

Centered-triangular 晶格上渗流模型

付喆

(新乡学院 物理与电子工程学院,河南 新乡 453003)

摘要:渗流模型一直是相变与临界现象的研究热点.由于其有着广泛的应用而有重要的研究价值.利用数值转移矩阵和有限尺寸标度分析相结合的方法研究了 centered-triangular 晶格上的棒渗流和点渗流,得到了相应的临界阈值和临界性质.

关键词:点渗流;棒渗流;转移矩阵

中图分类号:O414.2

文献标志码:A

渗流分为点渗流和棒渗流.因其相变具有连续相变的普遍特性且应用广泛——可应用于自旋量子霍尔效应^[1],复杂网络上传染病的传播^[2],森林火灾^[3]等问题,一直以来受到广泛关注.渗流阈值一直是统计物理中的热点问题.虽然棒渗流和点渗流属于同一普适类,但对于同一晶格而言,其上的棒渗流阈值和点渗流阈值是不同的.

本文利用数值转移矩阵和有限尺寸标度分析相结合的方法研究了 centered-triangular 晶格(见图 1)上的点渗流和棒渗流,得到了相应阈值的数值结果和临界性质.

1 点渗流

1.1 Centered-triangular 晶格上点渗流阈值的精确解

目前,只有少数二维晶格上的渗流阈值可以被精确求解,其中包括三角晶格上的点渗流^[4-5],其阈值的精确解为 $p_c = 1/2$.

Centered-triangular 晶格(图 1 中实线构成的晶格)是通过在三角晶格的晶面上放点得到的.这些点的引入,并不会增加或减少三角晶格上点渗流的导通性,因而 centered-triangular 晶格上点渗流阈值的精确解也应为 $p_c^s = 1/2$.

1.2 Centered-triangular 晶格上点渗流的数值研究

Centered-triangular 晶格上点渗流模型的配分函数

$Z = \sum p^{N_s} (1-p)^{N-N_s}$, 其中 p 代表晶格上格点被占据的概率, $1-p$ 代表格点不被占据的概率; N 是总格点数; N_s 和 $N - N_s$ 分别代表被占据和不被占据的格点数; 求和号代表对所有可能的位型进行求和. 考虑尺寸为 $L \times M$ 的有限大系统, 在 L 方向上满足周期性边界条件, 在 M 方向上满足自由边界条件.

将每一行的起始位置称为接口, 则所有行对应接口的连接情况可以反映系统的位型. 用一组整数按照一

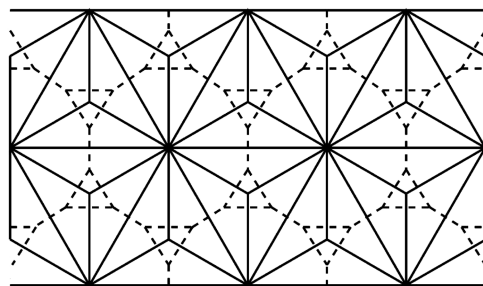


图 1 实线构成的晶格为 centered-triangular 晶格, 虚线构成的晶格为 3-12 晶格

收稿日期:2018-06-20;修回日期:2018-08-21.

基金项目:国家自然科学基金(11447154);河南省科技攻关项目(182102310884);河南省第九批重点学科(2018119);河南省教育厅科学技术研究重点项目(15B150010;18B430012);新乡学院博士科研启动基金(1366020020).

作者简介(通信作者):付喆(1985-),女,吉林德惠人,新乡学院讲师,博士,研究方向为统计物理,E-mail:dancingzhe@163.com.

定的规则代表一个接口的连接情况,并将与不同连接情况相对应的整数组进行排序就是编码.相同规则下,也可由整数组对应的序号知道接口的连接情况,此为解码.本文采用的编解码规则与文献[6]一致.

现将 $L \times M$ 系统的最上面一层接口的连接情况用 β (由系统位型决定) 表示,则配分函数可表示为 $Z^M = \sum_{\beta} Z_{\beta}^M$, 其中, Z_{β}^M 只对接口处连接情况编码为 β 的位型进行求和,称为部分配分函数, M 表示系统一共有 M 行. Z_{α}^{M+1} 和 Z_{β}^M 可由转移矩阵 T 按照下面的形式联系在一起, $Z_{\alpha}^{M+1} = \sum_{\beta} T_{\alpha,\beta} Z_{\beta}^M$, 其中, $T_{\alpha,\beta} = \sum_g p^{\Delta N_s(g)} (1-p)^{\Delta(N(g)-N_s(g))}$ 表示对能够在第 M 行接口的编码为 β 的情况下,使第 $M+1$ 行接口编码为 α 的那些第 $M+1$ 行的位型进行求和, $T_{\alpha,\beta}$ 是 T 的矩阵元.转移矩阵可视为将系统增加一行.为了减少计算时所占用的内存和计算时间,将转移矩阵分解,用稀疏矩阵的乘积表示,具体过程如下.

