

| | | | | | | |
|----|----|----|----|----|----|----|
| 姓名 | 学号 | 班级 | 选题 | 论述 | 结论 | 总分 |
| | | | | | | |

二维 Ising 模型的 Monte Carlo 模拟

陈洋遥 2013301020169 物理学基地二班

摘要：本文系统展示了二维 Ising 模型的 Metropolis Monte Carlo 模拟。展示了用 Monte Carlo 方法解决 Ising 模型的具体结果。通过分析在无外加磁场时不同温度下磁矩系统的涨落、宏观物理量(包括能量、磁化强度和响应函数)的变化，展示了磁性系统的二级相变，通过计算磁矩系统的关联函数，给出了磁性系统的局域强关联性对系统带来的影响。通过研究在不同温度下的磁化曲线，展示了磁性系统的一级相变和磁滞现象。本文是计算物理课程的结课作业，其中的程序和图片均放在 GitHub 上面子目录 [Final Project Monte Carlo](#) 中。

关键词：二维 Ising 模型；Monte Carlo；铁磁性；相变

一. 本文简介

Monte Carlo 方法即统计模拟方法是一种以概率统计理论为指导的数值计算方法，其在许多领域具有重要作用，‘Monte Carlo’一词即是来源于摩纳哥著名赌场的名字。在许多数学、物理问题中，我们常常遇到难以精确求解的问题，而这种问题又可以通过一定的概率模型来构造近似解，这种情况下 Monte Carlo 方法往往十分有效。Monte Carlo 方法最典型的一个应用就是用来进行数值积分。数值积分有不少方法，例如矩形法、梯形法、Simpson 法等，但是它们几乎都只能用来处理低维的积分，对于高维积分完全无能为力。Monte Carlo 方法可以克服这一缺点，对于物理问题中常常遇到高自由度的积分，其误差按中心极限定理仍然随随机试验次数衰减。因而 Monte Carlo 方法是模拟多自由度系统非常有效的方法。本次结课设计展示 Monte Carlo 方法在物理上的应用：利用其模拟二维磁矩系统(Ising 模型)随时间的演化，展示热力学系统的涨落特性、关联特性，展示 Ising 模型二级相变和一级相变。

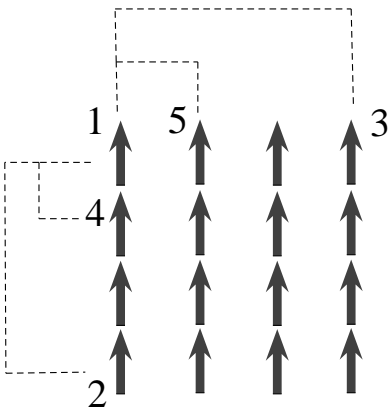
二. 二维 Ising 模型和磁性系统的相变

1. 二维 Ising 模型的 Monte Carlo 方法

自然界中存在不少铁磁物质，其特点是无需外加磁场 \mathbf{H} 就可以有显著非零的磁化强度 \mathbf{M} ，这称为自发磁化，而外磁场的存在则可以改变磁化的取向，但往往会有明显的磁滞效应^[1]，即磁性系统的状态会受历史状态显著影响。另外，铁磁性材料对于温度具有一定的敏感性，在低温时呈现铁磁性的材料在突破某一临界温度 T_c 时，可以发生顺磁相变而成为顺磁材料。经典物理的分子环流理论一定程度上可以很好地解释物质的顺磁性^[2]，但对于物质铁磁性质以及与之有关的相变过程则完全无能为力。事实上，量子力学表明物质的铁磁性来源于电子自旋磁矩^[3]，这些磁矩之间有着非常强的相互作用，形成强关联系统，正是这种强关联，导致了低温下铁磁物质的自发磁化。

Ising 模型是研究铁磁系统的铁磁性及其有关相变过程的十分成功的模型。Ising 模型虽然十分简单，但其解析解却十分难以得到，20 世纪 40 年代 Onsager^[4]首次解析地得到无外加磁场情况下二维 Ising 模型的解析解，Onsager 解是统计力学中短程关联系统的第一个可以相变的解析解，在此之前人们一直认为统计力学无法预言相变。但直至今日，有外加磁场的二维 Ising 模型，以及更高维度的 Ising 模型的严格解析解仍未能得到。其他的处理方法，例如平均场方法^[5]等，虽然在一定程度上可以语言 Ising 模型的一些性质，包括预言顺磁相变的温度等，但往往与实际结果有巨大差异，特别是在相变点附近，由于平均场模型忽略的局部的强关联性，因而与实际情况大相径庭。Ising 模型描述的既然是热力学随机系统，那么用 Monte Carlo 方法则会有巨大的优越性。下面就来展示 Monte Carlo 方法对于二维 Ising 模型求解。

