

表1.6.2.5-1 逾渗相变与磁相变的临界指数值，整数比是严格准确的值

模型	物理量	函数	临界指数	$d = 2$	$d = 3$	$d \geq 6$
逾渗模型	逾渗概率	$P_{\infty}(p) \sim (p - p_c)^{\beta}$	$\beta$	5/36	0.4	1
	集团平均大小	$S(p) \sim  p - p_c ^{-\gamma}$	$\gamma$	43/18	1.8	1
	平均跨越长度	$\xi(p) \sim  p - p_c ^{-\nu}$	$\nu$	4/3	0.9	1/2
	电导率	$\sigma(p) \sim (p - p_c)^t$	$t$	1.1	1.65	3
Ising模型						$d \geq 4$
	磁化强度	$M(T) \sim (T_c - T)^{\beta}$	$\beta$	1/8	0.32	1/2
	磁化率	$\chi(T) \sim  T - T_c ^{-\gamma}$	$\gamma$	7/4	1.24	1
	相关长度	$\xi(T) \sim  T - T_c ^{-\nu}$	$\nu$	1	0.63	1/2

### 1.6.2.6 标度律

相变理论中把临界指数联系起来的关系称为标度律 (scaling law)，当奇异性用幂次表示时，就已经说明它的变化是有标度性的。这里，我们只限于说明标度的概念，而标度律的推导是统计力学中的内容。

我们说，当一个函数  $F(\lambda x)$  对所有的  $\lambda$  满足以下条件时

$$F(\lambda x) = g(\lambda)F(x) \tag{1.6.2.6-1}$$

时它是齐次的。  $g(\lambda)$  具有的形式可以立即找到，因为

$$F(\lambda \mu x) = g(\lambda)F(\mu x) = g(\lambda)g(\mu)F(x) = g(\lambda \mu)F(x), \tag{1.6.2.6-2}$$

所以有

$$g(\lambda \mu) = g(\lambda)g(\mu). \tag{1.6.2.6-3}$$

上式中两边对  $\mu$  微分，得

$$\frac{\partial}{\partial \mu} g(\lambda \mu) = \lambda g'(\lambda \mu) = g(\lambda)g'(\mu). \tag{1.6.2.6-4}$$

令  $\mu = 1$ ，  $g'(1) = a$ ，则  $\lambda g'(\lambda) = ag(\lambda)$ 。然后从1到  $\lambda$  积分，根据  $g(1) = 1$ ，得： $g(\lambda) = \lambda^a$ 。故有

$$F(\lambda x) = \lambda^a F(x). \tag{1.6.2.6-5}$$

故对齐次函数，自变量的尺度变化  $\lambda$  倍时，函数本身形式不变，仅大小变化  $\lambda$  的幂指数倍，这就是标度性的概念。显然，幂指数函数满足这个关系。实际上，在式 (1.6.2.6-5) 中令  $\lambda = x^{-1}$ ，得  $F(x) = F(1)x^a$ ，即齐次函数就是幂指数函数。

将 (1.6.2.6-5) 式所描述的标度概念应用到相变理论中，可以得到各个临界指数间满足的标度律关系，各种推导中以 Kadanoff 从 Ising 模型出发所作的推导最好。最为重要的标度律是 Josephson 标度律：

$$2\beta + \gamma = \nu d. \tag{1.6.2.6-6}$$

它将几个关键性的指数联系起来，并且包含了空间维数。可以验证，表1.6.2.5-1中的指数均满足这个关系。实际上，描述临界现象的指数还有许多。但标度律给出的结论是，众多指数中只有两个是独立的，其它指数都可以由此推出。

1.6.2.7 边缘维数

我们现在来讨论表1.6.2.5-1中的最后一列，其中所列出的指数是逾渗平均场理论的临界指数，这个相应于在Bethe点阵上级联过程的逾渗平均场理论与聚合物的Flory-Fisher平均场理论或铁磁性的Weiss分子场理论相类似，这里不予详细讨论。

就相变而言，已经知道存在一个边缘维数  $d^*$ 。对于  $d \geq d^*$ ，临界指数取经典（即平均场）值。我们可以粗略地论证一下它的合理性：维数越高，每一点阵格点相邻的格点数也越多，因而它的环境也就越接近平均环境（即平均场）。或者说，若  $d$  足够大，则认为每一位置就是平均位置也并无本质性错误。对  $d$  维密堆积点阵，从  $d=1$  直到  $d=8$  的配位数（最近邻格点数）均已知，分别为：2, 6, 12, 24, 40, 72, 126, 240。显然，配位数的增加比  $d$  的增加要快得多。对铁磁相变， $d^* = 4$ ，即在4维或更高的维数下，临界指数取表中下右方所给出的平均场值。我们的问题是：逾渗的边缘维数是多少？

Toulouse于1974年给出了这个问题的解答。首先，他论证了Bethe点阵上逾渗过程的临界指数实际上就是平均场值。这里我们不加证明地指出，Bethe点阵上的临界指数是可以严格求解的， $\beta, \gamma, \nu$  取值分别为 (1, 1, 1/2)；然后，当取此平均场值时，Josephson标度律应满足，该标度律只有在  $d \leq d^*$  时成立，而平均场值对应的维数是  $d \geq d^*$ ，因此，代入平均场值后即得逾渗的边缘维数为  $d^* = 6$ 。因此他认为，6作为逾渗的边缘维数是一个“并非不合理的猜想”。而这一美妙猜想以后被Monte Carlo计算机模拟研究加以证实，这个工作是1976年由Kirkpatrick在IBM完成的，他分析了从2维到6维简立方点阵上座逾渗过程，证明了临界指数确实  $d^* = 6$  时达到平均场值，这一点进一步加强了逾渗与二级相变理论的相似性。尽管逾渗与磁性相变属于不同的普适类，各自有着不同的临界指数，但它们仍有相同的标度律！