1) 稀疏矩阵 T_1 的操作如图 2(a-b) 所示.将切点的位置进行 $i \rightarrow i-1$ 轮换,然后在标记为 1 和 L 的格点上加一个如图 2(f) 所示的结构(增加了 2 个格点),形成具有 $L+1$ 个格点的新子行.

2) 稀疏矩阵 T_2 的操作如图 2(c) 所示,将切点的位置进行 $i \rightarrow i-1$ 轮换,然后在标记为 1, $L, L+1$ 的格点上加一个如图 2(g) 所示的结构(增加了 3 个格点).依次进行 $L-2$ 次这样的操作,形成具有 $L+1$ 个格点的新子行,如图 2(d) 所示.

3) 稀疏矩阵 T_3 的操作如图 2(e) 所示,将切点的位置进行 $i \rightarrow i-2$ 轮换,然后在标记为 1, $L-1, L, L+1$ 的格点上添加如图 2(h) 所示的结构(增加了 4 个格点).形成有 L 个格点的新子行.

转移矩阵 $T = T_3 \cdot T_2^{L-2} \cdot T_1$, 稀疏矩阵 T_1, T_2, T_3 是非零元数量极少且容易确定的矩阵,易于存储,大大减少了对内存和计算时间的需求.

为了求 centered-triangular 晶格上点渗流的临界阈值,计算磁标度隙 $X_h(L) = \frac{L}{2\pi\xi_h(L)}$, 其中 $\xi_h^{-1}(L) = \zeta \ln \frac{\lambda}{\lambda'}$ 是系统的磁关联长度. ζ 是转移矩阵使系统新增加那一行中一个单元的宽和高之比. λ 和 λ' 分别是 Z 和 Z' 所对应的转移矩阵的最大本征值,其中配分函数 $Z' = \sum_G p^{N_s} (1-p)^{N-N_s}$ 是对那些至少含有一个能从第 1 行延伸到第 r 行的集团的位型求和.将 Z 和 Z' 所对应的转移矩阵分别称为非磁转移矩阵和磁转移矩阵.

X_h 和 ξ_h 是与格点的占据概率和系统尺寸有关的函数.根据共形理论^[7] 和有限尺寸标度^[8], 磁标度隙 $X_h(p, L) = X_h + atL^{y_t} + buL^{y_u} + \dots$, 其中 X_h 代表磁标度维数, $t = p - p_c$ 代表对临界点的偏离, y_t 和 y_u 分别代表重整化指数和非重整化指数, u 代表非重整化指数, a, b 是待定常数.将连续尺寸下系统的磁标度隙代入有限尺寸标度方程 $X_h(p, L) = X_h(p, L-1)$, 其解可表示为 $p_c(L) = p_c + a'uL^{y_u - y_t} + \dots$, a' 是待定常数.因 $y_t > 0$ 且 $y_u < 0$, 随着系统尺寸连续增大, $p_c(L)$ 收敛于临界点 p_c 处.在 $p_c(L)$ 处, $X_h(p_c(L), L)$ 将会按照 $X_h(p_c(L), L) = X_h + b'uL^{y_u} + \dots$ 随着系统尺寸的增大收敛于磁标度维数 X_h .

