

集团更新算法求解二维 Ising Model

李柏轩 20300200004

November 24, 2022

Abstract

Ising Model 是统计物理中描述铁磁相变的基本模型, 2-D Ising Model 可以使用 Markov Chain Monte Carlo 方法 (MCMC) 进行求解。本文使用 MCMC 方法中的 Wolff 算法对 2-D Ising Model 进行采样, 继而使用 Binder Cumulant 和 Data Collapse 方法获取了该模型在热力学极限下的临界温度 $T_c = 2.27$, 并验证了临界指数的理论值 $\nu = 1, \eta = \frac{1}{4}$ 。

1 引言

Ising Model 是一个旨在描述铁磁相变的低能有效理论。模型假设正方晶格上排布着某种粒子, 粒子存在自旋属性 $\sigma = \pm 1$, 假设只考虑最邻近自旋之间的相互作用, 则体系能量表示为

$$E = \sum_{\langle ij \rangle} J \sigma_i \sigma_j \quad (1)$$

体系配分函数可表示为

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta \sum_{\langle ij \rangle} J \sigma_i \sigma_j} = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j} \quad (2)$$

理论上已经证明, 1-D Ising Model 不能给出有限温下的铁磁相变, 而至少要二维模型才能给出相变。本文采用经典 MC 方法中的 Wolff 算法对模型进行采样, 并采用有限尺寸分析方法, 得到了热力学极限下的相变临界温度 $T_c = 2.27$, 以及验证了临界指数的理论值 $\nu = 1, \eta = \frac{1}{4}$ 。

2 计算方法

2.1 经典 Monte Carlo 算法

统计物理的核心问题即为求概率分布的统计平均问题, Monte Carlo 算法通过随机抽样的方式给出统计平均的估计值。随机抽样的方法有很多, 由于不知道系统的平衡分布, 我们无法直接抽样, 于是选择 Markov Chain Monte Carlo 方法 (MCMC)。Markov Chain 是一个随机过程序列, 从一个状态到另一状态的转移概率 $p(X_i \rightarrow X_j)$ 只依赖于当前状态。我们观察到的宏观现象是系统在一段时间内演化的时间平均; 由各态历经假设, 我们认为时间平均等于相空间状态的系综平均。而 MCMC 的宗旨是将系综平均再还原为“时间”平均 (对演化过程求平均)。由于我们的低能有效模型很多时候失去了

系统的动力学信息，我们就需要构造一个满足 Markov Chain 收敛条件，即各态历经和细致平衡条件的动力学过程。其中 Metropolis 算法和 Wolff 算法是 MCMC 方法的两个代表。

Metropolis 算法是一种单自旋翻转方法。其一步演化只随机翻转一个自旋 σ_i ，转移概率为

$$p(\sigma_i) = e^{2K \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j} \quad (3)$$

然而由于该算法模拟了真实系统演化的特性（局域更新），与真实系统属于同一个动力学普适类，在临界点处的自关联时间 $\tau_A \sim L^z$ ，其中 $z = 2.15$ 为该普适类的动力学临界指数，故体系尺寸越大自关联时间越长，称为临界慢化现象。为了打破临界慢化，必须设计出不属于该普适类即非局域更新的动力学过程。集团更新算法是非局域更新的一个典型例子，而本文使用的 Wolff 算法是集团更新算法的一种。

Wolff 算法伪代码如 Alg.1 所示。其中为每两个自旋间的 bond 指定了一个双取值参数 $\tau_{ij} = 0, 1$ ，则体系配分函数可以写作

$$Z = \sum_{\{\tau_{ij}\}} p^{n(\tau=1)} (1-p)^{n(\tau=0)} \sum_{\{\sigma_i\}} \delta(\{\sigma_i\} \text{与} \{\tau_{ij}\} \text{相容}) \quad (4)$$

其中 $p = 1 - e^{-2K}$ ，所以按照 $p = \max\{1 - e^{-2K\sigma_i\sigma_j}, 0\}$ 的概率选择是否激活 bond，能够满足 Markov Chain 的细致平衡条件，最终收敛到平衡分布。

2.2 有限尺寸效应分析

根据已有结论，对称性破缺导致的相变只有在热力学极限下才可能出现，而数值模拟只能模拟有限体系，于是如何从有限体系的模拟中提取热力学极限下的临界温度、临界指数等参数就成为了我们需要考虑的问题。本文主要进行了两个方面的有限尺寸效应分析：提取临界温度的 Binder Cumulant 分析以及验证 2-D Ising Model 临界指数 ν, η 的 Data Collapse 分析。