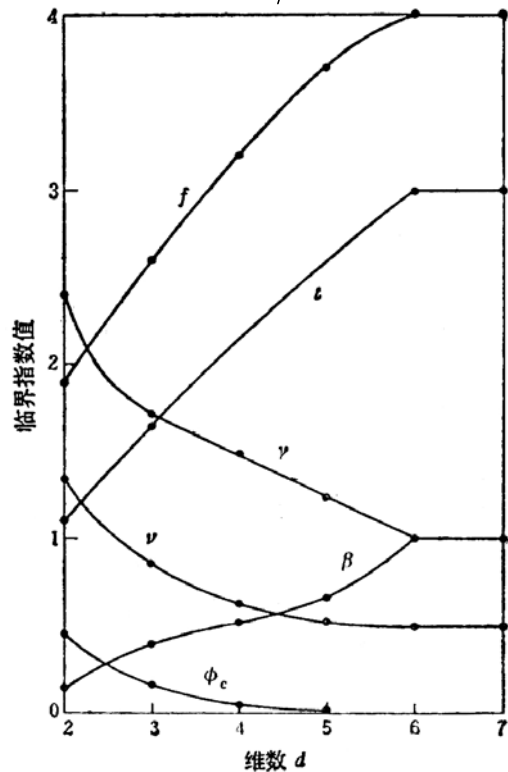


图1.6.2.7-1中显示了各种逾渗临界指数值随维数的变化，整数维数下的取值来

图1.6.2.7-1 逾渗的临界指数与维数的关系。

源于理论和计算机模拟，而平滑曲线是把维数当作连续变量的概念而连成的。在相变理论中，连续维数的重要应用是作为微扰论中的展开变量，即认为  $\varepsilon = d^* - d$  是一小量，该方法称为  $\varepsilon$  展开。对于逾渗过程，物理上的实际维数是2和3，与平均场的边缘维数相差很大，因此，对应的临界指数值之间的差别也大，而这个差别随着维数的增加是单调减的。对于磁性相变，边缘维数是4，于是临界指数与平均场值的偏离要小得多。

1.6.2.8 逾渗模型的应用

无序系统中由某种占据数（或浓度、密度）变化时引起的逾渗相变过程可以作为描述许多自然现象的模型。即使在每种现象之间，体系的基本元素和相互作用是不同的，但体系之间有着相通的共性，临界点附近的行为就是如此。表 1.6.2.8-1 中列举了已经应用逾渗模型研究过的体系和现象，其中大部分是物理的，也有化学的和生物方面的应用。一些是宏观现象，其余则属微观过程，宏观和微观的分界线很容易看出。对天体物理学的应用关心的是由超新星爆炸形成恒星的传播过程，这里逾渗转变的发生由星际气体密度的函数来表达，粒子物理的应用涉及的是核子中夸克的禁闭，这两个例子的物理尺度相差达  $10^{35}$  倍：银河系的尺度量级为  $10^{22}$  cm，而核子的尺度量级为  $10^{-13}$  cm。

现在考虑一种传染性疾病（percolities-“愚肾”）在易感染的群体中的传播（亦可指谣言或某种观念的传播）：想像一个果园，均匀栽植着一种果树，遭受着传染病的威胁。设病株传染给相距为  $r$  处的另一健康的树的概率  $p(r)$  已知，果农想得到最大产量，自然希望栽种最大可能数目的果树。现在要问：在能够避免传染病引起果园毁灭危险的前提下，可以允许的最大栽植密度是多少？假定彼此分隔一定距离的几个单株将被传染，使单棵病树引起遍及整个果园的传染。当果园

表 1.6.2.8-1 逾渗理论的应用

现象和体系	相变
多孔介质中流体的流动	局部 / 扩展的变湿
群体中疾病的传播	抑制 / 流行
通讯或电阻网络	不连接 / 连接
导体和绝缘体的复合材料	绝缘体 / 金属
超导体和金属复合材料	正常的 / 超导的
不连续的金属膜	绝缘体 / 金属
螺旋状星系中恒星的随机形成	非传播 / 传播
核物质中的夸克	禁闭 / 非禁闭
表面上的液 He 薄膜	正常 / 超流
弥散在绝缘体中的金属原子	绝缘体 / 金属
稀磁体	顺磁性 / 铁磁性
聚合物凝胶化，流化	液体 / 凝胶
玻璃化转变	液体 / 玻璃
非晶态半导体的迁移率边	局域态 / 扩展态
非晶态半导体中的变程跳跃	类似于电阻网络



图1.6.2.8-1 采用逾渗模型所模拟出的星系构造。

中有限百分比的果树被传染后认为果园被毁灭。

逾渗模型对该问题的答案是：果树之间的间距  $a$  必须足够大，以保证  $p(r) < p_c$ ，即间距  $a$  必须超过临界距离  $r_c$ ，这时，损失局限于最初感染的病株周围的有限集团。

[作业]：模拟有限2维正方格子  $N = L \times L$  座逾渗：

- 1、首先编程实现 Honsen & Kopelman 的集团标识算法。将你用算法标识的结果与直接绘图的结果对照，看是否正确？
- 2、对于不同的几率  $p$  ( $0.3 < p < 0.8$ ) 和不同的网格尺寸 ( $L = 8, 16, 32$ ) 计算  $P_\infty(p)$ 。

### 1.6.3 数值重整化

#### 1.6.3.1 重整化群概念

重整化群理论对上述的标度律和普适性概念奠定了坚实的基础。1970年以前对临界指数的所有计算或者是严格求解热力学模型（如一维和二维 Ising 模型）、或者是数值求解法（如三维 Ising 模型）、或者将近似解进行推广（如高温展开）等。Kadanoff 在1966年按照粗粒平均的思想引进了重整化群理论中的基本物理概念使之运用于提取临界区域的临界指数，而无需研究配分函数。但是 Kadanoff 理论缺少严格的数学基础，1971年后 K. Wilson 发展了重整化群技术的定量理论并奠定了它的数学基础，成功地应用重整化群方法解决了临界现象问题，从而获得了1982年的 Nobel 物理学奖。

“重整化群”的命名起源可以追溯到1960年代的粒子物理学，当时人们乐观地认为按照对称性和群论就可以解决一切基本物理问题。量子场论中的重整化方法是为了解决 Feynman 图在  $k \rightarrow 0$  时的发散行为。但是，这里的重整化群方法可以说是与场论毫无关系，并且它在数学结构上也并非数学上的群论。甚至这个方法在本质上只是一个处理问题的框架，并非是万能普适通用之法，能否定量成功地应用很大程度上依赖于问题本身的属性，但这并不妨碍这个方法所提供的定性图像。所有重整化群方法的一般思路是将描写一个物理问题的参数用另外一组更为简单的参数表示出来，但保持问题中感兴趣的物理性质不变。如在临界问题中，我们感兴趣的是体系的长程行为，因此将短程自由度不断作粗粒平均。这样，最终得到描述某些参数空间中的重整化群流的数学方程，其流向的研究是重整化群的关键。重整化群方法的应用包括混沌、逾渗、临界现象、量子多体问题等。