二维 Ising 模型假定有 $L \times L$ 个全同磁矩 $s_i = \pm 1$ 分布在正方形二维格点上，



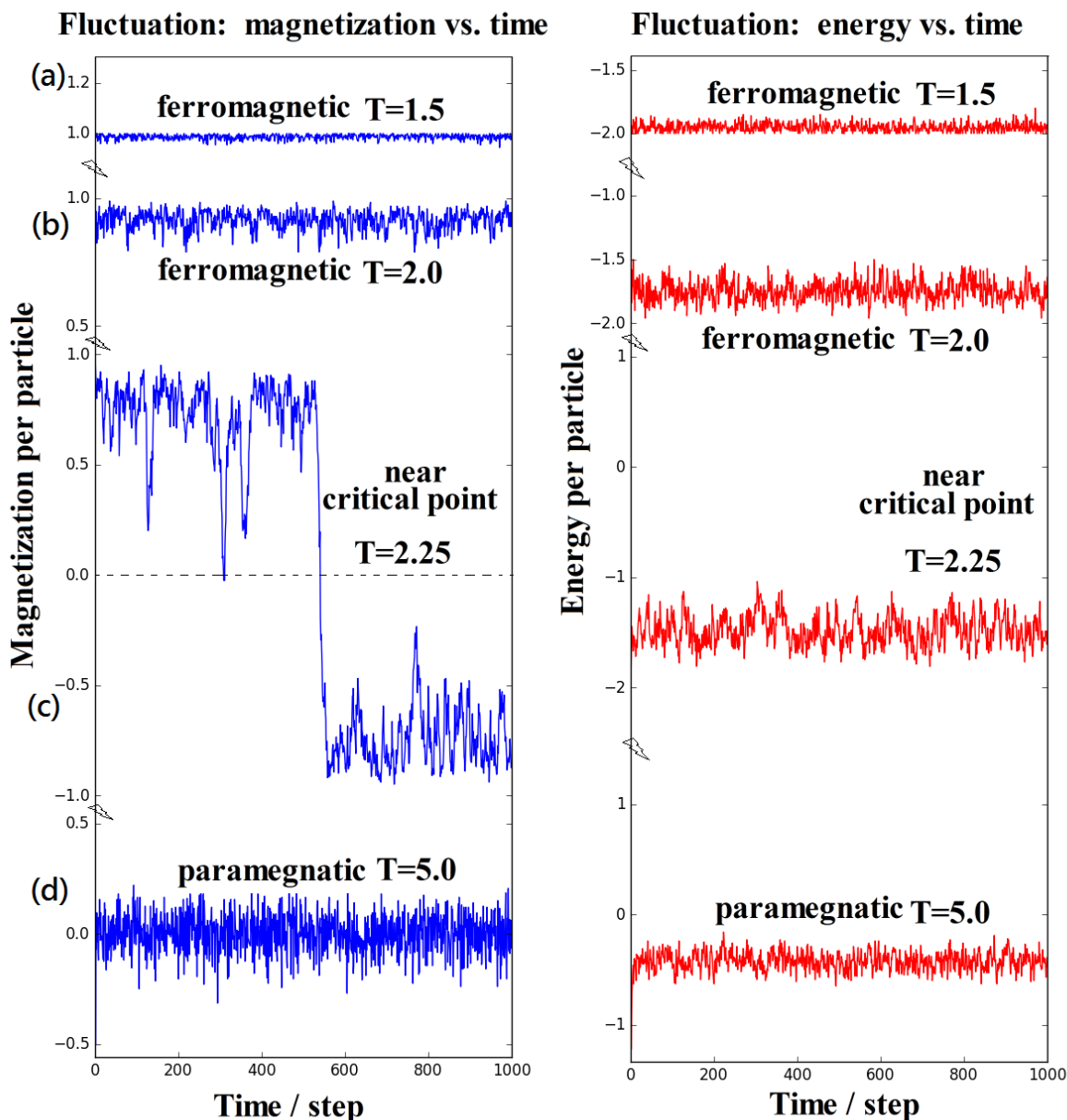
Figure(1) 周期性边界条件示意

考虑最近邻磁矩的相互作用和每个磁矩与外场 \mathbf{H} 的相互作用，则系统能量可以写为

$$E = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i \quad [\text{Ising 模型能量}] \quad (1)$$

其中第一项要对所有相邻磁矩求和。假设该系统与一个温度为 T 的定温热库接触，则系统微观态的分布服从 Boltzmann 分布，即微观态按能量分布为

$$P_s = \frac{1}{Z} \exp\left(-\frac{E_s}{kT}\right) \quad [\text{Boltzmann 分布}] \quad (2)$$



