二维零场 Ising 模型的 Monte Carlo 数值模拟

林照翔
兰州大学物理科学与技术学院2022理论2班

(Dated: 2024 年 12 月 15 日)

本文使用 Single-spin-flip Dynamics 方法和 Cluster-flip Dynamics 方法对二维零场 Ising 模型进行数值模拟。

I. 引言

伊辛模型的提出是为了解释铁磁物质的相变，即磁铁在加热到一定临界温度以上会出现磁性消失的现象，而降温到临界温度以下又会表现出磁性。这种有磁性、无磁性两相之间的转变，是一种连续相变（也叫二级相变）。伊辛模型假设铁磁物质是由一堆规则排列的小磁针构成，每个磁针只有上下两个方向（自旋）。相邻的小磁针之间通过能量约束发生相互作用，同时又会由于环境热噪声的干扰而发生磁性的随机转变（上变为下或反之）。涨落的大小由关键的温度参数决定，温度越高，随机涨落干扰越强，小磁针越容易发生无序而剧烈地状态转变，从而让上下两个方向的磁性相互抵消，整个系统消失磁性，如果温度很低，则小磁针相对宁静，系统处于能量约束高的状态，大量的小磁针方向一致，铁磁系统展现出磁性。

本文使用 Single-spin-flip Dynamics 方法和 Cluster-flip Dynamics 方法对二维零场 Ising 模型进行数值模拟。

II. 二维零场 ISING 模型

A. 二维零场 Ising 模型哈密顿量

考虑二维晶格，每个格点的自旋 σ_i 要么向上，要么向下，即：

$$\sigma_i \in \{1, -1\}$$

两个相邻的自旋 i, j 之间存在自旋交互作用，每个自旋与磁场也存在交互作用。引入交互作用常量 J_{ij}，将并格点 j 上的磁场记为 h_j，则整个系统的哈密顿量 H 可写为：

$$H(\sigma) = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu\sum_j h_j\sigma_j$$

其中，$\sigma \equiv \{\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_N\}$ 是 N 个自旋的取向，称为位形；$\langle i, j\rangle$ 表示对最近邻的格点求和（每一对只计算一次）；μ 代表磁矩。

考虑外加磁场为零，且所有相邻自旋的交互作用都是相等的的情况，即：

$$h_j = 0, \quad J_{ij} = J$$

此时，系统的哈密顿量可简化为：

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j$$

B. 重要性抽样

一般的宏观系统中，$N \sim 10^{23}$，系统共有 $2^N \sim 2^{10^{23}}$ 种位形，遍历所有位形计算哈密顿量的是不可能的。

为了避免遍历所有位形带来的海量计算，可以采用 Monte Carlo 算法，即从整体中以一定方式抽取样本，通过计算样本的统计学量来估计整体的统计学量。

根据样本的重要性来决定抽样密度的方法称为重要性抽样。

以玻尔兹曼系统为例，热力学量 Q 的平均值 $\langle Q\rangle$ 的定义为系综平均值，即：

$$\langle Q\rangle \equiv \frac{\sum_\sigma Q(\sigma)\mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}}{\sum_\sigma \mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}}$$

在玻尔兹曼系统中，位形 σ 出现的概率正比于 $\mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}$，因此合理的抽样方式应是对位形 σ 以 $P(\sigma) \propto \mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}$ 进行重要性抽样。

假设通过上述重要性抽样共抽取了 M 个样本位形 $\tilde{\sigma}_1,\tilde{\sigma}_2,\cdots,\tilde{\sigma}_M$ ，则可取这 M 个样本中热力学量 Q 的统计平均值作为对其系综平均的近似，即：

$$\langle Q\rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^{M} Q\left(\tilde{\sigma}_i\right)}{M}$$

III. 马尔可夫过程

A. 马尔可夫过程（马尔可夫链）

马尔可夫过程是一个具备了马尔可夫性质的随机过程，因为俄国数学家安德雷·马尔可夫得名。马尔可夫过程是不具备记忆特质的。换言之，马尔可夫过程的条件概率仅仅与系统的当前状态相关，而与它的过去历史或未来状态，都是独立、不相关的。

