

Санкт-Петербургский государственный университет
Физический факультет

Кафедра квантовой механики

Численное исследование предельных форм для шестивершинной модели

Бакалаврская работа

Научный руководитель:
д. ф.-м. н., профессор Шабает В. М.

Рецензент:
к. ф.-м. н., научный сотрудник Пронько А. Г.

Санкт-Петербург
2016

Оглавление

Вступление	3
1. Введение	4
1.1. Шестивершинная модель	4
1.2. Марковский процесс	6
1.2.1. Граф состояний и марковская матрица	6
1.2.2. Основная теорема о стационарных распределениях	7
2. Результаты	8
2.1. DWBC (Domain Wall Boundary Conditions)	9
2.1.1. Концентрация вершин при $\Delta = 0$	10
2.1.2. Неквадратные области	12
2.1.3. Индуцированные граничные условия на неквадрат-	
ной области	16
2.2. Более общие граничные условия	17
Заключение	22
Список литературы	23

Вступление

Шестивершинная модель отличается сильной корреляцией между своими граничными условиями и равновесным состоянием. В термодинамическом пределе на решетке возникает граница раздела, отделяющая замороженную фазу, определяемую граничными условиями, от внутренней фазы, определяемой энергетическими параметрами системы. Форма этой границы может сильно варьироваться и зависит как от граничных условий и формы решетки, так и от энергетических параметров. В некоторых случаях она представляет собой алгебраические кривые, такие как окружность и циклоида.

В работе было рассмотрено моделирование равновесных состояний шестивершинной модели при помощи марковского процесса и сравнение аналитического и численного значения концентрации вершин в точке свободных фермионов.

Также были рассмотрены предельные формы на неквадратной решетке и разработан алгоритм для построения состояний с сохранением числа путей.

1. Введение

1.1. Шестивершинная модель

Шестивершинная модель - одна из решеточных моделей статистической механики, построение которой было мотивировано структурой льда. Каждой вершине решетки сопоставляется атом кислорода, имеющий связи с четырьмя соседними атомами, на каждой из связей находится один атом водорода. Вводится правило льда (англ. "ice rule"), гласящее что к каждому атому О присоединено два атома Н. На квадратной решетке существует шесть способов удовлетворить этому правилу:

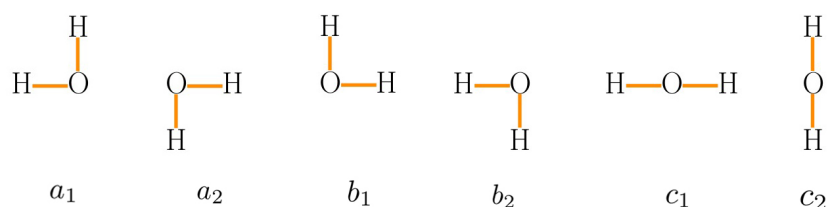


Рис. 1: Шесть возможных конфигураций молекул воды

Каждой вершине сопоставляется больцмановский вес $(a_1, a_2, b_1, b_2, c_1, c_2)$. Вводится биективное отображение множества конфигураций на множество вершин со стрелками, идущими к вершине, если атом Н близко, и выходящими из нее, если далеко.

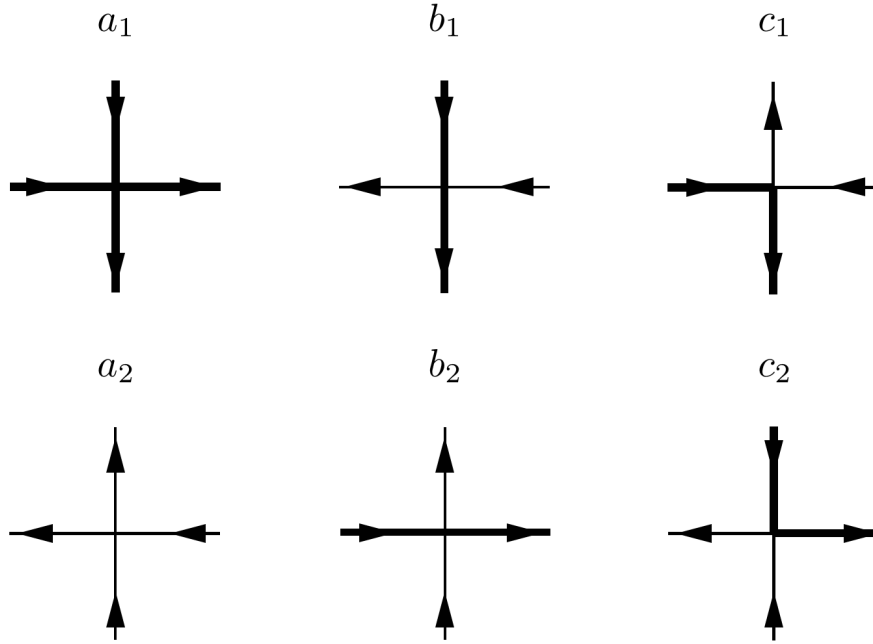


Рис. 2: Набор вершин модели

Если закрашивать грани, на которых стрелки идут вниз или вправо, то композиции вершин образуют пути, и критерием соответствия состояния правилу льда становится непрерывность этих путей на решетке, так что в дальнейшем стрелки можно опустить. При инверсии стрелок вершины a_1 и a_2 , b_1 и b_2 , c_1 и c_2 переходят друг в друга, так что в отсутствие внешнего магнитного поля $a_1 = a_2 = a$, $b_1 = b_2 = b$, $c_1 = c_2 = c$ [3].

Статсумма шестивершинной модели записывается как

$$Z_{6V} = \sum_S \prod_V \omega(s, v) \quad (1)$$

$$\{\omega\} = \{a, b, c\}$$

где S - множество состояний, а V - множество вершин.