重整化群方法有两类，一种是与量子场论中的方法类似的  $k$  空间方法，另一种是简单明了的实空间重整化群方法。重整化群方法的最初应用对象是热力学相变问题，但应用到逾渗问题时其过程和结果更为直观、简单明了，因为它就是一个实空间重整化群方法。并且，当和 Monte Carlo 方法进行结合后，在多数情况下可以比单用重整化群方法更为有力。

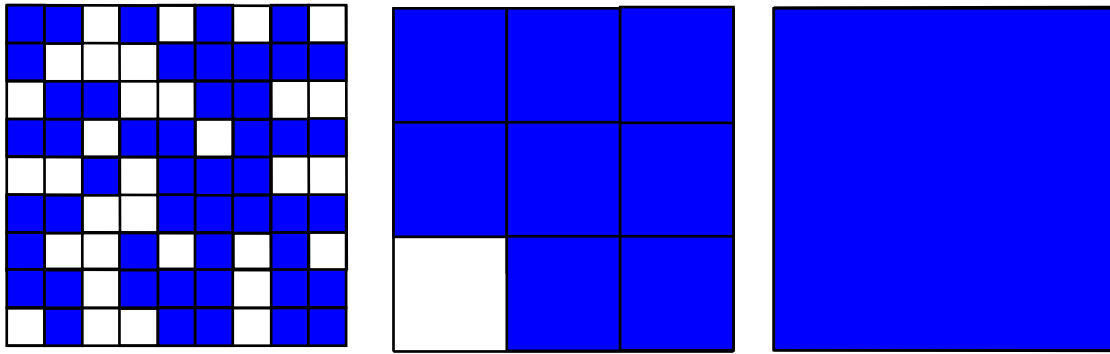


图1.6.3.1-1 逾渗图形在 $b=3$ 下的重整化过程。

为了引入重整化群的概念,我们先考虑不同  $p$  值下生成的逾渗集团图形在尺度变换时的行为(图1.6.3.1-1)。对于  $p < p_c$  形成的逾渗图案,我们认为占据格子是黑格子,未占据格子是白格子。则当我们的肉眼逐步远离该图像时,由单独的黑格子形成的小集团变得不可见了,只有大集团才可以看得见,并且这些大集团中间连接各小集团的细窄跨桥或集团边缘上的细小分枝也是不可见的,即大集团在这个尺度下变成分立的小集团。再进一步远离图像,则这些小集团也会逐步不可识别。这个图像在尺度变换下最终趋于不动点  $p=0$  的图像。对于  $p > p_c$  的情形结果应该是怎样呢?这时,图案中黑格子较多,居于统治地位,按类似相同的理由,当逐步远离图像时,由白格子形成的小集团变得不可见了,也就是说图像逐步趋于黑格子形成的大集团,最终趋于不动点  $p=1$  的图像。那么,在黑白格子比重均衡时的逾渗阈值  $p = p_c$  下,尺度变换的结果又是什么?这时,图像的性质不随尺度的变化而变化,与距离无关,可以近似地认为是缩小的原图像,也即趋于另外一个不稳定的不动点。

上面所述是重整化群的一种形象的表述,它的基本思想就是对体系的长度尺度连续不断地做变换,将体系元胞尺度由  $a$  变换成  $ba$  ( $ba$  应小于体系的相关长度

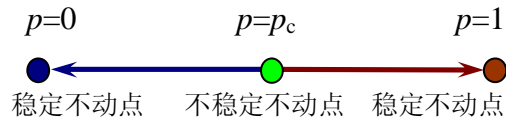


图 1.6.3.1-2 重整化过程中的流向图。

$\xi$ ), 相继标度变换的结果产生出一个流向图,空间流向场趋向于若干特殊的不动点,这些点在标度变换下保持不变(图1.6.3.1-2)。上面的例子中有两个是没有多少意思的,即流的“壑”点:  $p=0$  (完全空极限)和  $p=1$  的(完全占据极限)两个端点,重整化驱动密度流向着这些纯极限点。而流向场中最重要的点是流的“源”点,即  $p = p_c$  处的不稳定不动点,它是体系的相变点,即该点把相图分成不同的区,这些区域通过标度变换将变到不同的单组分极限。根据重整化群理论,临界现象由不稳定不动点的邻域内流向图的性质控制。

### 1.6.3.2 标度变换方法

现在我们讨论计算模拟时采用的尺度变换方法。这里要注意到实空间的重整化群只能应用于格子模型,除此之外,格子点阵还必须有离散的标度变换对称性。我们可以将格子点阵区域分成小块(或称元胞),每个元胞包括数个格子,元胞

的占据行为是由其中的占据格子数目决定。如果元胞中包含的占据格子数目居多时,就认为该元胞是占据的(或是黑的),否则它就是未被占据的(或是白的)。可以认为每个元胞占据原来格子点阵中的一个格点,从而这些元胞形成新尺度下的格子点阵。离散标度变换对称性就是指新格子点阵与原来的格子点阵应有相同的对称性,两个格子点阵不同的只是晶格常数(格子边长)由最初的 $a$ 变成了 $a'=ba$ , $b$ 是放大因子。标度因子 $b$ 可以表为 $N^{1/d}$ ,其中 $N$ 为重整化变换时,一个元胞中所包含的初始格点数, $d$ 代表维数。