马尔可夫链是满足马尔可夫性质的随机变量序列 $X_1,X_2,X_3,\cdots$， 某一个状态 X_{n+1} 仅与前一个状态 X_n 有关，即：

$$\mathrm{P}\left(X_{n+1}=x|X_1=x_1,\cdots,X_n=x_n\right)=\mathrm{P}\left(X_{n+1}=x|X_n=x_n\right)$$

B. “好”马尔可夫过程的稳态分布

我们用 $P_{\mu\to\nu}$ 表示系统从状态 μ 转移到状态 ν 的概率。

对于一个“好”马尔可夫过程，无论初始状态是什么，只要经历足够多的步数，末态的概率分布是确定的，这个末状态称为稳态。

我们用稳态概率分布（简称稳态分布） $P(\mu)$ 来表示稳态时系统处于状态 μ 的概率。

C. “好”马尔可夫过程需要满足的条件

一个“好”马尔可夫过程要满足以下两个条件：

（1）遍历性：无论从哪个状态出发，都能找到一条概率不为零的路径达到任意状态。

（2）细致平衡：稳态概率分布和转移概率满足：

$$P(\mu)P_{\mu\to\nu}=P(\nu)P_{\nu\to\mu}$$

我们可以选定一个选择概率 $g(\mu,\nu)$，表示当系统处于状态 μ 时，在所有可能的状态中选择状态 j 的概率。

另外还需要定义一个接受概率 $A(\mu,\nu)$，表示当系统处于状态 μ 时，接受系统跳转到状态 ν 的概率。

可以看到，$g(\mu,\nu)A(\mu,\nu)$ 就是马尔可夫过程中的转移概率 $P_{\mu\to\nu}$，即：

$$P_{\mu\to\nu}=g(\mu,\nu)A(\mu,\nu)$$

因此，细致平衡条件也可以通过选择概率和接受概率表达为：

$$P(\mu)g(\mu,\nu)A(\mu,\nu)=P(\nu)g(\nu,\mu)A(\nu,\mu)$$

IV. ISING 模型的 MONTE CARLO 解

回到二维零场 Ising 模型，我们希望对位形 σ 以概率 $P(\sigma)\propto \mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}$ 进行重要性抽样。这可以通过“好”的马尔可夫过程实现。

我们可以构造一个特殊的“好”马尔可夫过程，使得其稳态关于位形 σ 的稳态分布 $P(\sigma)$ 满足 $P(\sigma)\propto \mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}$， 这样就能实现对位形 σ 以概率 $P(\sigma)\propto \mathrm{e}^{-\beta H(\sigma)}$ 进行重要性抽样。

A. Single-spin-flip Dynamics 方法

Single-Spin-Flip-Dynamics 是一个“好”的马尔可夫过程。在热平衡时，整个 Ising 系统的能量只会有小幅度的扰动，这点促成了在演算时采用单一自旋反转法进行计算，也就是说每次系统跳转其位形时，只改变其中一个自旋的方向。

由于我们一次只翻转一个自旋，即位形跳转前后的位形仅有一个方向不同的自旋。因此，当位形 μ 和位形 ν 不满足“仅有一个方向不同的自旋”这一条件时，我们拒绝从位形 μ 跳转到位形 ν，即：

$$P_{\mu\to\nu}=0$$

下面考虑位形 μ 和位形 ν 仅有一个方向不同的自旋的情况。

为简单起见，对于任何一个状态 μ，认为它以相同概率选择 N 个格点中的一个进行自旋翻转，即人为规定选择几率满足：

$$g(\mu,\nu) = 1/N$$

为实现重要性抽样，我们希望稳态分布满足 $P(\mu) \propto \mathrm{e}^{-\beta H(\mu)}, P(\nu) \propto \mathrm{e}^{-\beta H(\nu)}$，因此有：

$$\frac{P(\mu)}{P(\nu)} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta H(\mu)}}{\mathrm{e}^{-\beta H(\nu)}} = \mathrm{e}^{-\beta[H(\mu)-H(\nu)]}$$