Важным параметром системы является величина

$$\Delta = \frac{a^2 + b^2 - c^2}{2ab} \quad (2)$$

В частности, если $\Delta = 0$, то это так называемый случай свободных фермионов. Внутренняя фаза является неупорядоченной[3], а предельная

форма - окружность[4].

1.2. Марковский процесс

1.2.1. Граф состояний и марковская матрица

Элементы пространства состояний соединены между собой элементарными переходами.

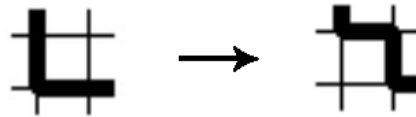


Рис. 3: Элементарный "флип"

Любые два состояния на односвязной области соединены между собой последовательностью флипов. Таким образом их множество образует собой связный ненаправленный граф, где вершины это состояния системы, а ребра - флипы.

Пусть Γ - граф состояний, тогда $V(\Gamma)$ - множество его вершин. Матрица

$$M = \{p(a \rightarrow b)\}_{a,b \in V(\Gamma)} \quad (3)$$

определяет вероятность перехода от одного состояния к другому за один флип. Она удовлетворяет условию

$$\sum_b p(a \rightarrow b) = 1 \quad (4)$$

По определению, неотрицательная матрица с единичной суммой элементов в каждой строке называется стохастической или марковской.

1.2.2. Основная теорема о стационарных распределениях

Методом получения равновесных состояний служит взвешенное случайное блуждание на графе. Цель состоит в том, чтобы из произвольного начального состояния при достаточно большом количестве шагов с весами, зависящими от величин a , b и c получить состояние, близкое к наиболее вероятному, равновесному.

Определение 1. Будем называть конечный взвешенный граф, у которого сумма весов ребер, выходящих из каждой вершины равна единице, однородной цепью Маркова с дискретным временем.

Здесь и далее, будем понимать по цепью Маркова именно это определение.

Определение 2. Граф Γ называется аperiodическим, если наибольший общий делитель длин его циклов равен единице.

Определение 3. Пусть q - некоторое вероятностное распределение, M - матрица переходов P и $qM = q$, тогда q - стационарное распределение.

Теорема 1. Пусть $q : V(\Gamma) \rightarrow \mathbf{R}^+$ - некоторое вероятностное распределение, а P - связная аperiodическая цепь Маркова. Тогда, если выполнено условие

$$q(a)p(a \rightarrow b) = q(b)p(b \rightarrow a) \quad (5)$$

(условие детального равновесия), то для любого начального вероятностного распределения p_0

$$\exists! \lim_{n \rightarrow \infty} p_0 M^n = p : pP = p, p = q \quad (6)$$

Аperiodичность цепи обеспечивается добавлением тривиальных циклов, когда переход происходит на то же состояние. Вероятности переходов можно выбрать так, что условие (5) будет выполнено (см.[1])

2. Результаты

Коротко опишем шаги Марковского процесса, представляющая собой реализацию алгоритма Метрополиса-Гастингса[1]:

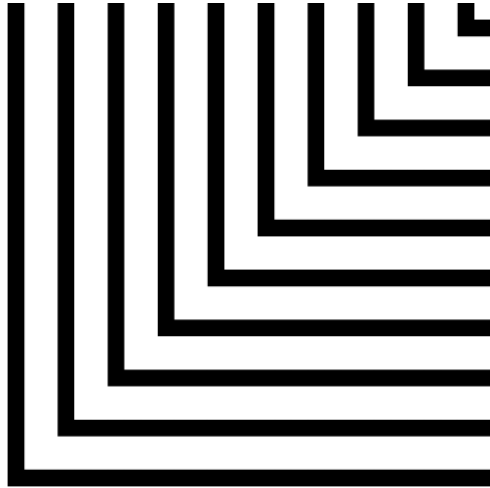
Алгоритм 1.

1. Построить начальное состояние, отвечающее выбранным граничным условиям
2. Задать желаемое количество флипов
3. Определить вероятности переходов для вершин, в которых возможны флипы
4. Найти все вершины, в которых можно совершить флип
5. С равной вероятностью выбрать одну из них
6. В зависимости от типа выбранной вершины с вероятностями, вычисленными на шаге 3, совершить флип вверх или вниз, или же остаться на месте
7. Если желаемое количество флипов еще не выполнено, перейти к шагу 4

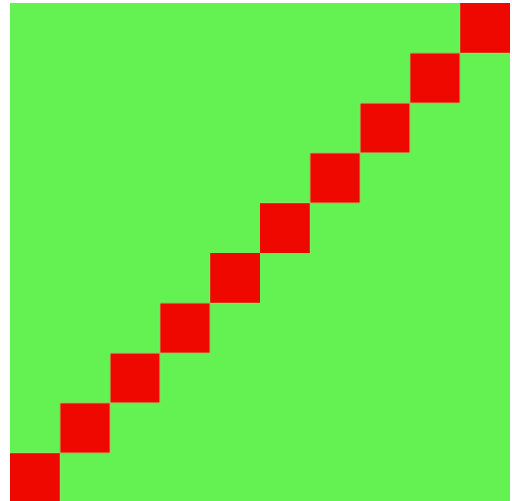
2.1. DWBC (Domain Wall Boundary Conditions)

В этих условиях все пути начинаются на верхней границе решетки, и заканчиваются на правой.