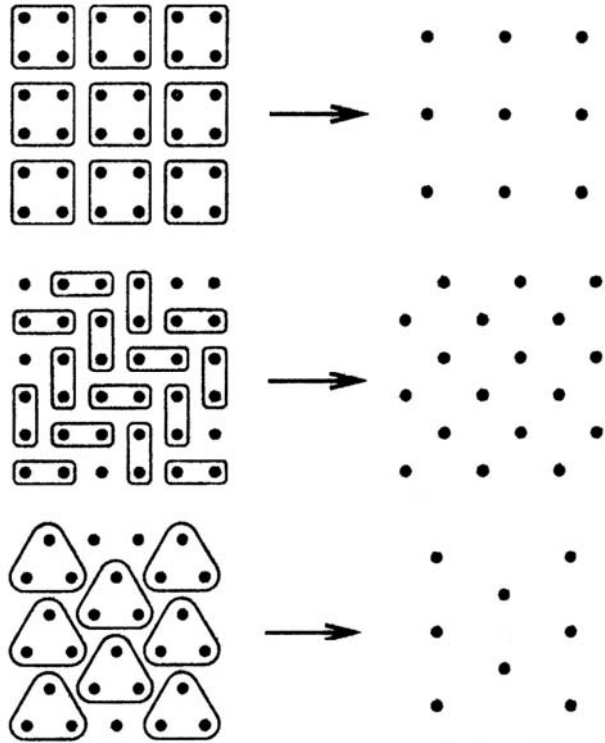


图1.6.3.2-1 几种格子点阵的重整化。

最为常用的标度变换对称格子点阵是正方格子。现在我们将重整化过程用西方政治选举过程进行类比。设图1.6.3.1-1的逾渗图形代表某地二维政治地图,在此乡级选区内有 $9 \times 9 = 81$ 个选民。该例中 $N=9$ , $d=2$ 。假定只有两党竞选,占据格子代表“黑手党”,未占据格子代表“白掌党”,在图示的乡级选举中,黑手党得49票,设 $p$ 为黑手党的得票率, $p=0.605$ 略微大于正方形座逾渗的逾渗阈值0.593。现在将图的区域分成 $3 \times 3$ 个同样大小的区级选区(每区有9个乡),在该级选区上,根据每一乡内多数选票决定该区内哪一党获胜。从而黑手党取得了8个选区,得票率上升为 $p'=8/9=0.889$ 。这时,长度单位乘了一放大因子 $b=3$ ,通过这一标度变换,原来的得票率 $p$ 被重整化到值 $p'$ 。一般来说, $p'$ 是 $p$ 和 $b$ 的函数,即 $p'=p'(p,b)$ 。

上述过程再继续重复进行下去时,由9个区组成一个县的选区,则经过第二次 $b=3$ 的标度变换后,从区级变到县级,相应应有 $p''=1$ 。由此,经过两步标度变换后, $p$ 从初始的选民级的0.605变到区级的0.889,再变到县级的1,标度变换下的重整化函数相应为: $p'(p=0.605,b=3)=0.889$ , $p'(p=0.889,b=3)=1$ 。在此政治例子中,重整化倾向于产生一致性,而接近合理的选民投票结果(如 $p=0.605$ )往往转变成某党选举团的一边倒式的大胜利,即趋向一个极限或不动点 $p=1$ 。

格子标度变换还有其它方法,图1.6.3.2-1中给出了其中几例。其中的上图是正方格子 $b=2$ 的情形。中图对应正方格子另外一种重整化方法,此时长度的标度因子是 $b=\sqrt{2}$ ,其中的格点数为原格点数的 $1/b^2=1/2$ 倍,但格子点阵的对称性仍保持是正方形的。下图是三角形格子点阵的重整化,新产生的点阵必须缩小 $b=\sqrt{3}$ 倍才能与原来的点阵相同。新点阵中的格点数为初始点阵的 $1/b^2=1/3$ 倍。

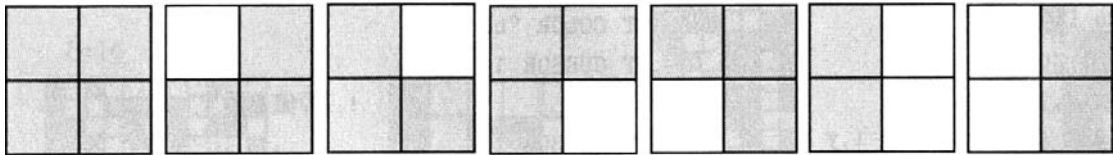


图1.6.3.3-1  $b=2$  的正方格子上下端的几种连接构型。

1.6.3.3 临界指数的计算

上述通过标度变换的方法可以求得临界点或逾渗阈值  $p_c$ ，但还不能推得临界指数。这里我们讨论用重整化群同时计算相关长度的临界指数  $\nu$  和临界点的方法，它与热力学相变中采用的重整化群方法不同之处仅仅在于，热力学中的状态占据几率是用配分函数或通过 Hamilton 量表示的，而这里我们可以直接采用格点的占据几率  $p$ 。

和上面的方法类似的是，构造尺度放大因子为  $b$  的元胞，其中的格点数为  $b^d$ ，该格子的占据状态几率  $p'$  按照元胞中原格子是否上端与下端占据态相连接来决定，每个元胞之间是无关联的。由  $p \rightarrow p'$  的重整化群变换是逾渗模型中的基本物理之反映，即是否产生逾渗通路达到长程连接性。图1.6.3.1-1中为形象说明政治选举的重整化步骤，我们采用的是以占据格子的数目作为重整化格子的占据态判断标准。但实际上的计算时，需要根据是否形成逾渗通路作为判断标准。对于  $b=2$ ，上下端连接的图形有7个（图1.6.3.3-1），其变换表达式为

$$p' = R(p|b=2) = p^4 + 4p^3(1-p) + 2p^2(1-p)^2 \tag{1.6.3.3-1}$$

一般来说，重整化后的格子点阵占据几率  $p'$  相异于原格子点阵的占据几率  $p$ 。例如，在上式中对于起始的  $p = p_0 = 0.5$ ，经过一次重整化变换后即有  $p_1 = p' = R(p_0) = 0.44$ ，第二次变换后得  $p_2 = R(p_1) = 0.35$ ，显然，多次变换后趋向于不动点  $p = 0$ 。类似，对于起始值  $p_0 = 0.7$ ，变换的结果是趋向于不动点  $p = 1$ 。这和上面所述方法的结果是一致的。显然，对于我们特别关心的临界点  $p^*$ ，它必须满足关系式

$$p^* = R(p^*) \tag{1.6.3.3-2}$$

代入 (1.6.3.3-1) 式求解4次方程，得到两个平凡解： $p^* = 0$  和  $p^* = 1$ 。真正的临界点的近似解是  $p^* = 0.61804$ ，它与模拟值0.592746（表1.6.1.3-1）比较接近。上面推导不动点的过程相当于 (1.6.3.3-2) 式的迭代解，由图1.6.3.3-1可以看出，这种迭代法是不会趋于不稳定不动点解的。