将稳态分布条件和选择概率代入细致平衡条件，得到接受概率应满足的条件：

$$\frac{A(\mu,\nu)}{A(\nu,\mu)} = \mathrm{e}^{-\beta[H(\nu)-H(\mu)]}$$

满足上式的接受概率的一种可能取法是 Metropolis 接受准则，即如下的接受概率：

$$A(\mu,\nu) = \begin{cases} \mathrm{e}^{-\beta[H(\nu)-H(\mu)]} & , \quad H(\nu)-H(\mu) > 0 \\ 1 & , \quad \text{otherwise.} \end{cases}$$

注意到，位形 ν 与位形μ 仅有一个方向不同的自旋。设位形 μ 把自旋 σ_k 翻转为 $-\sigma_k$ 从而跳转到位形 ν，设 σ_k 的四个最近邻自旋分别为 $\sigma_{k1}, \sigma_{k2}, \sigma_{k3}, \sigma_{k4}$，则跳转前后的能量差为：

$$H(\nu) - H(\mu) = 2J\sigma_k(\sigma_{k1} + \sigma_{k2} + \sigma_{k3} + \sigma_{k1})$$

Single-Spin-Flip-DynamicsCluster-flip-Dynamics 方法稳态时重要性抽样的具体步骤如下：

（1）以 $1/N$ 的选择概率选出一个自旋，并计算自旋翻转前后能量差 $H(\nu) - H(\mu)$；

（2）如果能量差 $H(\nu) - H(\mu) \leq 0$，翻转选择的自旋；

（3）如果能量差 $H(\nu) - H(\mu) > 0$，则以 $\mathrm{e}^{-\beta(H_j - H_i)}$ 的概率翻转选择的自旋；

（4）记录当前位形下热力学量的取值；

（5）重复步骤（1）。

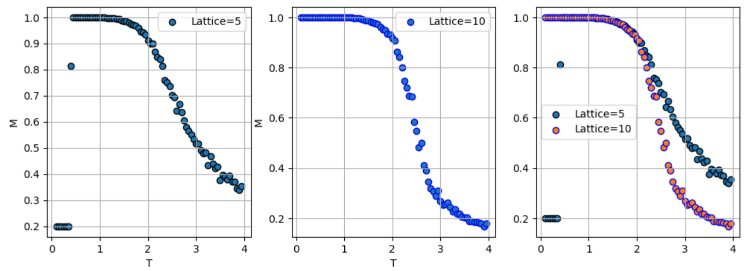

图 1. 平均磁矩随温度变化关系(取 $k = J = 1$)理论给出在 $T_c = 2/\ln(1+\sqrt{2}) \approx 2.269$ 处发生相变

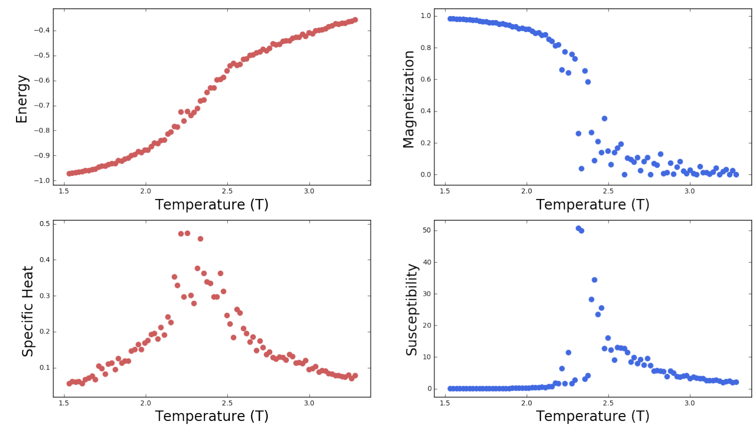

图 2. 其他热力学量随温度变化关系(取 $k = J = 1$)

B. Cluster-flip Dynamics 方法

与 Single-Spin-Flip-Dynamics 方法单步翻转单个自旋不同，Cluster-flip-Dynamics 方法单步会翻转多个自旋。每次被翻转的自旋簇称为 cluster.