考虑无量纲数 $\frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2}$ ，其中 m 为体系磁化率。低温时体系处于铁磁态，各格点有相同自旋，即 $\frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} = \frac{\langle m \rangle^4}{(\langle m \rangle^2)^2} = 1$ ；而高温时体系处于顺磁态，各格点自旋在平衡态附近 Gaussian 涨落，于是由 Wick 定理， $\langle m^4 \rangle = 3\langle m^2 \rangle^2$ 。定义

$$U(T) = \frac{3}{2} - \frac{\langle m^4 \rangle}{2\langle m^2 \rangle^2} \quad (5)$$

不同尺寸下的 $U(T)$ 曲线交点即为热力学极限下的相变温度。

热力学极限下一些宏观热力学量在相变点处会出现幂律发散，但有限体系无法产生发散，于是可以用来拟合确定临界指数的数据点很少。为了充分利用数据点，考虑两个无量纲数的函数关系 $ML^{\frac{D-2+\eta}{2}} = f(tL^{\frac{1}{\nu}})$ ，其中 M 为体系总磁矩， L 为晶格边长， D 为体系维度数， $t = \frac{T}{T_c} - 1$ 。选择合适的 ν, η ，则不同尺寸下该函数图像会重合在一起，即可得到热力学极限下的临界指数。

3 模拟结果

采用 Wolff 算法对模型进行计算。其中 Fig.1 展示了 $T = 2, L = 10$ 时集团更新的相邻两步，可以看到左图右侧自旋为 -1 的一个集团被翻转过来。

Algorithm 1 Wolff Algorithm

Input: Lattice size L , iteration number n , and coupling parameter K

Output: Samples S of the considered ensemble.

```
1: Initialize lattice  $S$  as a 2-D array.
2: while iteration number  $< n$  do
3:   Choose a start point  $i \leftarrow i_0$ .
4:   Add  $i$  into cluster list  $C$  and wait-to-be-activate list  $W$ 
5:   while length( $W$ )  $\neq 0$  do
6:     for  $i \in W$  do
7:       for point  $j$  in all four directions do
8:         if  $j \notin C$  then
9:           Try activating  $\langle ij \rangle$  at the probability  $p$  of  $\max\{1 - e^{-2K\sigma_i\sigma_j}, 0\}$ 
10:          if  $\langle ij \rangle$  is activated then
11:            Add  $j$  into cluster list  $C$  and the new wait-to-be-activate list  $W_1$ 
12:          else
13:            continue
14:          end if
15:        end if
16:      end for
17:    end for
18:     $W \leftarrow W_1$ 
19:  end while
20:   $S[i \in C] \leftarrow -S[i \in C]$ 
21:  Empty  $C$ 
22: end while
```

得到 Binder Cumulant 和 Data Collapse 结果如 Fig.2所示。由 Fig.2左图得 $T_c = \frac{1}{K_c} = 2.27$ ，将 $T_c = 2.27, \nu = 1, \eta = \frac{1}{4}$ 代入 $ML^{\frac{D-2+\eta}{2}} = f(tL^{\frac{1}{\nu}})$ 中得到 Fig.2右图，由图可知数据跌落效果很好，验证了 2-D Ising Model 的临界指数。

4 方法评价

本文通过与 Metropolis 算法对比来评价 Wolff 算法的效果。Fig.2所示结果运行时设置 $\tau_t = 2000, \tau_A = 1$ ，采样个数为 2000 个。而 Fig.3所示结果为 Metropolis 算法对相同模型给出的计算结果，设置 $\tau_t = 5 \times 10^5, \tau_A = L^2$ ，采样个数为 5×10^5 个。

两相对比可以看到：

- (1) Metropolis 算法得到的两条曲线都并不像 Wolff 算法那样光滑（即使前者的热化时间 τ_t ，自关联时间 τ_A ，采样点数都远大于后者），在 Binder Cumulant 结果中难以找出曲线交点，在 Data