为了计算临界指数，我们考虑到，重整化的格子点阵中所有的长度量应

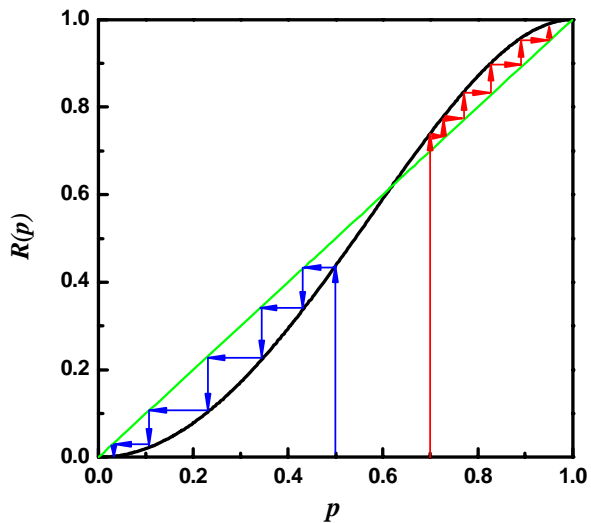


图1.6.3.3-1 迭代法求解方程式(1.6.3.3-1)和(1.6.3.3-2)时的过程，其结果是趋于两端的不动点

比原来格子点阵中的长度量缩小  $b$  倍, 这样才能保持系统在标度变换下是不变的, 即关联长度的变换是  $\xi' = \xi/b$ 。由于在  $p \sim p_c$  处,  $\xi(p) \propto |p - p_c|^{-\nu}$ , 故得

$$|p' - p^*|^{-\nu} = b^{-1} |p - p^*|^{-\nu}. \quad (1.6.3.3-3)$$

为了计算  $p_c$  附近  $p'$  和  $p$  的关系, 将 (1.6.3.3-2) 式在  $p^*$  附近作 Taylor 展开, 取一级近似项后有

$$p' - p^* = R(p) - R(p^*) \approx \lambda(p - p^*), \quad (1.6.3.3-4)$$

其中  $\lambda = (dp'/dp)_{p=p^*} = dR(p^*)/dp$ 。将 (1.6.3.3-4) 式两边取  $\nu$  次幂,

$$|p' - p^*|^\nu = \lambda^\nu |p - p^*|^\nu, \quad (1.6.3.3-5)$$

与 (1.6.3.3-3) 式比较有:  $b = \lambda^\nu$ , 取对数后得临界指数,

$$\nu = \frac{\ln b}{\ln \lambda} = \frac{\ln b}{\ln(dp'/dp)_{p^*}}. \quad (1.6.3.3-6)$$

例如, 对于 (1.6.3.3-1) 式,  $R(p) = -p^4 + 2p^2$ , 对其微分并代入  $p^* = 0.61804$  后得,  $\lambda = 4p^*(1 - p^{*2}) = 1.5279$ , 则  $\nu = \ln 2 / \ln 1.5279 \approx 1.635$ 。其正确值应是  $4/3$  (表 1.6.2.5-1)。对于  $b=2$  的简单计算, 这就已经得到近似程度相当好的结果了。但是, 对于这样的元胞, 其边界效应不可忽略, 这就影响了计算的精度。这是因为, 这个方法中假定元胞的占据态与其他元胞无关, 这个假定对原始格子点阵是成立的, 但是即使进行一次重整化群变换, 也有可能破坏原来的占据态连接路径, 原来是连接的变成是不连接的, 或不连接的成为连接的, 该边界效应对于大的元胞尺度来说影响要小, 因此取大的  $b$  值可以改善计算结果。

[作业]: 推导图 1.6.3.2-1 中的三角格子点阵上的重整化群变换  $p' = R(p)$  表达式, 其中端-端连接的条件是 3 个格点中的 2 个是占据态, 求临界点  $p_c$  与临界指数  $\nu$ , 与正确值 (表 1.6.1.3-1) 相比较。

### 1.6.3.4 Monte Carlo 重整化群方法

由上所述, 为了更为准确的计算临界点和指数值, 需要取更大尺度的元胞。但是, 正方格子  $b \times b$  个元胞的可能组合形态数目为  $2^{b^2}$  个。对于  $b > 7$ , 这就不是手工可以计算的的问题, 因此需要将 Monte Carlo 方法与重整化群方法结合起来, 这就是 Monte Carlo 重整化群 (MCRG) 方法。

一般来说, 可以将集团中上下端连接的几率  $R(p)$  用下式表示出来,

$$R(p | N = b^2) = \sum_{n=1}^N C_N^n p^n (1-p)^{N-n} K(n), \quad (1.6.3.4-1)$$

式中  $C_N^n = N! / (N-n)!$  是  $n$  个占据格子和  $N-n$  个未占据格子的组合数目,  $K(n)$  是由  $n$  个随机占据格子形成的上下端连接的几率。将该式与 (1.6.3.3-1) 式比较,



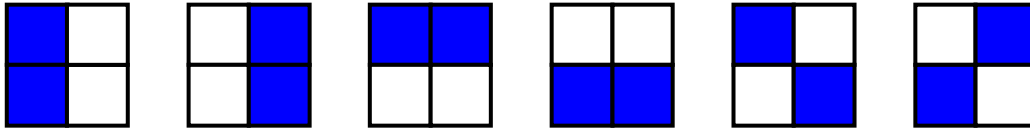


图1.6.3.4-1  $b=2$  的正方格子有2个占据格子的几种构型，其中头两个是上下端连接构型。

可知  $b=2$  情形下有： $K(1)=0$ ，因为1个占据点不可能形成上下端连接； $K(2)=2/6$ ，由图1.6.3.4-1可见，有2个占据格子的所有6种构型中上下端连接的只有2种； $K(3)=1$ ，由图1.6.3.3-1，3个占据格子的所有4种构型中均是上下端连接的； $K(4)=1$ ，4个占据格子的构型只有1种且是上下端连接的。