Начальное состояние:




(a) Через пути





(b) Вершинам сопоставлены цвета

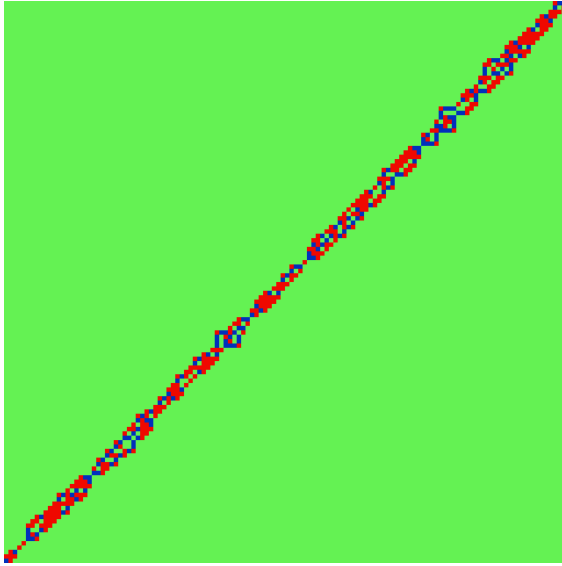
Рис. 4: Начальное состояние с условиями доменной стенки для $N = 10$

Здесь и далее принято следующее соответствие вершин и цветов:

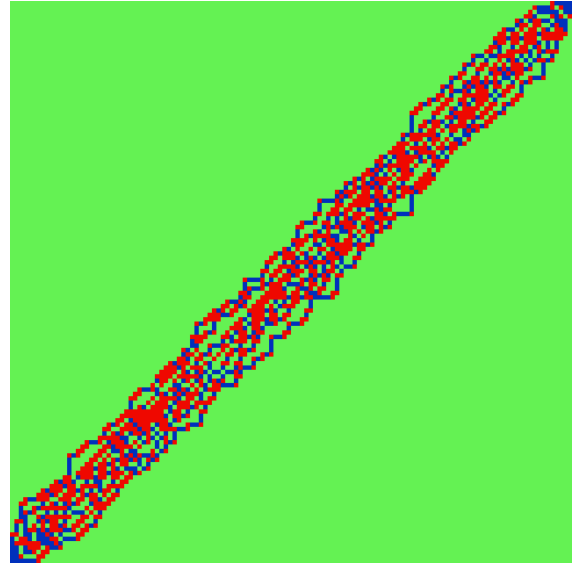
$a_1, a_2 \longleftrightarrow$ 

$b_1, b_2 \longleftrightarrow$ 

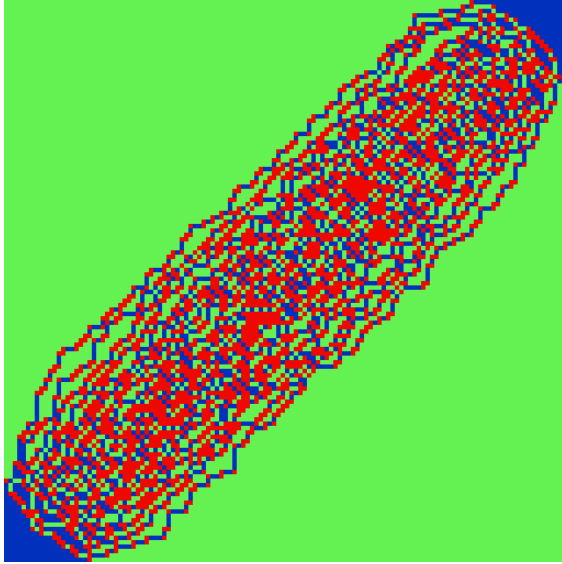
$c_1, c_2 \longleftrightarrow$ 



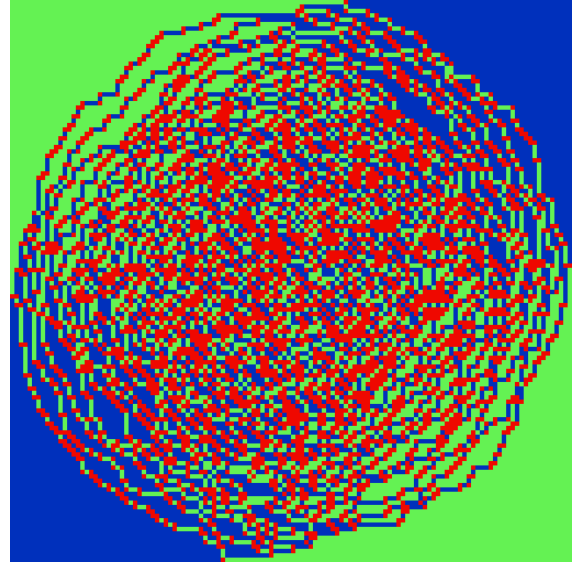
(a) $N_{flipped} = 1000$



(b) $N_{flipped} = 40000$



(c) $N_{flipped} = 10^6$



(d) $N_{flipped} = 40 \cdot 10^6$

Рис. 5: Эволюция системы в точке свободных фермионов, когда $\Delta = 0$. В действительности, этому условию удовлетворяет вся часть сферы $a^2 + b^2 = c^2$ в первом октанте, в физической области, где все веса положительны.

2.1.1. Концентрация вершин при $\Delta = 0$

Точка свободных фермионов $\Delta = 0$ является частным случаем более широкой области $-1 < \Delta < 1$, вид выражения для свободной энергии и зона на фазовой диаграмме остаются теми же, отличие состоит лишь в

предельной форме. Введем параметризацию весов:

$$a = b = 1 \quad c = 2\cos\gamma \quad (7)$$

Для граничных условий доменной стенки существует аналитическое выражение для статсуммы и для свободной энергии [5]:

Для области $\Delta = 0$ выражение для свободной энергии на один узел имеет вид:

$$e^{-f} = \frac{\pi \sin\gamma}{2 \gamma} \quad (8)$$

Отсюда, величина $\frac{\partial f}{\partial c}$:

$$-\frac{\partial f}{\partial \gamma} e^{-f} = \frac{\pi}{2} \left\{ \frac{\cos\gamma}{\gamma} - \frac{\sin\gamma}{\gamma^2} \right\} \quad (9)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \gamma} = \frac{1}{\gamma} - \text{ctg}\gamma \quad (10)$$

$$\frac{\partial f}{\partial \gamma} = \frac{\partial f}{\partial c} \frac{\partial c}{\partial \gamma} = \frac{\partial f}{\partial c} (-2\sin\gamma) \quad (11)$$

$$\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{1}{2\sin\gamma} \left\{ \text{ctg}\gamma - \frac{1}{\gamma} \right\} \quad (12)$$

