0.2(1), \quad Z_{\chi_s} = 0.0(1). \quad (19)$$

另一方面,在  $\epsilon = \text{const}$  的条件下,根据

表 2 自关联时间的计算结果

T	2m	$\tau_c$		$\tau_{x_s}$	
		L = 32	L = 64	L = 32	L = 64
0.10	256	2.00(10)	2.18(10)	0.34(3)	0.35(3)
0.15	192	2.05(10)	1.84(09)	0.30(2)	0.29(2)
0.20	128	2.14(10)	2.14(10)	0.32(2)	0.30(2)
0.25	128	2.24(11)	1.74(09)	0.27(2)	0.32(2)
0.30	128	2.19(10)	1.62(09)	0.26(2)	0.27(2)
0.35	96	1.82(09)	1.55(08)	0.28(2)	0.32(2)
0.40	64	1.87(09)	1.62(09)	0.25(2)	0.29(2)
0.45	64	2.01(10)	1.72(09)	0.26(2)	0.30(2)
0.50	64	2.00(10)	1.67(09)	0.27(2)	0.28(2)
0.60	64	1.62(08)	1.66(09)	0.25(2)	0.25(2)
0.80	64	1.74(09)	1.72(09)	0.24(2)	0.26(2)
1.00	64	1.57(08)	1.54(08)	0.26(2)	0.25(2)

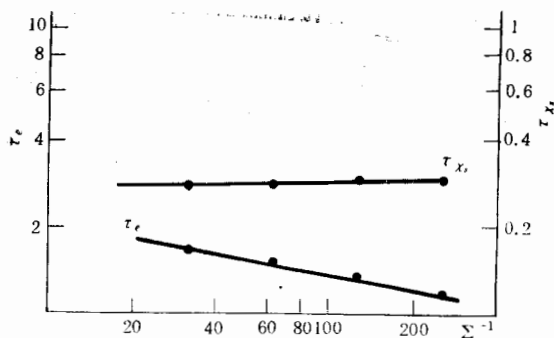


图 6 在  $\beta J = 2, L = 64$  时得到的自关联时间  $\tau_{x_s}$  关于  $\varepsilon^{-1}$  的双对数关系得到的基态能量估计值是

$$\tau_{x_s} \propto \exp(c\beta J) \quad (20)$$

得到 (图 7)

$$c = 0.1(1). \quad (21)$$

这些数据表明, 临界慢化的困难在很大程度上得以克服, 从而使得在低温区的模拟计算(此时需要用大的 Trotter 数)可以进行。

最后, 我们还作了基态能量的估计。根据  $\beta = 10$  时不同的 Trotter 数  $m$  下计算的能量值, 按

$$E_\infty = E_m + A/m^2 + B/m^4 \quad (22)$$

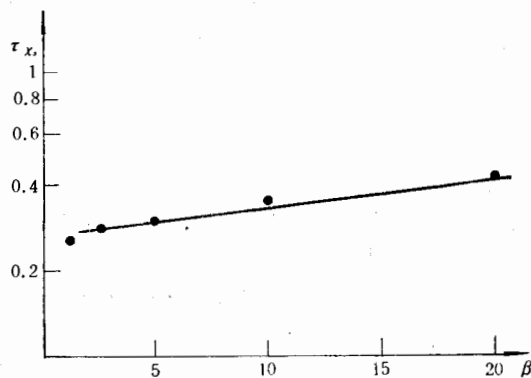


图 7 对  $L = 64$ , 保持  $\varepsilon = \beta/m = 0.078$  为恒定的条件下, 自关联时间  $\tau_{x_s}$  对于  $\beta$  的关系

$$E_{\infty} = \begin{cases} -0.3125(10) & (L = 32) \\ -0.3118(10) & (L = 64). \end{cases} \quad (23)$$

上述的方法描述和计算结果表明,它可以取先前的算法难以实现的大 Trotter 数并达到如此的低温区,从而有效地提高了计算效率和结果的准确度,得到了满意的结果。这种算法在计算机上的实现并不困难,稍加扩充就可以发展来进行二维或更高维的 X-Y 模型的数值模拟。对于二维量子 X-Y 模型的闭合圈集团 M.C. 算法的模拟研究工作也已完成,将另文发表。此方法也可发展应用于格点费米子系统<sup>[10]</sup>。

本文主要的计算工作是在浙江大学浙江近代物理中心 (ZIMP) 的计算机上完成的。

### 参 考 文 献

- [1] T. Matsubara, K. Matsuda, *Prog. Theor. Phys.*, **16**(1956) 569; **17**(1957) 19.
- [2] M. Suzuki, *J. Stat. Phys.*, **43**(1986) 833.
- [3] J. J. Cullen, D. P. Landau, *Phys. Rev.*, **B27**(1983) 297.
- [4] J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless, *J. Phys.*, **C6**(1973) 1181;  
J. M. Kosterlitz, *ibid.*, **C7**(1974) 1046.
- [5] H. De Readt et al., *Phys. Lett.*, **A104**(1984) 430; *Z. Phys.*, **B57**(1984) 209; E. Loh et al., *Phys. Rev.*, **B31**(1985) 4712.
- [6] Y. Okabe, M. Kikuchi, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **57**(1988) 4351; H. Q. Ding, M. S. Makivic, *Phys. Rev.*, **B42**(1990) 6827.
- [7] U. J. Wiese, H. P. Ying, *Phys. Lett.*, **A168**(1992) 143; H. P. Ying, D. R. Ji, *Comm. Theor. Phys.*, **21**(1994) 421; 应和平、季达人, *物理学报*, **42**(1993) 1845; 应和平、U. J. Wiese, *物理学报*, **42**(1993) 1684.
- [8] U. Wolff, *Phys. Rev. Lett.*, **62**(1989) 361; R. Swendsen, J. S. Wang, *Phys. Rev. Lett.*, **58**(1987) 86.
- [9] S. Katsura, *Phys. Rev.*, **B127**(1962) 1508.
- [10] U. J. Wiese, Bern Preprint BUTP-92/45.

## Cluster Monte-Carlo Algorithm for the Study of Quantum X-Y Model

Ji Daren    Ying Heping    Chen Feng    Zhang Jianbo  
(Zhejiang Institute of Modern Physics, Department  
of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027)

Received 5 November 1993

### Abstract

A Monte-Carlo study for the one-dimensional quantum X-Y model by cluster algorithm is presented. For lattices of  $L = 32, 64$  and  $128$  and at  $\beta J = 1.0-10.0$  temperature region, the dynamical properties are analysed carefully and the corresponding thermodynamical quantities are computed. This method may be developed to apply for the lattice fermion systems.

**Key words** cluster monte-carlo method, quantum X-Y model, integrated autocorrelation time, lattice field theory.