我们用Monte Carlo方法来计算大  $N$  值下的上下端连接几率  $K(n)$ ，某个格子的占据状态是均匀随机抽样得到的。设在空点阵上随机地添加上一个粒子使某格点成为占据态，如果不存在上下端连接路径，则在剩余的空格子中随机选择地再添加上一个粒子，产生一个新的构型。当有  $m$  个粒子添加并出现上下端连接路径之时起，对于  $n \geq m$  的粒子，每添加一个粒子时计数一次， $K(n) = K(n) + 1$ ，直至构型数目足够多甚至穷尽所有可能的构型，然后以总的构型数目将  $K(n)$  进行归一化。由于初始时每次添加粒子后都要检查是否出现上下端连接路径，因此计算是很耗时的，为了提高效率，可以在添加粒子的总数达到  $m \sim p^*N$  之后才开始检查是否出现上下端连接路径。

仍以上面  $b=2$  时的正方点阵为例。在图1.6.3.4-2中添加粒子产生的6次结果中，从左至右开始计数时，按顺序产生的结果是：

- 1)  $m=3$      $K(2)=0$      $K(3)=1$      $K(4)=1$
- 2)  $m=3$      $K(2)=0$      $K(3)=2$      $K(4)=2$
- 3)  $m=2$      $K(2)=1$      $K(3)=3$      $K(4)=3$
- 4)  $m=2$      $K(2)=2$      $K(3)=4$      $K(4)=4$
- 5)  $m=3$      $K(2)=2$      $K(3)=5$      $K(4)=5$
- 6)  $m=3$      $K(2)=2$      $K(3)=6$      $K(4)=6$

这里计数的结果是所有总构型数目的1/4，由于对称性，是否考虑剩余的构型数对总的结果没有影响。因此，当用构型数目6对  $K(n)$  进行归一化后，得到与前面一致的结果。图1.6.3.4-2中，我们还假定了每次添加粒子产生的构型是不同的，但当用Monte Carlo进行随机抽样时，有可能产生相同的构型，不过其几率很小，大量抽样后只能对  $K(n)$  的值造成小的统计涨落。当然，这里对于小的  $b$ ，我们可以穷尽所有可能的构型。但是，即使是  $b=10$  时，构型数  $= 2^{100} \approx 10^{30}$ ，因此只能用Monte Carlo方法对构型进行随机抽样，从而求得  $K(n)$  的近似解。

当  $b \geq 16$  时，(1.6.3.4-1) 式中的构型数目分布可以用Gauss分布近似，

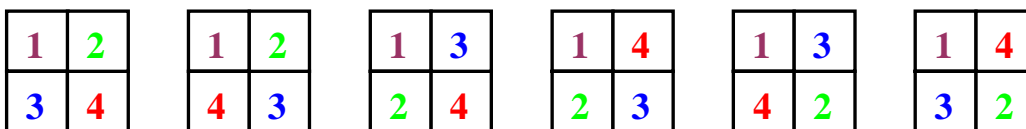


图1.6.3.4-2  $b=2$  的正方格子中  $K(n)$  的计算过程，其中的数字表示添加粒子的顺序。图中只考虑了第一个粒子出现在左上角时的情形，对于该粒子出现在其它格点的情形，结果是一样的。

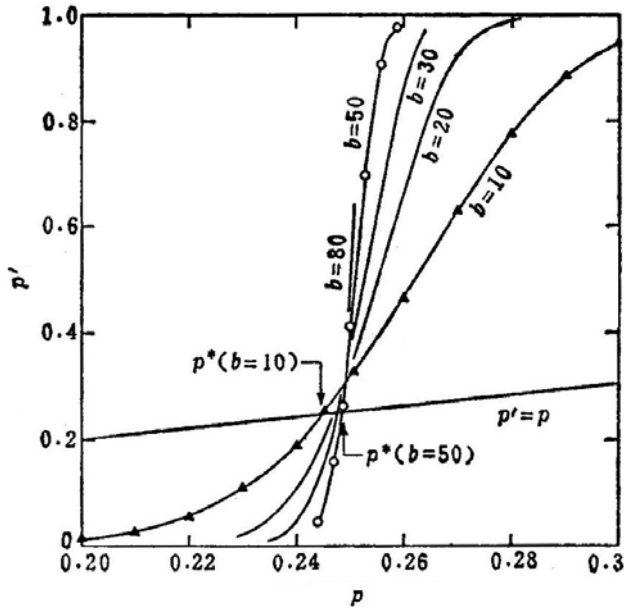


图1.6.3.4-3 三维简立方键逾渗标度行为的计算结果。

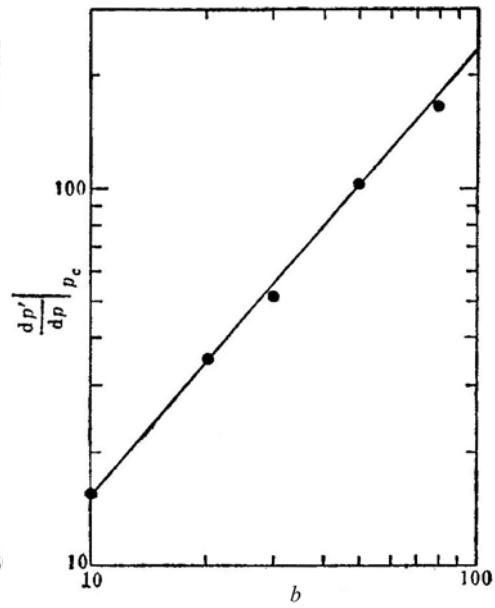


图1.6.3.4-4 由方程(1.6.3.3-6)式三维简立方键逾渗下的临界指数计算。

$$P_N(n) = C_N^n p^n (1-p)^{N-n} \approx \exp\left\{-\frac{(n-pN)^2}{2Np(1-p)}\right\} / \sqrt{2\pi Np(1-p)}, \quad (1.6.3.4-2)$$