Величину (12) можно получить из результата симуляции. Для этого перепишем (1)

$$Z_{6V} = \sum_S a^{N_a} b^{N_b} c^{N_c} \quad (13)$$

$$\frac{\partial Z_{6V}}{\partial c} = \sum_S N_c a^{N_a} b^{N_b} c^{N_c-1} \quad (14)$$

$$\frac{1}{Z_{6V}} \frac{\partial Z_{6V}}{\partial c} = \frac{\sum_S N_c a^{N_a} b^{N_b} c^{N_c}}{c Z_{6V}} = \frac{\overline{N_c}}{c} \quad (15)$$

Величина $\overline{N_c}$ явно измеряется усреднением по выборке состояний вблизи равновесия.

В свою очередь,

$$Z_{6V} \approx e^{-N^2 f} \quad (16)$$

Тогда,

$$\frac{\partial Z_{6V}}{\partial c} = -N^2 Z_{6V} \frac{\partial f}{\partial c} \quad (17)$$

Учитывая (12), (17) и то, что для нашей параметризации $c = \sqrt{2}$, получаем:

$$\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ 1 - \frac{4}{\pi} \right\} = -\frac{1}{N^2} \frac{1}{Z_{6V}} \frac{\partial Z_{6V}}{\partial c} = -\frac{\overline{N}_c}{\sqrt{2}N^2} = -\frac{n_c}{\sqrt{2}} \quad (18)$$

, где n_c - концентрация вершин типа c .

$$n_c = \frac{4}{\pi} - 1 \approx 0.273239 \quad (19)$$

Приведем значения этого отношения, полученные численной аппроксимацией:

N	n_c
64	0.273530
128	0.273413
256	0.273216

Наблюдается сходимость к точному отношению, верному для предела $N \rightarrow \infty$.

2.1.2. Неквадратные области

Модифицируем алгоритм для случая, когда рассматривается неквадратная область. Задавать такие условия будем введением "запретных территорий" - областей, состояние которых фиксируется и не затрагивается в процессе эволюции.

Алгоритм 2.

1. Построить начальное состояние, отвечающее выбранным граничным условиям
2. Задать желаемое количество флипов
3. Определить вероятности переходов для вершин, в которых возможны флипы

4. Найти все вершины, в которых можно совершить флип
5. С равной вероятностью выбрать одну из них. Если выбранная вершина попала в запрещенную область, повторяем попытку
6. В зависимости от типа выбранной вершины с вероятностями, вычисленными на шаге 3, совершить флип вверх или вниз, или же остаться на месте
7. Если желаемое количество флипов еще не выполнено, перейти к шагу 4

Приведем результаты на неквадратной односвязной области. Используем начальное состояние (Рис. 4(a)) и воспользуемся алгоритмом 2. Полученную предельную форму сравним с таковой из (Colomo F., [2])

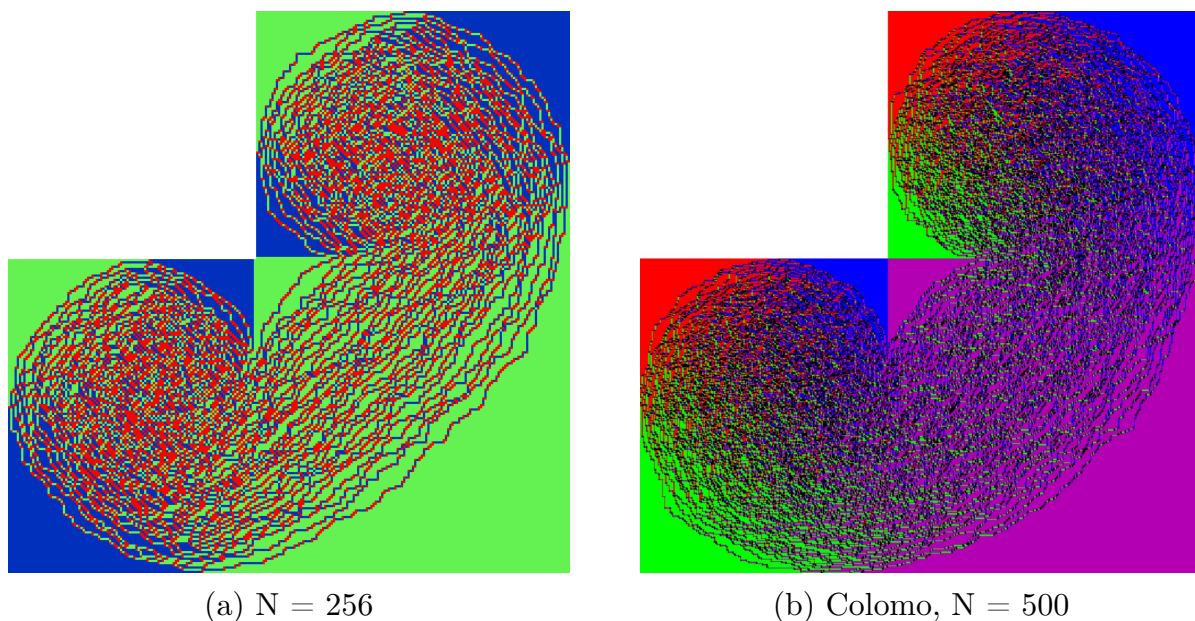


Рис. 6: Сравнение предельных форм для неквадратных областей с равными пропорциями, $\Delta = 0$

Наблюдается согласие между результатами, но за неимением более полного набора данных, сравнить количественные показатели не представилось возможным.