Figure(2) 二维 Ising 模型磁化强度、能量的涨落。 本图展示了 20×20 格子的二维 Ising 模型宏观变量的涨落，为简单起见，这里取 Boltzmann 常数 $k=1$ ，磁矩之间的耦合强度 $J=1$ ，外磁场 $H=0$ ，时间单位是一次 Monte Carlo 扫描。这里展示在不同温度下，每个粒子的平均磁化强度、能量随时间的涨落情况。图(a)当温度 T 较低时，磁化强度 M 和能量 E 均在一个稳定值附近变化，涨落很小，由于自发磁化，磁矩几乎全部同向，因而每个粒子平均磁化强度就是 $M=1$ ，而每个粒子平均来讲与周围的 $4/2=2$ 个相互作用，因此平均能量 $E=-2$ 。图(b)所示温度 T 升高一些以后， M 和 E 涨落更明显。图(c)展示在 Ising 模型的临界温度附近，磁矩系统的总磁矩可以经历很大的翻转，此时磁化强度、能量涨落很大。图(d)所示温度超过临界温度后，宏观量涨落又变小了一些。

为了模拟该分布，我们借助所谓的 Metropolis 算法，遵循以下步骤来生成近似于 Boltzmann 分布的分布：

➤ 初始化系统磁矩取向，设定温度 T 、磁场 H 等的值。

- 随机让一个磁矩翻转，计算系统总能量的改变 ΔE 。
- 如果 $\Delta E > 0$ ，接受此次翻转；若 $\Delta E < 0$ ，令 Boltzmann 因子为这样的取值 $P = \exp(-\Delta E / (kT))$ ，并生成一个在 $[0,1]$ 均匀分布的伪随机数 ξ ，若 $\xi < P$ 则接受翻转，否则拒绝翻转。
- 重复此步骤若干次。就得到系统随时间的演化。

实际程序设计过程中，为了设计方便，也使得磁矩系统演化得更像实际系统，还需要注意下面的问题

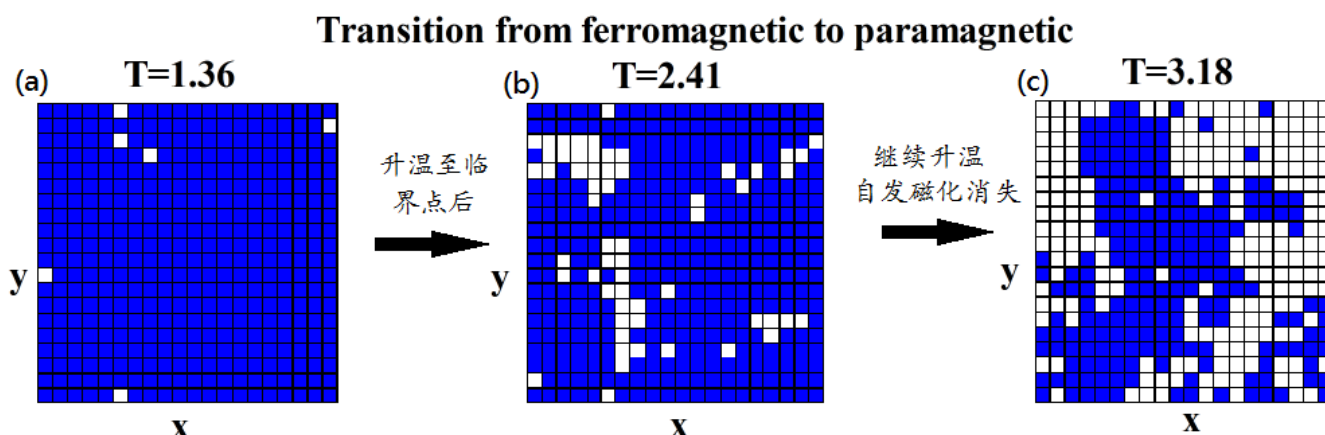
- 边界条件的设定：一般有固定边界条件、自由边界条件、周期边界条件等类型。这里为了尽可能消除边界对有限大小系统的影响，采取周期性边界条件。如 Figure(1)所示，例如磁矩 1 的临近磁矩为 2~5。但是后面将看到，即使这样，有限大小的系统仍然会与真实系统有巨大差别，一是相对涨落明显，而是相变时不如实际系统剧烈。
- 初值的设定影响系统达到平衡的时间，这里取初始磁矩全部为+1。在 Monte Carlo 步骤中，本来应该随机选取一个磁矩翻转，这里不妨对每一个磁矩挨个翻转，并且对所有磁矩来一次全盘扫描称为一个 Monte Carlo 时间。

按这样的做法，可以证明，只要伪随机数足够随机，那么系统达到平衡后，两个微观态取值几率确实是 Boltzmann 分布^[5]，即 $P_1 / P_2 = \exp\left(-\frac{E_1 - E_2}{kT}\right)$ 。下面就着手来用 Monte Carlo 算法模拟 Ising 模型随时间的演化，并展示宏观量的涨落和系统在一级、二级相变过程中的行为。