当  $b$  值或  $N$  很大时，该分布在  $n \approx p^*N$  处有尖锐的峰值，因此，只需求此处附近的  $K(n)$  值。

图1.6.3.4-3显示了对三维简立方点阵上键逾渗的一组Monte Carlo计算结果，横轴表示  $p$ ，即在一个包含  $b^3$  条键的立方块内的联键百分率；纵轴代表发生逾渗的立方块（即有一对相对的面是连接的）的联键百分率。图中给出了5条对应于不同  $b$  值的模拟计算结果， $b=10$  时计算了2万个样本， $b=80$  时为500个。显见，当  $b$  值有限时，逾渗阈值点分布在  $p$  的一个有限范围内， $b$  值越大，求得的结果越为准确。在  $b \rightarrow \infty$  的极限下，函数  $p' = R(p)$  变成一个阶梯函数，在阈值点  $p = p_c$ ， $p'$  由  $p' = 0$  突然上升为  $p' = 1$ 。图1.6.3.4-4是相应的由方程(1.6.3.3-6)式计算临界指数时的双对数曲线，由曲线的拟合值得到的指数为  $\nu = 0.85$ ，它对应表1.6.2.5-1中  $d = 3$  时的指数值0.9。

### 1.6.3.5 座—键逾渗的重整化群

对经典逾渗的最简单的推广是座—键逾渗，其中点阵中的座和键都是随机占据的，概率分别为  $p^{bond}$  和  $p^{site}$ ，该模型是 Frisch 和 Hammersley 在1963年提出的，其后由 Stanley 等人将之作为凝胶化模型。在图1.6.1.2-2所示的管道系统的类比中，座—键逾渗过程相当于在管道网络中既有阀门在接头处，也有阀门在管子中。

在座和键均为随机占据的情况下（一般有不同的概率， $p^{bond} \neq p^{site}$ ），会出现一端或两端都是空座的占据键，在凝胶化模型中这种类型的占据键没有物理意义，它们不代表反应形成的化学键，因为后者必定是连接一对单体（即两个端点均为已占座），幸好这种键对集团连接性并无贡献，因为它们要不就是死端（一个端点是空座），要不就是完全孤立的（两个端点均为空座）。所以，它们并不影

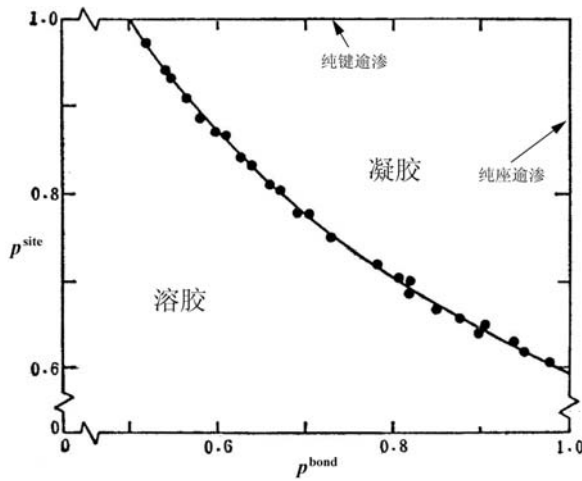


图1.6.3.5-1 正方点阵上的座—键逾渗的相图。

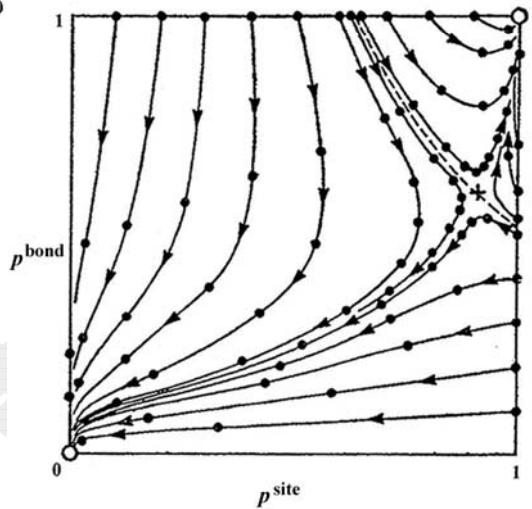
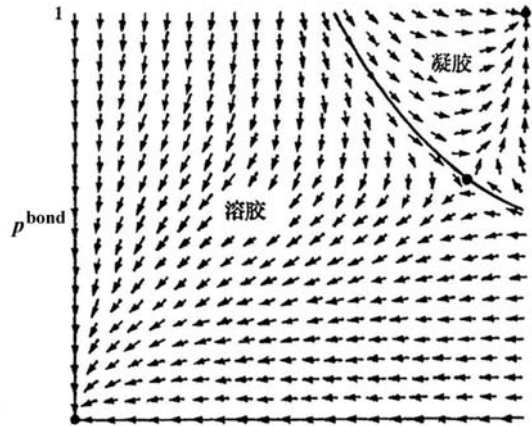


图1.6.3.5-2 正方点阵上的座—键逾渗的重整化群流向图。注意座标轴与图1.6.3.5-1不同的。上下两图分别是不同研究者得到的结果。

响无穷大集团（凝胶巨分子）是否存在。

在座—键逾渗过程中，体系的成分由两个独立变数  $p^{bond}$  和  $p^{site}$  确定，要出现逾渗通路，它们都必须足够大。每个量究竟要多大则与另一个有关，二者是相互依赖的。对于正方形点阵上的座—键逾渗，图1.6.3.5-1显示了  $(p^{bond}, p^{site})$  空间中高密度区的相图。图中的实线代表相边界，它分开逾渗区（“凝胶”）与非逾渗区（“溶胶”）。凝胶区有无穷大集团，在溶胶区集团是有限的。沿着图1.6.3.4-3的上边界直线， $p^{site} = 1$  而  $p^{bond}$  变化，这条水平线表示全部座都是已占座但只有某些键是占据键，相应于纯粹的键逾渗，而溶胶—凝胶转变曲线与它相交于  $(p^{bond}, p^{site}) = (p_c^{bond}, 1)$ ，正是键逾渗的阈值。同样，图的右边界代表纯粹的座逾渗，这条垂直线与溶胶—凝胶相边界的交点即为座逾渗阈值  $(1, p_c^{site})$ 。代表两种纯粹的极限情形的两个阈值点，被一条光滑连续的相变曲线连接起来，这一事实具有特殊的意义。