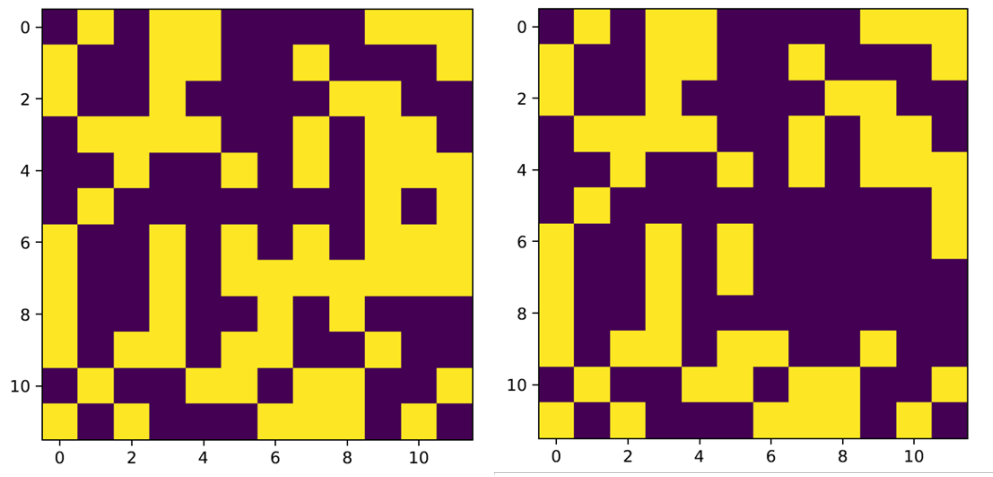


Figure 1: $T = 2, L = 10$ 时集团更新的相邻两步（格点上为自旋，深色为 1，浅色为-1），右图是左图的后续一步

Collapse 结果中难以判断曲线是否重合；

- (2) 特别地，可以看出在由 Wolff 算法得到的临界温度附近，Metropolis 算法得到的曲线不光滑程度显著高于曲线其它部分，这也从侧面印证了局域更新算法的临界慢化现象，即在临界点附近，Metropolis 算法现在选取的 $\tau_t = 5 \times 10^5, \tau_A = L^2$ 仍然不够大。

临界慢化现象的演示。前文提到的自关联时间 τ_A 定义如下：

$$A(t) = \langle M(t=0)M(t=0 + \Delta t) \rangle - \langle M \rangle^2 = \Delta M^2 e^{-\frac{t}{\tau_A}} \quad (6)$$

画出 $T = \frac{1}{K} = 3$ 时 Metropolis 算法和 Wolff 算法的自关联函数 $A(t)$ 的曲线如图 Fig.4，右图可知即使在 $T = 3$ ，据 $T_c = 2.27$ 不很远的地方，Metropolis 算法的自关联时间仍远大于 Wolff 算法，再一次证明了 Wolff 算法在求解该问题上的优越性。

5 程序说明

本项目包含 Wolff 算法 (./Wolff)、Metropolis 算法 (./Metropolis) 和一个数据处理程序 (./PostProcess.py)。每个算法都经过四层封装：

- (1) 单步演化/单 bin 演化；
- (2) 固定晶格尺寸与演化温度的单个系综采样；
- (3) 固定晶格尺寸，对演化温度进行扫描并求解 Binder Cumulant 和 Data Collapse 曲线；
- (4) 主程序中改变晶格尺寸，得到最后结果。