2. 无外磁场时的情形：涨落、二级相变和关联函数

我们设置合理的系统大小后，就开始让系统按 Monte Carlo 步骤开始演化，每经过一个 Monte Carlo 时间，就让计算机记录系统的总能量、总磁矩，对每个磁矩求平均，最后给出这两个量随时间的演化。相应的程序可见 GitHub 上 [Ising fluctuation.py](#)。Figure(2)展示了二维 Ising 模型宏观量随时间的涨落过程。可以见到，零外磁场下二维 Ising 模型的特点是：在低温下拥有小涨落、稳定而非零的磁化强度，这是自发磁化效应，是由于磁矩系统的强关联特性引起的。当系统由强关联带来附加能量时，按照 Boltzmann 分布，系统由大几率处在能量较低的状态，对于 Ising 模型，也就是磁矩相互平行的状态。当温度进一步升高时，系统涨落变得明显，尤其是到达临界温度附近是，系统涨落强烈，而且可以从自旋平行向上翻转到平行向下的状态，当温度超过临界温度后，自旋取向相当随机，总磁矩和总能量都接近是 0 了，但是涨落反而小一些。这种临界温度处的大涨落同样是由于系统的强关联所引起，后面的关联函数会展示这一点。

Ising 模型能够解释磁性系统的自发磁化现象是其一大成功点，下面的模拟还表明，Ising 模型能够发生二级相变。上面的 Figure(2)已经显示，当磁矩系统接近临界温度时，会由显著的自发磁化变得顺磁，磁矩取向变得更随机、涨落更大，即产生所谓的顺磁相变。将上面磁矩系统在不同温度下的情况绘制成直观的二维图形如 Figure(3)所示。这里深色的方块表示向上的磁矩，浅色反之。相应的程序可见 [ising transition.py](#)。可以发现，磁矩系统在低温时具



Figure(3) 二维 Ising 模型的顺磁相变。 本图展示了 20×20 格子的二维 Ising 模型的顺磁相变过程，为简单起见，这里取 Boltzmann 常数 $k = 1$ ，磁矩之间的耦合强度 $J = 1$ ，外磁场 $H = 0$ 。将 400 个磁矩画在平面上，深色表示磁矩 $s = 1$ ，浅色则相反。由前面的讨论可知临界温度 $T_c \approx 2.2$ ，图(a)所示当温度低于临界温度时，磁矩绝大部分是取向相同的，显示出铁磁性。图(b)所示当温度略超过临界温度后，磁矩无序性开始增加，有很多磁矩翻转了过来。图(c)所示当温度进一步升高后，磁矩取向的随机性更高，磁矩正反向的数目平分秋色，系统宏观不显磁性，即发生了顺磁相变。

有明显的自发磁化特性，磁矩的取向高度一致，偶有很小的涨落。但是达到临界温度之后则有明显的变化，开始有大量的磁矩随机翻转，这种随机翻转最终将导致铁磁性的消失。当温度进一步升高时，翻转变得很容易了，这时向上的磁矩和向下的磁矩个数几乎相等，整个系统不显磁性，发生了二级相变。但是后面的讨论将会看到，尽管磁矩的平均值接近是 0，但是能量的平均值仍然是非 0 负数，这又来源于系统强关联导致的“局部磁化”。