Тот же алгоритм можно применить для неодносвязной области, но в этом случае неприводимость цепи нарушается, пространство состояний разделяется на области, несвязанные между собой непрерывными деформациями путей. Рассмотрим пример такого состояния с одним путем:

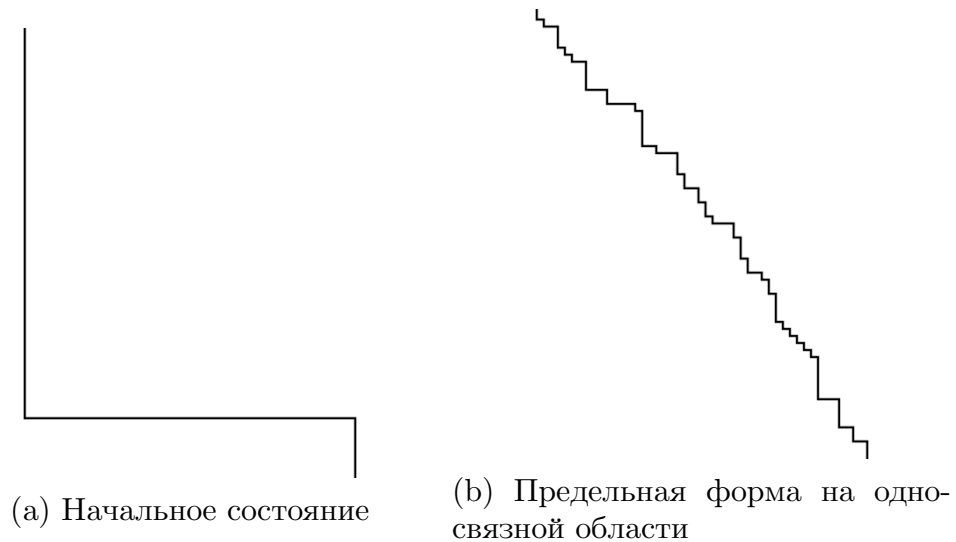


Рис. 7: Граничное условие с одним путем

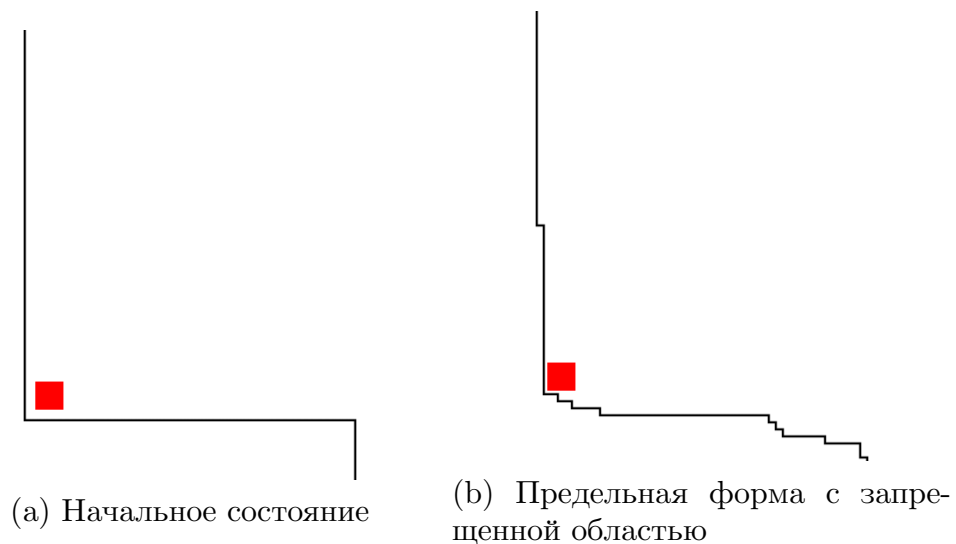


Рис. 8: Граничное условие с одним путем и запрещенной областью. Путь "зацепляется" за дырку.

Таким образом, в данном случае пространство состояний расщепилось на две несвязанные области. Таким образом, при любом заданном

начальном условии отсекается некая область а конфигурационном пространстве системы, и не учитывается в предельной форме. Решение данной проблемы является интересной задачей, и поможет в численном исследовании предельных форм на пространствах с более сложной топологией (аналитическое исследование - см.[6]).

2.1.3. Индуцированные граничные условия на неквадратной области

При выделении запретной области на ее границе индуцируются граничные условия. Пусть начальное состояние выбрано таким образом:

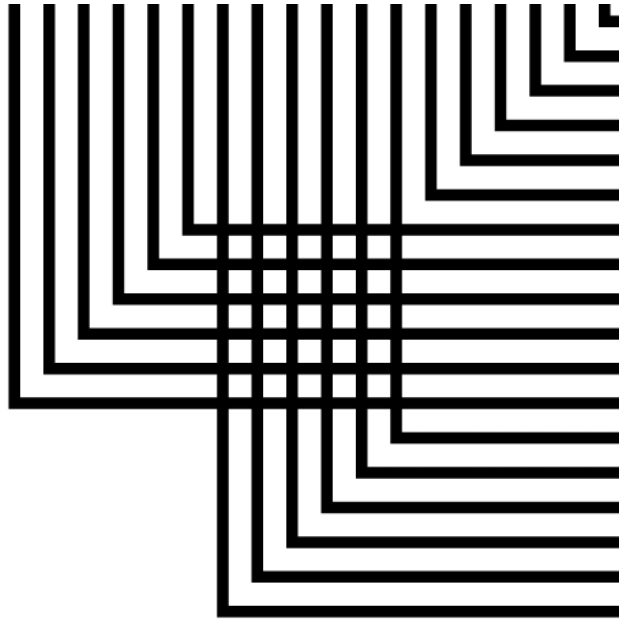
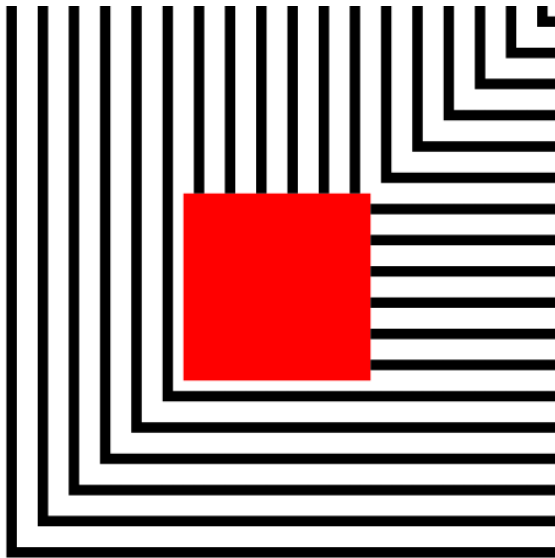
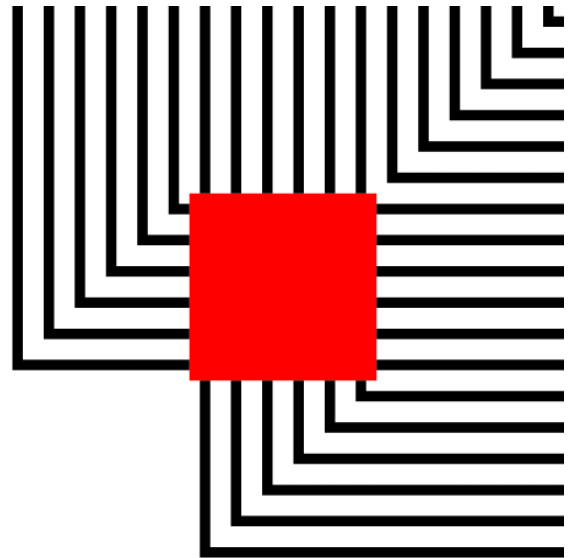


Рис. 9: $N = 18$, conditions mixed

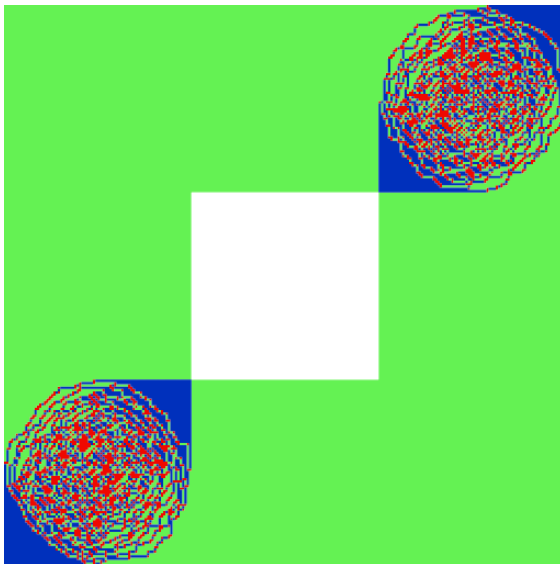
Если не накладывать ограничений на область, то предельная форма не зависит от начального состояния и в нашем случае будет окружностью. В ином случае зависимость будет наблюдаться.



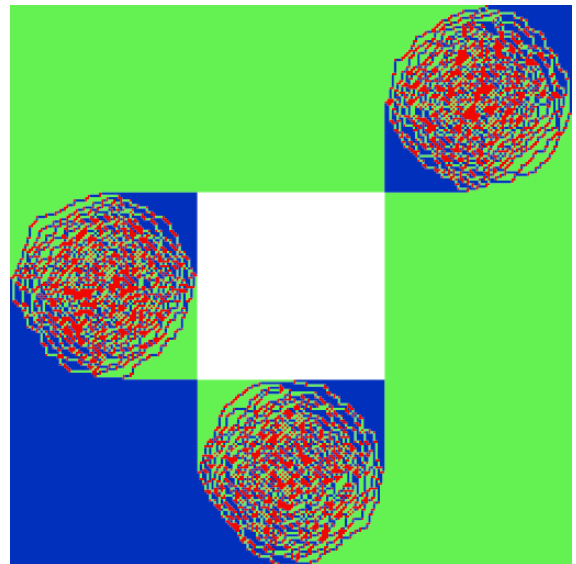
(a) $N = 18$, conditions low



(b) $N = 18$, conditions mixed



(c) $N = 240$, conditions low



(d) $N = 240$, conditions mixed

Рис. 10: Сравнение предельных форм. В первом случае наблюдается расщепление предельной формы на две, в каждой из которых реализуется DWBC, а во втором - расщепление на три несвязанные области. Неодносвязность области в данном примере не является проблемой, так как цель стоит в иллюстрации зависимости от начальных условий

2.2. Более общие граничные условия

Для алгоритма 1 требуется корректное начальное состояние, соответствующее правилу льда. Для более широкого, чем DWBC, класса граничных условий, задача построения таких состояний становится

нетривиальной. Была рассмотрена задача построения состояний для граничных условий с сохранением числа путей на смежных границах. На условия из данного класса налагается требование, чтобы количество путей выходящих из левой грани равнялось количеству, приходящему в нижнюю, а число путей, выходящих из верхней грани равнялось числу заканчивающихся на правой.