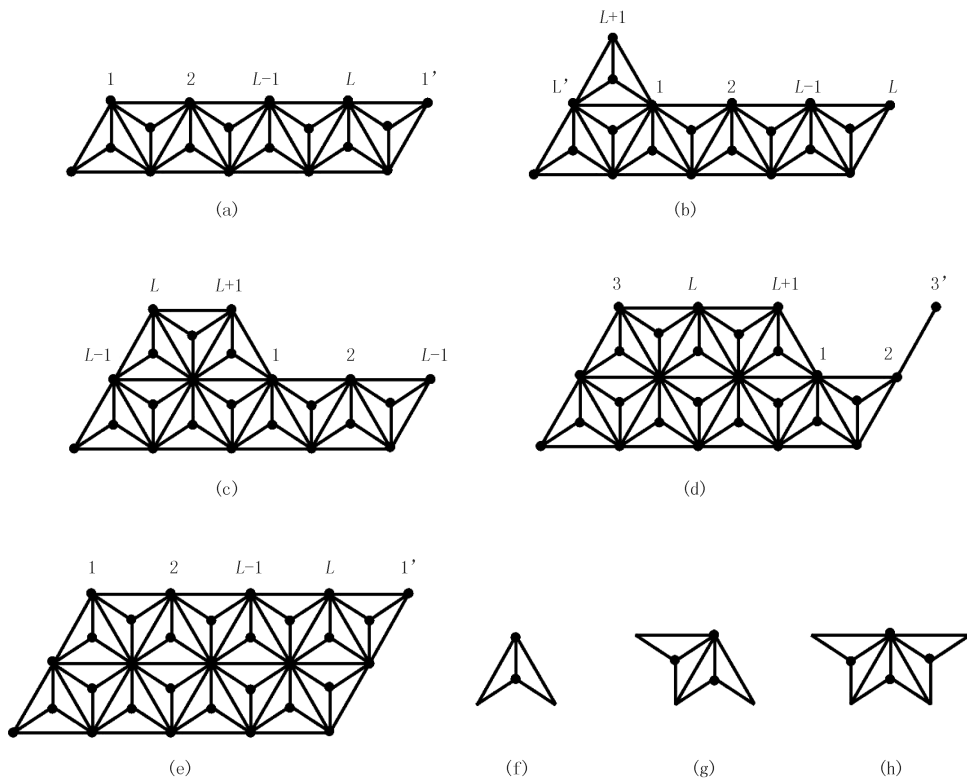
此外还计算了系统的自由能.系统的自由能密度 $f(L) = \frac{\zeta \ln \lambda_0}{L}$, 式中 λ_0 是非磁转移矩阵的最大本征值.根据共形不变理论^[9-10], 在临界点处自由能密度 $f(L)$ 和中心荷 c 之间满足关系式 $f(L) \approx f(\infty) + \frac{\pi c}{6L^2}$, 其中, $f(L)$ 和 $f(\infty)$ 分别代表系统尺寸为 L 和趋于无穷时系统的自由能密度, c 为中心荷.根据共形不变理论和库仑气体方法^[9-13] 可求得中心荷和磁标度维数的理论值, $c = 1 - \frac{6(1-g)^2}{g}$, $X_h = 1 - \frac{g}{2} - \frac{3}{8g}$, 其中, $\sqrt{q} = -2\cos(\pi g)$, $\frac{1}{2} \leq g \leq 1$, 点渗流对应 $q = 1$.

此外还计算了系统的自由能.系统的自由能密度 $f(L) = \frac{\zeta \ln \lambda_0}{L}$, 式中 λ_0 是非磁转移矩阵的最大本征值.根据共形不变理论^[9-10], 在临界点处自由能密度 $f(L)$ 和中心荷 c 之间满足关系式 $f(L) \approx f(\infty) + \frac{\pi c}{6L^2}$, 其中, $f(L)$ 和 $f(\infty)$ 分别代表系统尺寸为 L 和趋于无穷时系统的自由能密度, c 为中心荷.根据共形不变理论和库仑气体方法^[9-13] 可求得中心荷和磁标度维数的理论值, $c = 1 - \frac{6(1-g)^2}{g}$, $X_h = 1 - \frac{g}{2} - \frac{3}{8g}$, 其中, $\sqrt{q} = -2\cos(\pi g)$, $\frac{1}{2} \leq g \leq 1$, 点渗流对应 $q = 1$.

1.3 结果与讨论

从表 1 中可以看出随着系统尺寸连续的从 $L = 4$ 增大到 $L = 12$, $p_c(L)$ 逐渐增大, 并且增大的幅度逐渐减小, 随着系统尺寸的进一步增大, 将收敛到点渗流临界点 p_c 处.拟合后得到 centered-triangular 晶格上点渗流模型临界点的数值结果 $p_c^s = 0.500\ 000(1)$, 与精确解 $p_c^s = 0.5$ 符合得很好, 精度可达 10^{-6} .磁标度隙也随着系统尺寸增大而减小, 并且减小的幅度也逐渐小, 最终收敛于磁标度维数. X_h 的数值解为 $0.104\ 17(1)$, 与

理论值 $X_h = 0.104\ 166\ 7$ 在小数点后第 5 位都是相符的. 点渗流的配分函数 $Z = \sum p^{N_s} (1-p)^{N-N_s}$ 的值为 1, 因此, 在不同系统尺寸下自由能密度都为 0, 再根据自由能与中心荷的关系, 即可拟合得出中心荷 c 的值为 0, 与理论值 0 相符.