图1.6.3.5-2中的两个图均表示在正方形点阵上的座—键逾渗所对应的二维区域  $(p^{bond}, p^{site})$  的重整化群流向图（与图1.6.3.5-1不同的是两个轴交换了，且是全部的场而不是一部分）。与图1.6.3.1-2的一维流向图不同的是，座—键逾渗的流向图发生在平面上，这两个由不同作者给出的图中所示的结果彼此符合得很好，尽管表达形式稍有不同。对于正方形点阵，表1.6.1.3-1中给出的模拟计算结果是： $p_c^{site} = 0.592746$ ， $p_c^{bond} = 0.5$ 。图1.6.3.5-2中的两个图分别给出的重整化群计算结果是：(a)、 $p_c^{site} = 0.57$ ， $p_c^{bond} = 0.51$ ；(b)、 $p_c^{site} = 0.63$ ， $p_c^{bond} = 0.52$ 。

1.6.3.6 不动点

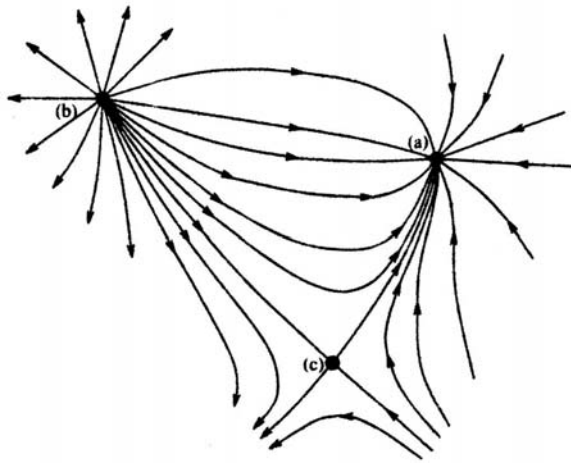


图1.6.3.6-1 三种不动点附近的流线: (a)吸引不动点、(b)排斥不动点、(c)混合不动点。

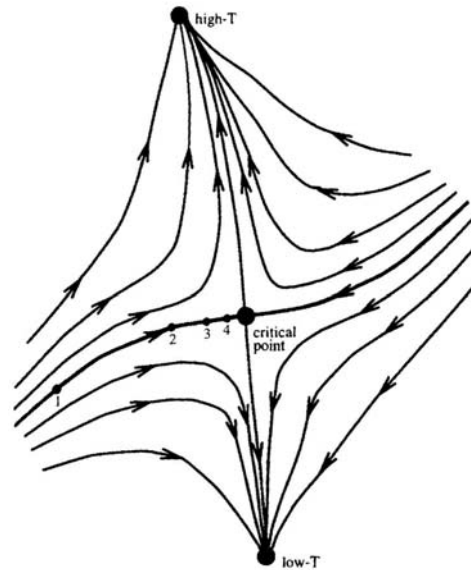


图1.6.3.6-2 二维参数空间中重整化群的流向图,粗线表示临界面,处于该面上的数字代表趋于临界点的重整化步骤。

图1.6.3.5-2的重整化群流向图有两个稳定不动点和一个临界不动点,稳定不动点在流向的两个极端点处:  $(0,0)$ 点相应于全部的键或座都是空的,  $(1,1)$ 点则都是占据的。临界不动点位于  $(p^{bond}, p^{site}) = (0.59, 0.90)$ 。如果把流向图看成是实际地球部分表面的水流图,则临界不动点就是一个鞍点,即连接纯座逾渗阈值与纯键逾渗阈值的脊线的最低点。这条脊线是地球表面的一个分水岭,这条线的南面与西面的流域均流向点阵的空不动点  $(0,0)$ ; 而北边和东边的流域则流向完全占据的不动点  $(1,1)$ 。显然,西南流域相当于相图的非逾渗区,这个区里的不断重标度将  $p$  重整化到越来越低的密度。东北流域相应于逾渗区,该区内的重整化将趋向高密度极限。和前面的情形一样,定标导至的流动是离开临界点。

在讨论标度行为时,我们曾指出,座逾渗与键逾渗属于相同的普适类(即有相同的临界指数),这是由经验建立的,即基于实验事实。图1.6.3.5-2证明,这两种基本类型的逾渗过程的临界不动点在混合过程相空间中重整化到同一个临界不动点,因此按照重整化群理论的解释,也把座逾渗与键逾渗归入相同的普适类。

一般来说,可以将不动点分成3类,即吸引不动点、排斥不动点、混合不动点(图1.6.3.6-1)。在  $p' = R(p)$  的反复迭代下,重整化群流向图中不动点的周围有不同的流线方向。顾名思义,吸引不动点是流线的“黑洞”,排斥不动点是流线的“泉眼”。图1.6.3.5-2中的临界不动点就是混合不动点,在它周围,部分流线是进入的,另一部分是流出的。由图1.6.3.3-1可以看出,当  $\lambda = dR/dp > 1$  (对于  $p = p_c$  点),它是排斥的。而在  $p = 0$  和  $p = 1$  的两端点,  $\lambda < 1$ , 是吸引的。对于像座—键逾渗这样的二维或高维参数空间,我们感兴趣的是混合不动点,图1.6.3.5-2所示的是该点附近的流线,有一个面称为临界面,它将两个不同流向区域分割开来,一部分流向是趋于一个不动点,另一部分流向是趋于另外一个不动点,因此,临界面是由趋向于混合不动点的两端流向线组成。如果用热力学的磁相变类比,则系统依赖于温度和磁场两个物理量,临界面表示相变温度  $T_c$  随磁场

的变化。

对于实空间重整化方法,一种形象化阐述其基本观点的说法是:在临界点,一切长度尺标共存!这种说法抓住了相变的重整化群理论的基本原理。因为在相变点,体系的特征长度趋于无穷,相对于原子尺度的长度而言变得任意地大(宏观的)。对于逾渗,发散的是连接性长度。正是由于存在一个发散长度尺标,才可能把实空间重整化这一优美的方法应用于逾渗。

### 参考文献

- [1] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Wiely, 1983) (中文译本: R. 泽仑(著), 黄昀等(译), 《非晶态固体物理学》, 北京大学出版社, 1988年)(第四章讨论逾渗模型)。
- [2] 赵凯华、朱照宣、黄昀, 《非线性物理导论》(讲义稿, 北京大学非线性科学中心, 1992年)。