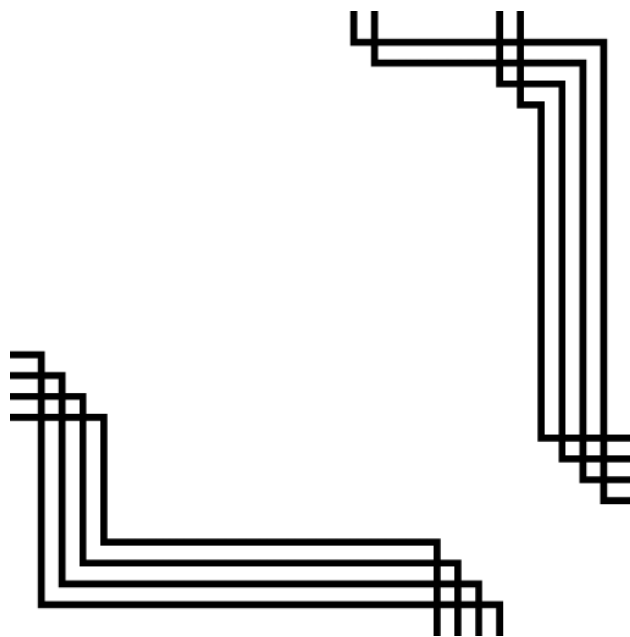


Рис. 11: Пример граничных условий с сохранением числа путей

Приведем алгоритм построения таких состояний.

Алгоритм 3.

1. Для каждого из путей на левой грани, начиная с нижнего:
 - (a) Если находимся на предпоследнем ряду, то продолжаем путь вправо до тех пор, пока не окажемся на нужной X координате и заканчиваем путь. Если нет, то переходим к следующему шагу
 - (b) Если нижняя вершина B_2 , то идем вправо и возвращаемся на шаг (a)
 - (c) Иначе, если нижняя вершина A_1 , то идем вниз и вправо, возвращаемся на шаг (a)
 - (d) Иначе идем вниз и возвращаемся на шаг (a)
2. Записываем получившуюся нижнетреугольную конфигурацию в итоговую матрицу
3. Транспонируем граничные условия и повторяем шаг 1
4. Транспонируем состояние и записываем получившуюся верхнетреугольную конфигурацию в итоговую матрицу