(a-e) 为转移矩阵的分解, 分别与稀疏矩阵 T_1, T_2, T_3 相对应; (f-h) 分别是 3 个稀疏矩阵使系统增加的部分.

图 2 Centered-triangular 晶格上转移矩阵的构造

2 棒渗流

2.1 Centered-triangular 晶格上棒渗流阈值的现有结果

图 1 中实线构成的晶格为 centered-triangular 晶格, 在其晶面上放点并将这些点相连接, 可得到其对偶晶格——3-12 晶格, 如图 1 所示. 对偶晶格上棒渗流临界阈值满足 $p_c^b + p_c'^b = 1$, 其中, p_c^b 和 $p_c'^b$ 是互为对偶晶格上的棒渗流阈值. 因此可以利用 3-12 晶格上棒渗流的阈值来求得 centered-triangular 晶格上棒渗流的阈值. 3-12 晶格上棒渗流的阈值没有精确解, 因而现有的 centered-triangular 晶格上棒渗流的阈值结果都是利用对偶关系得到数值结果或猜想.

Ziff 和 Gu 得到 3-12 晶格上棒渗流阈值的数值结果为 $p_c = 0.740\ 421\ 95(80)^{[14]}$. Parviainen 利用 Ziff 和 Newman 的算法得到 3-12 晶格上棒渗流阈值的数值结果 $p_c = 0.740\ 420\ 81^{[15]}$. 丁成祥等研究了 3-12 晶格上的 Potts 模型, 得到 $q = 1$ 的 ν_c , 并利用 $p_c = \nu_c / (1 + \nu_c)$, 得到 $p_c = 0.740\ 420\ 77(2)^{[16]}$, Wu 等利用共形假设得到 3-12 晶格上棒渗流的临界流形^[4], $1 - p + p^2 + p^3 - 7p^4 + 4p^5 = 0$, 临界阈值的猜想结果为 $p_c = 0.740\ 423\ 317$.

根据以上的 3-12 晶格棒渗流阈值以及对偶关系可以得到 centered-triangular 晶格上棒渗流阈值的猜想或数值结果 (见表 2), 但其精确结果仍无法确定, 这也是数学和物理上的难题.

2.2 Centered-triangular 晶格上棒渗流的数值研究

利用数值转移矩阵和有限尺寸标度分析相结合的方法对 centered-triangular 晶格上的 Potts 模型进行

研究,得到了其在 $q = 1$ 的 u_c ,再利用 $p_c = u_c / (1 + u_c)$,得到了 centered-triangular 晶格上棒渗流阈值的数值结果,并将其与现有结果进行对比.为节省内存和减少计算时间,转移矩阵被拆分成稀疏矩阵乘积的形式,构造转移矩阵的过程与文献[17]一致.

Potts 模型配分函数的随机集团表示可以写为 $Z = \sum_G u^{b_u} q^{n_c}$,其中 G 表示系统的任一位型, $u = e^K - 1$ 是棒权重, b_u 是棒的数目, n_c 是集团的数目.配分函数 $Z' = \sum_G u^{b_u} q^{n_c}$ 是对那些至少含有一个能从第 1 行延伸到第 r 行的集团的位型求和.

磁标度隙可写为 $X_h(q, u, L) = \frac{L}{2\pi\xi_h(q, u, L)}$,其中磁关联长度 $\xi_h(q, u, L)$ 满足 $\frac{1}{\xi_h(q, u, L)} = \zeta \ln(\frac{\lambda_0}{\lambda'_0})$,式中 λ_0 和 λ'_0 分别代表 Z 和 Z' 所对应的转移矩阵的最大本征值.

根据有限尺寸标度和共形映射理论,磁标度隙可展开为 $X_h(q, u, L) = X_h(q) + atL^{y_t} + bt'L^{y'_t} + \dots$,式中 $X_h(q)$ 代表磁标度维数, t 代表对临界点的偏离, t' 代表非关涉场, y_t 代表热重整化指数, y'_t 代表最大的非关涉重整化指数, a, b 代表待定常数.将系统取连续尺寸 L 和 $L - 1$ 时的磁标度隙代入有限尺寸标度方程 $X_h(q, u, L) = X_h(q, u, L - 1)$,其解 $u_c(L)$ 可表示为 $u_c(L) = u_c + a'uL^{y'_t - y_t} + \dots$, a' 代表待定常数,且 $y'_t < 0, y_t > 0$,随着系统尺寸的增大, $u_c(L)$ 将会收敛到临界点 u_c .