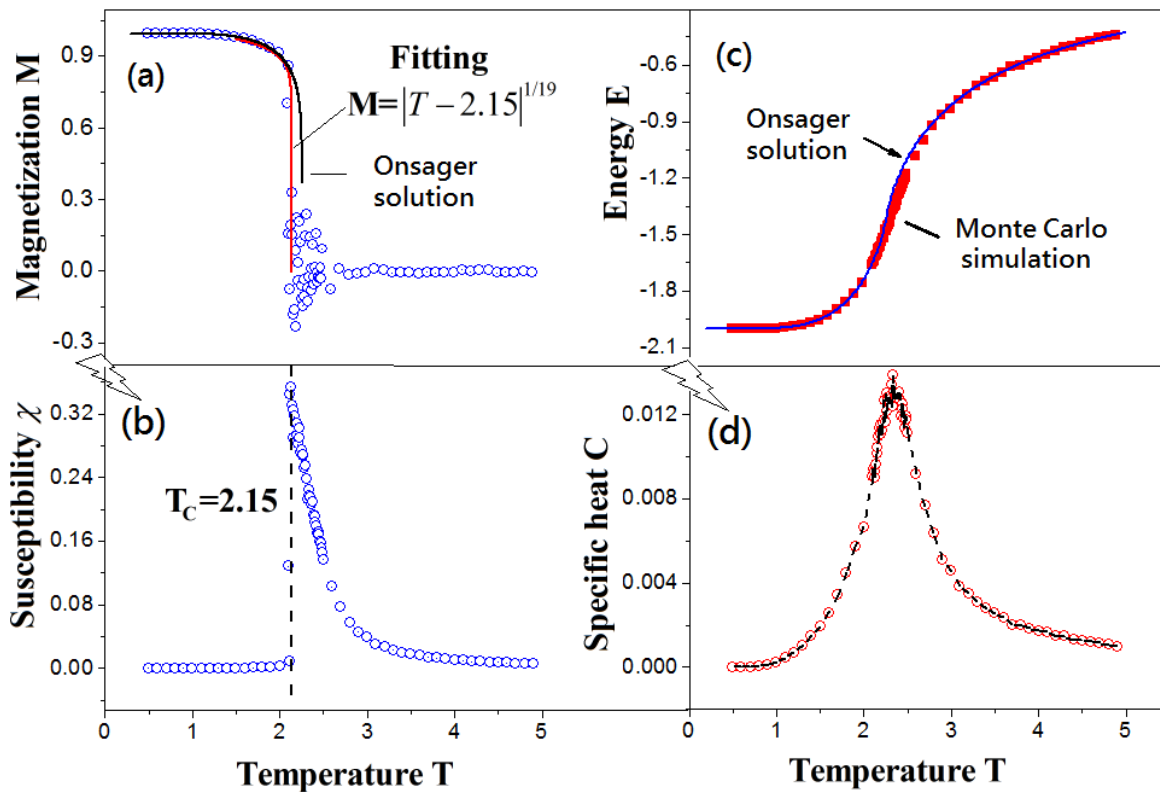
Ising 模型在临界温度附近的相变伴随着相关宏观物理量的急剧改变。下面展示 Ising 模型在无外磁场时二级相变时物理量的行为。事实上，Onsager 于 1944 年即给出了这种情况的严格解析解^[4]，导出了二维 Ising 模型能量和比热的表达式，C. N. Yang 则于 1952 年给出了相同系统磁化强度和磁化率的解析表达式。Onsager 解十分复杂，这里只展示解析结果。二维 Ising 模型矩形格点临界温度为

$$\sinh\left(\frac{2J}{kT_c}\right) = 1 \quad [\text{Onsager solution, 临界温度}] \quad (3)$$

数值的寻找上式的根，可得临界温度约为 $T_c = 2.269J/k$ 。而能量的表达式则为

$$E = -2NJ \tanh(2\beta J) - NJ \frac{\sinh^2(2\beta J) - 1}{\sinh(2\beta J) \cosh(2\beta J)} \left[\frac{2}{\pi} K_1 \left(\frac{2 \sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} \right) - 1 \right] \quad [\text{Onsager solution, 能量}] \quad (4)$$

二级相变过程中相关物理量的变化



Figure(4) 二维 Ising 模型的顺磁相变过程中相关物理量的变化。 本图展示了 10×10 格子的二维 Ising 模型在温度升高过程中的顺磁相变过程，为简单起见，这里取 Boltzmann 常数 $k = 1$ ，磁矩之间的耦合强度 $J = 1$ ，外磁场 $H = 0$ ，每个温度都经历了 5000 Monte Carlo 时间的演变。可以发现系统在临界温度 $T_c \approx 2.15$ 物理量有迅速变化。前面已经提到，由于系统有限大小的影响，这里的相变看起来不是突变，反而像是连续的。图(a)展示磁化强度随温度的变化，低温时磁矩取向几乎完全同向，因而有近似为 1 的磁矩，在临界温度附近磁矩按 $1/19$ 幂指数衰减。图(b)展示磁化率 $\chi = \text{var}(M)/(kT)$ (即磁矩的涨落)随温度的变化，在临界温度附近呈现非常尖锐的峰。图(c)展示每个粒子平均能量随温度的变化，低温时每个粒子平均和 2 个粒子相互作用，能量为 -2，能量同样在临界温度附近有巨大变化，但是过临界温度后显然没有迅速变到 0，后面将会提到这是由于系统的强关联性导致的。图(d)展示热容 $C = \text{var}(E)/(kT^2)$ 随温度的变化，同样在相变过程中有剧变。

需要注意的是，能量在临界温度附近的渐进行为是 $(T - T_c) \ln |T - T_c|$ ，因而能量是连续的，不发生突变，然而磁矩的解析解则为

$$M = \begin{cases} \left(1 - \sinh^{-4}(2\beta J)\right)^{1/8}, & T < T_c \\ 0, & T > T_c \end{cases} \quad [\text{Onsager solution, 磁矩}] \quad (5)$$

而能量和磁化强度对温度的导数则分别就是比热和磁化率，这里略去。但要强调的是，尽管临界温度处能量是连续的，但是比热却是发散的。磁矩在临界温度附近的渐进行为是 $1/8$ 幂次的，这与我们的模拟结果有一些差异，因为我们模拟的是有限大小系统。