在 Wolff 算法的程序中若想要可视化演化过程，则需要将 ./Wolff/OneEnsemble.py 中第 11 行的 False 改为 True。

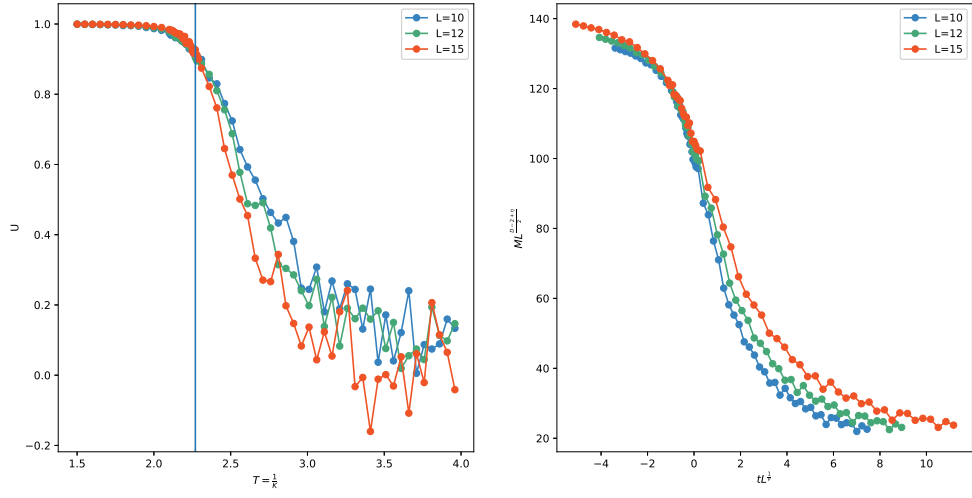


Figure 2: Wolff 算法求解 2-D Ising Model。左图：Binder Cumulant 结果，得到 $T_c = \frac{1}{K_c} = 2.27$ ；右图：Data Collapse 结果，验证了 $\nu = 1, \eta = \frac{1}{4}$ 。

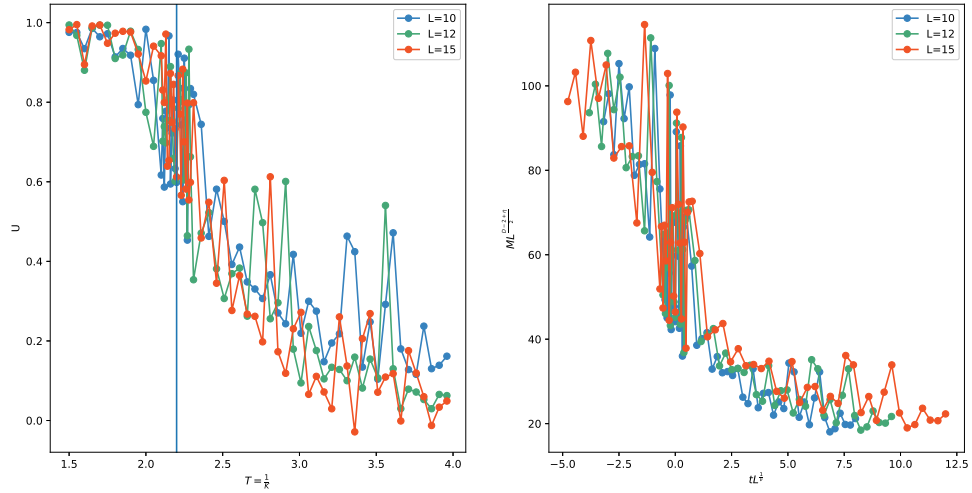


Figure 3: Metropolis 算法求解 2-D Ising Model。左图：Binder Cumulant 结果，得到 $T_c = \frac{1}{K_c} = 2.2$ ；右图：Data Collapse 结果。

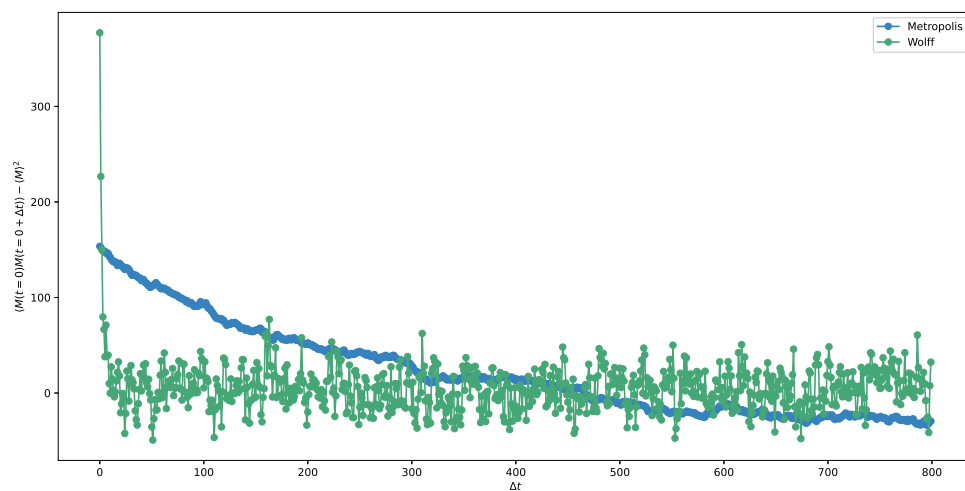


Figure 4: $T = \frac{1}{K} = 3$ 时 Metropolis 算法和 Wolff 算法的自关联函数 $A(t)$