在 $u_c(L)$ 处计算系统的磁标度隙 $X_h(q, u_c(L), L)$,随着系统尺寸增大,磁标度隙以 $X_h(q, u_c(L), L) = X_h(q) + b'uL^{y'_t} + \dots$ 的形式收敛到磁标度维数 $X_h(q)$,其中 b' 为待定常数,对 $X_h(q, u_c(L), L)$ 的数据进行拟合可得磁标度维数.

此外,还计算了系统的自由能,并由此得到中心荷.自由能的计算以及中心荷和磁标度维数的理论值的确定方法与前文点渗流的情况相同,这里不再赘述.

2.3 结果与讨论

利用上述方法得到了 centered-triangular 晶格上 Potts 模型 $q = 1$ 时,在不同系统尺寸下的临界点 $u_c(L)$ 和磁标度隙 $X_h(L)$,见表 2.从表 2 中可以看出, $u_c(L)$ 在小尺寸时是先增大后减小的.这是因为受到有限尺寸效应的影响,不影响结果的可靠性.在系统尺寸从 $L = 5$ 增大到 $L = 12$ 的过程中, $u_c(L)$ 随着系统尺寸的增大而减小,并且减小的幅度也逐渐减小,随着系统尺寸的增大,最后将会收敛到临界点 u_c 处.

表 1 Centered-triangular 晶格上点渗流模型在不同系统尺寸下的临界点 $p_c(L)$ 和磁标度隙 $X_h(L)$

L	$p_c(L)$	$X_h(L)$
4	0.497 269 221 505 337 755	0.107 404 243 309 267 233
5	0.497 879 047 557 017 840	0.106 904 089 311 511 949
6	0.498 580 099 888 602 524	0.106 228 828 478 599 810
7	0.499 042 092 551 001 126	0.105 721 347 946 476 821
8	0.499 330 780 752 937 797	0.105 366 690 715 598 316
9	0.499 515 517 927 897 057	0.105 116 474 416 490 094
10	0.499 638 152 434 335 125	0.104 935 360 113 804 332
11	0.499 722 497 936 776 311	0.104 800 728 597 254 700
12	0.499 782 357 165 466 262	0.104 698 203 301 708 481

表 2 Centered-triangular 晶格上棒渗流模型的临界点 $u_c(L)$ 和磁标度隙 $X_h(L)$

L	$u_c(L)$	$X_h(L)$
4	0.350 912 914 842 994 472	0.103 449 754 602 592
5	0.351 037 312 371 972 055	0.103 322 280 923 381
6	0.350 948 968 235 070 435	0.103 429 455 624 825
7	0.350 856 821 994 726 176	0.103 557 854 845 573
8	0.350 788 504 582 528 859	0.103 664 873 532 812
9	0.350 740 190 124 359 474	0.103 748 621 183 609
10	0.350 705 780 690 969 915	0.103 813 827 661 587
11	0.350 680 794 117 175 565	0.103 865 102 720 583
12	0.350 662 259 333 048 953	0.103 905 975 955 192

将连续尺寸下的 $u_c(L)$ 进行拟合,得到 $u_c = 0.350 583(1)$,再利用 $p_c = u_c / (1 + u_c)$,得到 centered-triangular 晶格上棒渗流的阈值的数值结果为 $p_c = 0.259 579(1)$ (见表 3).同样,将连续系统尺寸下的 $X_h(L)$ 进行拟合,得到磁标度维数的数值结果 $X_h = 0.104 17(1)$,与理论值 $X_h = 0.104 166 7$ 在小数点后第 5 位都是相符的.并在临界点 u_c 处计算了不同尺寸下的 $f(L)$,通过拟合得到中心荷 c 的数值结果为 0,与理论值 0 相符.

通过与现有的根据对偶关系得到的 centered-triangular 晶格上棒渗流模型的临界阈值进行比较,可以

看出,利用转移矩阵得到的数值结果与利用丁及 Parviainen 在 3-12 晶格上棒渗流阈值得到的结果符合的很好,精度可以达到小数点后第 6 位.同时磁标度维数与中心荷的数值结果也与理论值相符,通过对比可以看到棒渗流模型与点渗流模型属于同一普适类.