我们用 Monte Carlo 方法模拟 Ising 模型在二级相变过程中相关物理量的变化，相应的程序可见 [Ising_magnetic_energy.py](#)，我们展示模拟结果如 Figure(4)所示。很明显在临界点附近诸物理量都有明显的变化。不过很显然能量在相变过程中是连续的，过相变点后也不会立即变化到 0。能量之所以在相当大的温度范围内仍然是负的，是因为系统关联很强，迫使系统按 Boltzmann 分布取较低的能量。然而磁化强度的行为则很不同，其在临界温度附近衰减很快，并且超过临界温度之后几乎停留在 0 位置附近。另外，根据 fluctuation dissipation 理论，系统涨落和响应函数有如下关系：

$$C = \frac{\text{var}(E)}{kT^2}, \quad \chi = \frac{\text{var}(M)}{kT} \quad [\text{比热和磁化率}] \quad (6)$$

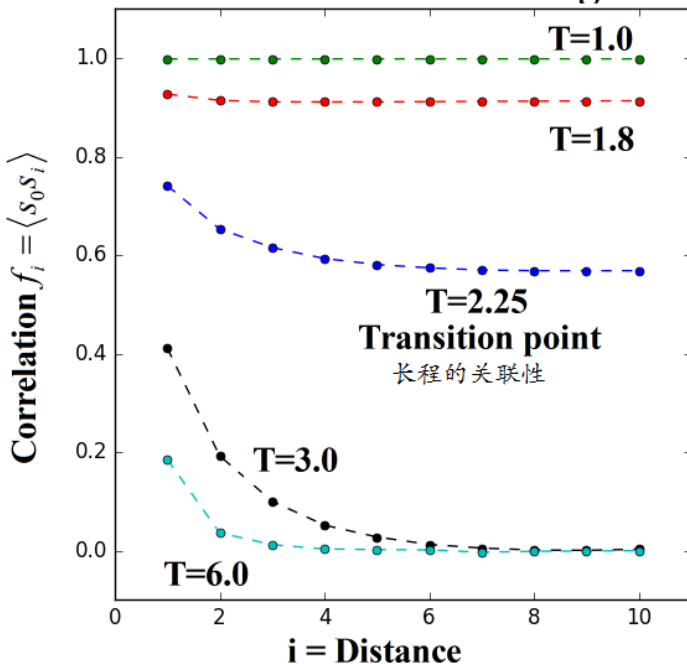
因而，利用涨落即可求得响应函数比热和磁化率，也分别展示在 Figure(4)中。需要注意的是，这里磁化率确实发生了明显的突变，有非常尖锐的峰，但是比热却没有发生明显的突变，我们研究的是有限大小的系统，因而原本应该发散的量变得不发散了，这是一种有限模拟中难以克服的困难。

前面提到，磁矩系统的强关联特性决定了系统的自发磁化和相变附近的特性。为了定量描述系统的关联程度，引入关联函数^[5]

$$f_i = \langle s_0 s_i \rangle = \langle s \rangle^2 + \langle (s_0 - \langle s \rangle)(s_i - \langle s \rangle) \rangle \quad [\text{correlation function}] \quad (7)$$

上式最右边一项意义明显，其表明的是自旋之间涨落的关联程度。在临界温度之上 $\langle s \rangle$ 迅速衰减到 0，因此若关联函数在长程内显著非负，就会导致粒子自旋在一定局域范围内倾向于相同，使得粒子自旋耦合带来的能量为负值。但是，不同局域范围自旋取向可以相反(类似于磁畴)，这样就保证了总的磁化强度是 0。这就是当温度高过临界温度以后，能量还能保持是负值的原因。我们在长时间内按照关联函数的定义求关联函数的平均值。相应的程序可见 [Ising_correlation.py](#)，我们展示计算结果于 Figure(5)中，可以看到：