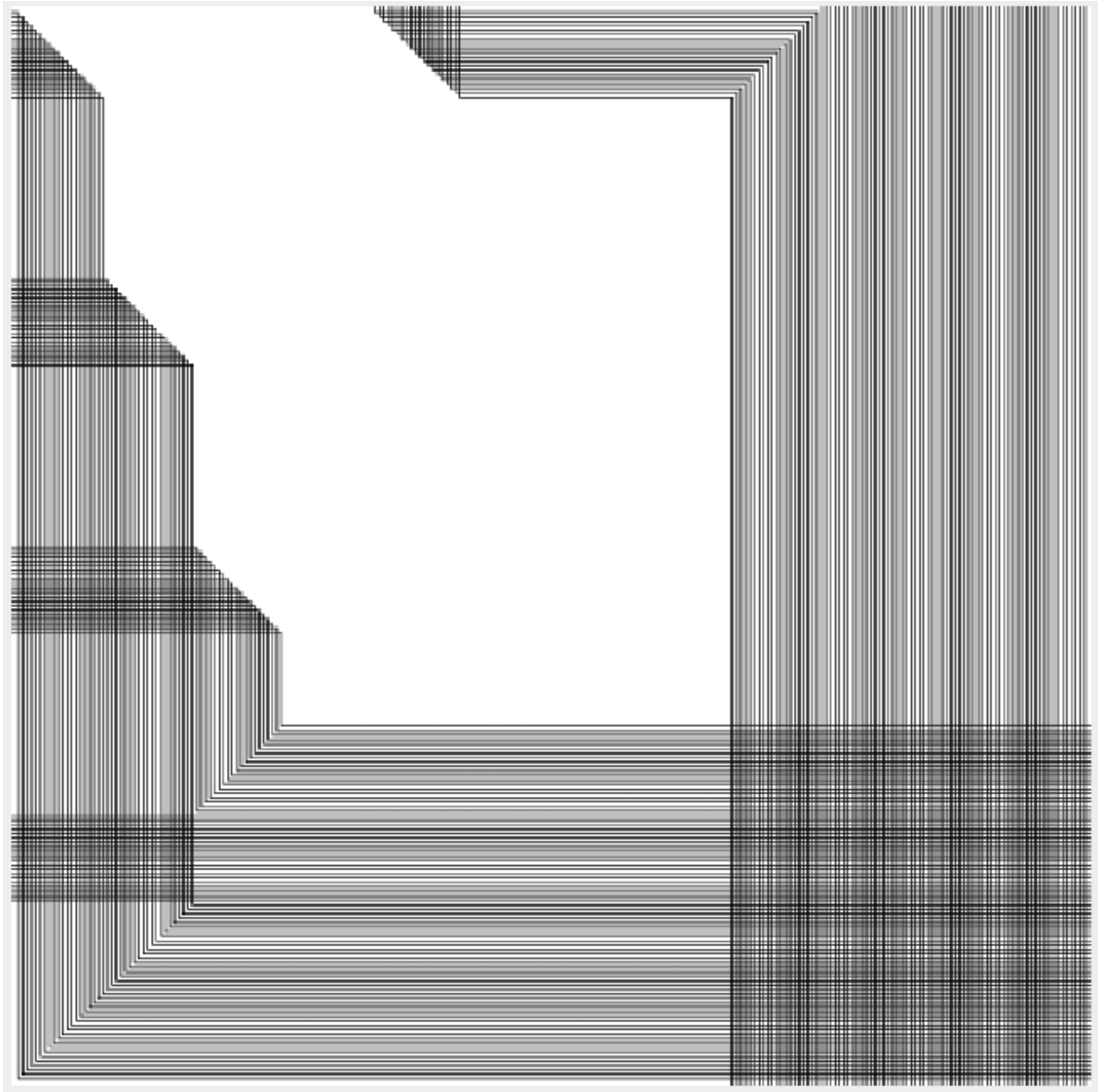


Рис. 12: Пример работы алгоритма

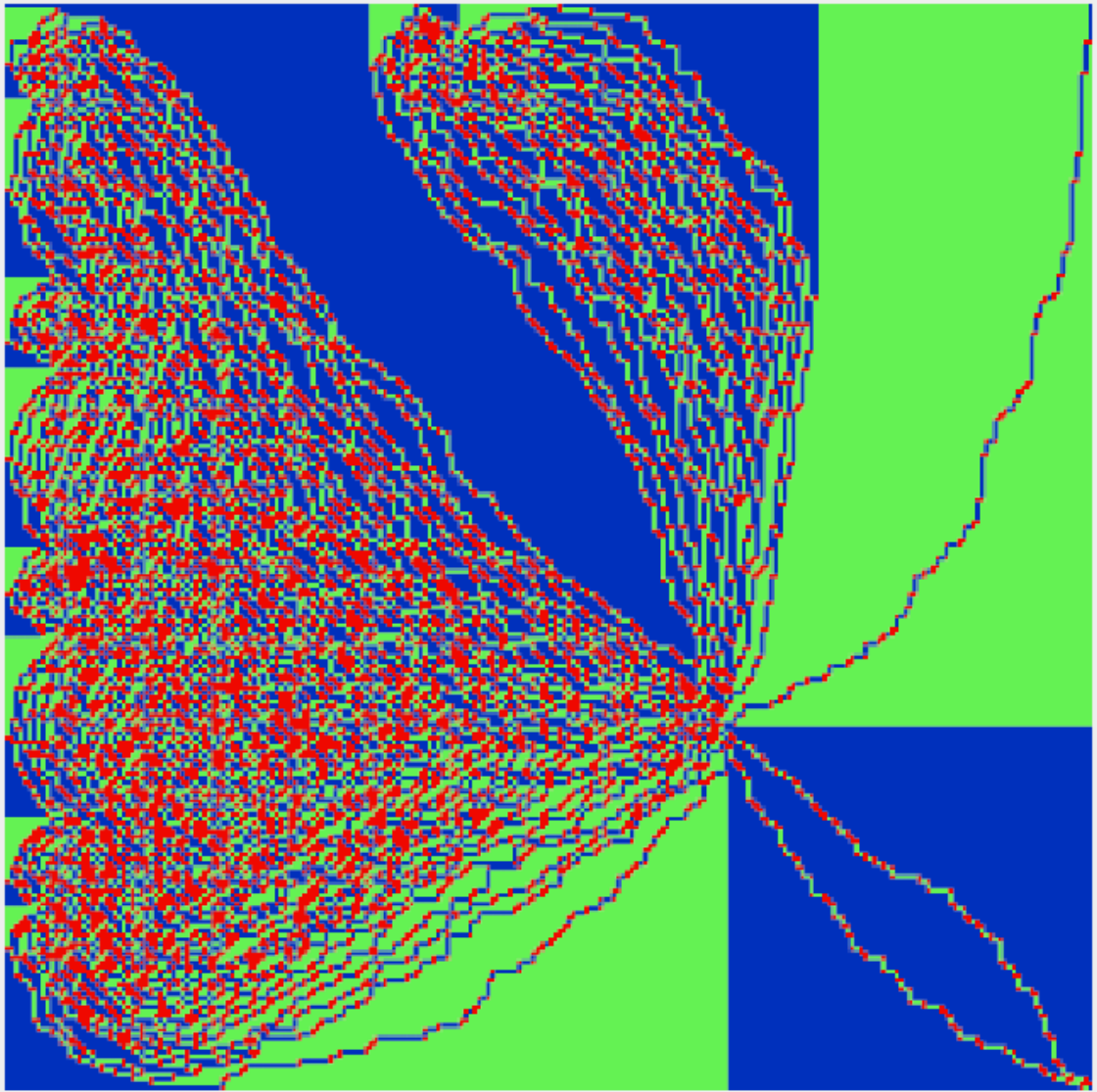


Рис. 13: Предельная форма для граничных условий на Рис. 12

Заключение

Была рассмотрена реализация алгоритма Метрополиса-Гастингса, использующая случайное блуждание на взвешенном графе состояний для моделирования равновесных состояний шестивершинной модели. Для точки свободных фермионов было проведено сравнение концентрации вершин типа 'с' для аналитического выражения и для значения, полученного с помощью симуляции. Наблюдается сходимость численного значения к аналитическому при увеличении размера решетки, что и ожидалось для термодинамического предела.

Также, для класса граничных условий с сохранением числа путей на смежных парах границ был разработан алгоритм для построения начальных состояний, требующихся для старта алгоритма семплирования.

С помощью модифицированного исходного Марковского процесса была получена возможность получать равновесные состояния для односвязных неквадратных областей. Для семплирования на неодносвязных областях требуется другой подход, в связи с приводимостью на них соответствующей цепи Маркова. Данная проблема интересна возможностью получения численных результатов на решетках со сложной топологией, и оставлена на дальнейшее изучение.

Благодарность

Хочу выразить благодарность Дэвиду Аллисону за предоставленный алгоритм и Анансу Шридхару за консультации на протяжении работы над дипломным проектом.

Список литературы

- [1] Allison D., Reshetikhin N. Numerical study of the 6-vertex model with domain wall boundary conditions. — 2008.
- [2] F. Colomo. Arctic Curves of the six-vertex model, Inhomogeneous Random Systems, Institut Henri Poincaré, 28.01.2015.
- [3] J. Baxter R. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. — New York Academic, 1982.
- [4] Jockusch W., Propp J., Shor P. Random Domino Tilings and the Arctic Circle Theorem. — 1995. — URL: <http://arXiv:math/9801068>.
- [5] Korepin V., Zinn-Justin P. Thermodynamic limit of the Six-Vertex Model with Domain Wall Boundary Conditions. — J. Phys. A 33 No. 40, 2000.
- [6] Reshetikhin N., Sridhar A. Integrability of Limit Shapes of the Six Vertex Model. — 2015. — URL: <https://arxiv.org/abs/1510.01053>.