3 小 结

本文利用数值转移矩阵和有限尺寸标度相结合的方法,研究了 centered-triangular 晶格上的点渗流和棒渗流模型,得到了点渗流和棒渗流阈值的数值结果.其中点渗流阈值的数值结果与精确解符合的很好,精度可达小数点后前 6 位.棒渗流阈值与利用 3-12 晶格上棒渗流阈值及对偶关系得到的结果在小数点后第 6 位都是相符的.本文还计算了相应的磁标度维数和中心荷的数值结果,经对比与理论值符合很好,属于同一普适类.

表 3 Centered-triangular 晶格上棒渗流模型临界阈值的已有结果(利用对偶关系得到)和本文转移矩阵得出的数值结果

$1-p_c^b(3-12, \text{文献}[4])$	0.259 576 683
$1-p_c^b(3-12, \text{文献}[14])$	0.259 578 05(80)
$1-p_c^b(3-12, \text{文献}[15])$	0.259 579 19
$1-p_c^b(3-12, \text{文献}[16])$	0.259 579 23(2)
$p_c^b(\text{本文数值结果})$	0.259 579(1)

参 考 文 献

- [1] Gruzberg I A, Ludwig A W W, Read N. Exact exponents for the spin quantum Hall transition[J]. Physical Review Letters, 1999, 82(22): 4524-4527.
- [2] Goltsev A V, Dorogovtsev S N, Mendes J F F. Percolation on correlated networks[J]. Physical Review E, 2008, 78(5): 051105.
- [3] Henley C L. Statics of a 'self-organized' percolation model[J]. Physical Review Letters, 1993, 71(17): 2741-2744.
- [4] Wu F Y. Critical frontier of the Potts and percolation models on triangular-type and kagome-type lattices. I. Closed-form expressions[J]. Physical Review E, 2010, 81(6): 061110.
- [5] Suding P N, Ziff R M. Site percolation thresholds for Archimedean lattices[J]. Physical Review E, 1999, 60(1): 275-283.
- [6] 付喆. 数值转移矩阵方法研究 3-12 晶格上点渗流的临界性质[D]. 北京: 北京师范大学, 2010.
- [7] Cardy J L. Conformal invariance and universality in finite-size scaling[J]. Journal of Physics A, 1984, 17(7): L385.
- [8] Nightingale M P. Finite-Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems[M]. Singapore: World Scientific, 1990.
- [9] Blöte H W J, Cardy J L, Nightingale M P. Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality[J]. Physical Review Letters, 1986, 56(7): 742-745.
- [10] Affleck I. Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly[J]. Physical Review Letters, 1986, 56(7): 746-748.
- [11] Nienhuis B. Phase Transitions and Critical phenomena[M]. London: Academic, 1987.
- [12] Nijs M P M D. A relation between the temperature exponents of the eight-vertex and q-state Potts model[J]. Journal of Physics A, 1979, 12(10): 1857-1868.
- [13] Black J, Emery V J. Critical properties of two-dimensional models[J]. Physical Review B, 1981, 23(1): 429-432.
- [14] Ziff R M, Gu H. Universal condition for critical percolation thresholds of kagomé-like lattices[J]. Physical Review E, 2009, 79(2): 020102.
- [15] Parviainen R. Estimation of bond percolation thresholds on the Archimedean lattices[J]. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 2007, 40(31): 9253-9258.
- [16] Ding C, Fu Z, Guo W, et al. Critical frontier of the Potts and percolation models on triangular-type and kagome-type lattices. II. Numerical analysis[J]. Physical Review E, 2010, 81(1): 061111.
- [17] 付喆. 圈模型和反铁磁 Potts 模型的研究[D]. 北京: 北京师范大学, 2013.

The percolation model on the centered-triangular lattice

Fu Zhe

(College of Physics and Electronic Engineering, Xinxiang University, Xinxiang 453003, China)

Abstract: The percolation model has been a hot topic in the study of phase transitions and critical phenomena, and is of great significance because of its wide applications. This paper investigates the site percolation and the bond percolation on the centered-triangular lattice by means of a finite-size scaling analysis based on numerical transfer matrix calculations. The corresponding critical threshold and the critical properties are obtained.

Keywords: site percolation; bond percolation; transfer matrix

[责任编辑 陈留院]