Correlation function of 2d Ising model

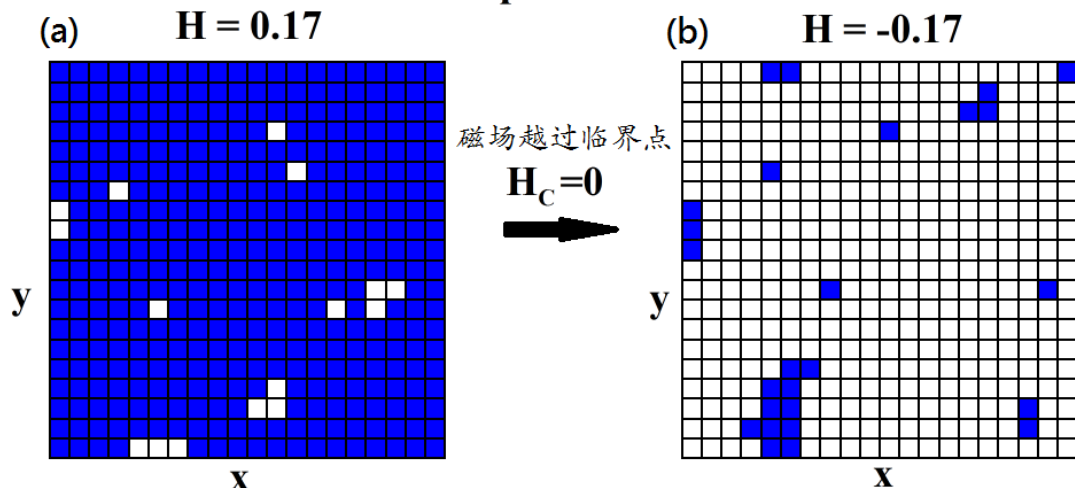


Figure(5) 二维 Ising 模型的关联函数。 本图展示了 20×20 格子的二维 Ising 模型的关联函数在一定温度下随磁矩之间距离的变化。为简单起见，这里取 Boltzmann 常数 $k = 1$ ，磁矩之间的耦合强度 $J = 1$ ，外磁场 $H = 0$ ，每个温度下都进行了 2000 个 Monte carlo 时间的模拟。关联函数

$$f_i = \langle s_0 s_i \rangle = \langle s \rangle^2 + \langle (s_0 - \langle s \rangle)(s_i - \langle s \rangle) \rangle = c_1 + c_2 e^{-\eta/\xi}$$

显示了磁矩系统的关联特性，其中 ξ 是关联距离。可以定性给出物理量涨落在临界温度附近变得发散的原因。当温度较低(例如 1.0 和 1.8)时，磁矩之间的关联几乎就是 1，十分强大，但由于此时每个磁矩涨落都非常小，因而总涨落并不明显。当温度升高到临界温度附近时(例如 2.25)，系统关联仍然是长程的、很强的，此时每个磁矩涨落又很大，因而总涨落十分巨大。当温度更高时，尽管每个磁矩涨落很明显，但是关联函数随距离迅速衰减，关联距离变得很短，因而诸粒子涨落有所抵消，总涨落变

First-order phase transition



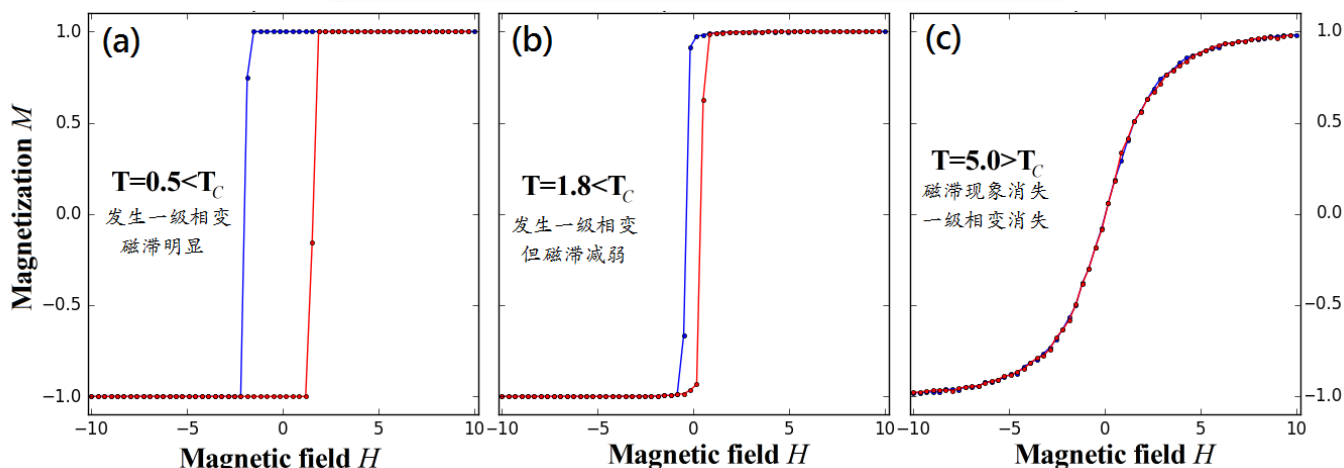
Figure(6) 二维 Ising 模型的一级相变。本图展示了 20x20 格子的 Ising 模型在温度 $T = 2.1$ 低于临界温度时，当外加磁场 H 发生变化时的一级相变过程，磁场每次变化，都给予 20 个 Monte Carlo 时间让其充分变化。图(a)展示当磁场强度 $H = 0.17$ 是很小的正值时，磁矩仍然绝大多数是正向的。图(b)展示一旦磁场强度越过 0 点，变成 $H = -0.17$ ，则磁矩马上大规模翻转，变成几乎全是反向的。

- 关联函数具有指数递减特性，低温下关联程十分长，且关联强度接近 1，因此整个自旋系统趋近于相同的自旋取向，显示自发磁化。
- 在温度接近临界温度以后，关联强度稍弱，但是关联程仍然不短，因此导致所谓“局部磁化”，产生类似于磁畴的特征，有负的能量和因涨落关联性带来的强大的涨落。
- 在温度超过临界温度以后，关联程变得很短，因此诸磁矩涨落之间关联性变小，总的系统涨落反而有所降低。