Cluster-flip-Dynamics 方法稳态时重要性抽样的具体步骤如下：

（1）在系统中随机抽取一个自旋作为种子；

（2）以 $\mathrm{P_{add}}$ 的概率依次决定是否添加种子周围的同向自旋到 cluster中；

（3）把原来的种子标记为 operated，把新加入的自旋作为新的种子；

（4）重复步骤（2）（3），直到 cluster 中所有的自旋都被标记为 operated，即不再有新的种子；

（5）以 $A_{\mu,\nu}$ 的概率翻转 cluster；

（6）记录当前位形下热力学量的取值；

（7）重复步骤（1）。

1. *Wolff* 算法

这里，我们仍需要构造“好”的马尔可夫过程，因此仍要满足细致平衡条件。

当前系统的位形记为 μ，设 cluster-flip 把位形 μ 中一个自旋为 σ 的 cluster 全部翻转为 $-\sigma$ 从而跳转到位形 ν，设最近邻包围被翻转的 cluster 的所有自旋中自旋为 σ 的有 m 个，自旋为 $-\sigma$ 的有 n 个，则系统处于位形 μ 时选择位形 ν 的选择概率 $g(\mu,\nu)$ 可以人为规定为：

$$g(\mu,\nu)=(1-\mathrm{P_{add}})^m$$

容易得到：

$$g(\nu,\mu)=(1-\mathrm{P_{add}})^n$$

因此：

$$\frac{g(\mu,\nu)}{g(\nu,\mu)}=\frac{(1-\mathrm{P_{add}})^m}{(1-\mathrm{P_{add}})^n}=(1-\mathrm{P_{add}})^{m-n}$$

细致平衡条件：

$$P(\mu)g(\mu,\nu)A(\mu,\nu)=P(\nu)g(\nu,\mu)A(\nu,\mu)$$

我们希望稳态分布满足：

$$P(\mu)\propto \mathrm{e}^{-\beta H(\mu)},\quad P(\nu)\propto \mathrm{e}^{-\beta H(\nu)}$$

因此：

$$\frac{P(\mu)}{P(\nu)}=\mathrm{e}^{-\beta[H(\mu)-H(\nu)]}$$

把概率密度分布和选择概率代入细致平衡条件，可得：

$$\frac{A(\mu,\nu)}{A(\nu,\mu)}=\frac{P(\nu)}{P(\mu)}\frac{g(\nu,\mu)}{g(\mu,\nu)}=\mathrm{e}^{-\beta[H(\nu)-H(\mu)]}\,(1-\mathrm{P_{add}})^{n-m}$$

注意到：

$$H(\nu)-H(\mu)=2(m-n)J$$

因此，接受概率要满足：

$$\frac{A(\mu,\nu)}{A(\nu,\mu)}=\mathrm{e}^{-2\beta(m-n)J}\,(1-\mathrm{P_{add}})^{n-m}$$

特别地，若把 $\mathrm{P_{add}}$ 取为：

$$\mathrm{P_{add}}=1-\mathrm{e}^{-2\beta J}$$

则接受概率要满足：

$$\frac{A(\mu,\nu)}{A(\nu,\mu)}=\mathrm{e}^{-2\beta(m-n)J}\cdot\mathrm{e}^{-2\beta J(n-m)}=1$$

因此，一种简单的接受概率取法就是：

$$A(\mu,\nu)=1$$

即只要构造出了 cluster 就对其进行翻转。

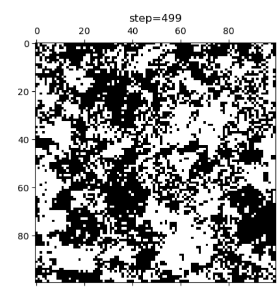

图 3. 临界温度 $T=T_c$ 时系统的位形

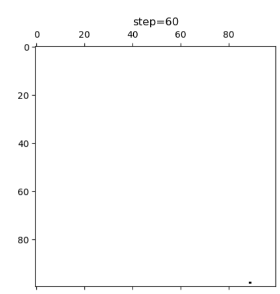

图 4. 低温 $T=1$ 时系统的位形，低温时系统发生自发磁化

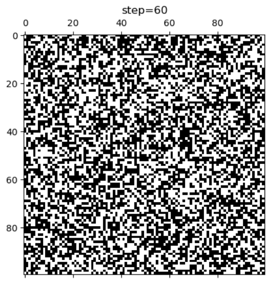

图 5. 高温 $T = 10$ 时系统的位形，高温时系统宏观上不表现磁性