3. Ising 模型的一级相变

Ising 模型中有温度、磁场强度两个可调的环境参数，这使得 Ising 模型不仅可以展示二级相变，还可以展示一级相变。和二级相变相比，一级相变往往变化更突然，没有涨落的变大来预兆一级相变的发生。我们通过考虑不难得到：磁矩系统低温下自发磁化，但是自发磁化的取向在没有外磁场时应该是随机的(两个取向是平等的稳态)，但是一旦加上外磁场，则沿外磁场的自发磁化成为真正的稳态，相反的自发磁化取向变成亚稳的，可以想见，磁矩只要经历充分长的时间，一定会翻转到与外磁场相同的方向；倘若外磁场一旦反向，则磁矩会再次翻转，此即所谓一级相变。值得一提的是，由于亚稳态仍然存在，因此系统越过从亚稳态翻转到稳态需要越过一定的势垒，这往往就

First-order phase transition and hysteresis loop



Figure(7) 二维 Ising 模型的一级相变和磁滞回线。本图展示了 20x20 格子的 Ising 模型在不同给定温度时，在磁场强度变化时发生的一级相变过程，同时展示磁滞现象。为简单起见，这里取 Boltzmann 常数 $k = 1$ ，磁矩之间的耦合强度 $J = 1$ ，磁场强度的每一次变化都间隔 20 个 Monte Carlo 时间，磁化强度是这 20 个时间的平均值，以确保涨落不会太大。图(a)所示当温度比临界温度低很多时，系统相变十分突然，磁化强度曲线有很陡的变化。且磁场由负变正和由正变负时，相变位置不一样。这是由于系统存在亚稳态即一定的能垒，阻止了相变的发生。图(b)展示温度升高一些时，由于磁矩翻转更加容易，因此磁滞回线包围面积变小，但是两次一级相变仍然存在。图(c)展示温度进一步升高，超过临界温度后，一级相变消失(这是由于自发磁化消失导致的)，磁化强度曲线变得连续，且磁滞现象变得可以忽略。

会带来磁滞效应。而且可以预见，温度越高时，热运动剧烈，则磁矩应该更容易越过势垒，从而磁滞效应应该减弱，另一方面，温度升高过临界温度以后，由于自发磁化现象消失，预计一级相变也会消失。下面就通过 Monte carlo 方法模拟 Ising 模型的一级相变问题。相应的程序可见 [Ising first order.py](#)。我们在 Figure(6)中展示了温度低于临界温度时，磁场强度越过零点时磁矩系统的翻转。可以发现，磁矩系统在磁场强度越过零点时，翻转非常迅速。除了偶有的涨落以外，磁矩大部分翻转。可见 Ising 模型内确实存在一级相变。为进一步研究一级相变与温度的关系，以及磁滞现象，我们改变温度参数，在不同的温度下作出磁场强度变化时磁矩系统的磁化强度随之的改变。相应的结果展示在 Figure(7)中。可以发现

- 一级相变对于温度是敏感的，当温度低于临界温度时，可以有一级相变，但是温度高于临界温度以后，磁化强度不再跃变，取而代之的是缓慢的连续变化，一级相变消失。
- 磁滞现象也对温度敏感，低温下磁滞现象明显，温度升高之后，磁滞现象有所减弱，温度超过临界温度以后，磁滞现象已经十分微弱。

三. 结论

本文系统展示了二维 Ising 模型的 Metropolis Monte Carlo 模拟。阐述了用随机方法解决 Ising 模型的具体思路。通过分析在无外加磁场时不同温度下磁矩系统的涨落、宏观物理量(包括能量、磁化强度和响应函数)的变化，展示了磁性系统的二级相变，通过计算磁矩系统的关联函数，给出了磁性系统的局域强关联性。通过研究在不同温度下的磁化曲线，展示了磁性系统的一级相变和磁滞现象。

我们发现，Ising 模型确实一定程度上可以模拟磁性系统的自发磁化和相变特性。二维 Ising 模型在历史上作为局域强关联系统第一个由精确解的系统，对于统计力学的发展具有至关重要的作用。

四. 参考文献

- [1] 赵凯华, 陈熙谋. 电磁学[M]. 高等教育出版社, 2011.
- [2] Kittel C. Introduction to solid state physics[M]. Wiley, 2005.
- [3] Herrera J M, Bachschmidt A, Villain F, et al. Mixed valency and magnetism in cyanometallates and Prussian blue analogues[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2008, 366(1862): 127-138.
- [4] Baxter R J. Exactly solved models in statistical mechanics[M]. Courier Corporation, 2007.
- [5] Giordano N J, Nakanishi H. Computational physics[M]. Pearson Education India, 2006.