# 1 伊辛模型

本题中我们将考察数值求解统计物理中最简单的多体系统，伊辛模型。平衡态统计物理课程对模型本身已有详尽的描述，这里从简。设有 $L \times L$ 个格点以正方形排布，在每个格点 $(i, j)$ 上有自旋 $s_{i,j}$，取值仅可能为 $\pm 1$。取周期边界条件，即 $s_{i,N+1} = s_{i,N}, s_{M+1,j} = s_{1,j}$。系统的哈密顿量写作

$$\mathcal{H}[\{S\}] = \sum_{i=1}^{L} \sum_{j=1}^{L} \left[ -J s_{i,j} (s_{i,j+1} + s_{i+1,j}) - H s_{i,j} \right], \tag{1}$$

$J$ 和 $H$ 分别为耦合强度和外场强度，记号 $\{S\}$ 表示一组取定的全体自旋 $s_{i,j}$ 值，也称为一个构型。正则系综的配分函数为

$$Z = \sum_{\{S\}} \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}[\{S\}]}, \tag{2}$$

其中 $\beta = 1/k_\mathrm{B} T$。自由能 $F(T, H) = -\ln Z / \beta$。多数物理量都可以化作以玻尔兹曼因子为权重对全体构型取平均的形式

$$O = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} f_O[\{S\}] \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}[\{S\}]}, \tag{3}$$

例如平均内能

$$U = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \frac{\mathcal{H}[\{S\}]}{L^2} \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}[\{S\}]}, \tag{4}$$

热容

$$C_H \equiv \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_H = k_\mathrm{B} \beta^2 L^2 \left\{ \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \left( \frac{\mathcal{H}[\{S\}]}{L^2} \right)^2 \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}[\{S\}]} - U^2 \right\}, \tag{5}$$

磁化强度

$$\mathcal{M} = \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \frac{\sum_{i,j} s_{i,j}}{L^2} \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}[\{S\}]}, \tag{6}$$

磁化率

$$\chi \equiv \left( \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial H} \right)_T = \beta L^2 \left\{ \frac{1}{Z} \sum_{\{S\}} \left( \frac{\sum_{i,j} s_{i,j}}{L^2} \right)^2 \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}[\{S\}]} - \mathcal{M}^2 \right\}, \tag{7}$$

等等诸如此类。

由于所有可能的构型数高达 $2^{L^2}$ 种，直接进行求和是不切实际的。对于此类维度灾难，我们可以考虑使用蒙特卡洛方法：如果我们可以以概率

$$Q[\{S\}] = \frac{1}{Z} \mathrm{e}^{-\beta \mathcal{H}[\{S\}]} \tag{8}$$

在所有构型中取样，那么上述形式的物理量便可以近似求得

$$O \approx \langle f_O \rangle, \tag{9}$$

随机取样带来的误差也容易通过均方差

$$\sigma_O \approx \sqrt{\langle f_O^2 \rangle - \langle f_O \rangle^2} \tag{10}$$

来估计。接下来的问题是如何按照前述方案取样，我们采用马尔科夫链来实现。对于任意一个自旋构型 $\{S^i\}$，令其以 $P(\{S^{i+1}\}|\{S^i\})$ 的概率变为构型 $\{S^{i+1}\}$。可以证明，当 $P(\cdot|\cdot)$ 满足一定条件时，从任意初始构型 $\{S^0\}$ 出发经过充分多次迭代后所得到的构型 $\{S^n\}$ 的分布会收敛于 $\pi(\{S\})$，该分布满足精细平衡条件

$$\pi(\{S\}) P(\{S\}|\{S'\}) = \pi(\{S'\}) P(\{S'\}|\{S\}), \tag{11}$$

剩下的便是选择合适的 $P(\cdot|\cdot)$ 使得 $\pi(\cdot) = Q(\cdot)$ 即可，一种常见的取法为

1. 随机选择 $\{S\}$ 中的一个自旋，令其翻转，记相应构型为 $\{\tilde{S}\}$
2. 计算能量变化 $\Delta = \mathcal{H}[\{\tilde{S}\}] - \mathcal{H}[\{S\}]$
3. 以 $1/(1+\mathrm{e}^{\beta\Delta})$ 的概率令 $\{S'\} = \{\tilde{S}\}$，以 $1/(1+\mathrm{e}^{-\beta\Delta})$ 的概率令 $\{S'\} = \{S\}$

当然，你可以不拘泥于此，而选择你认为更有效率的方案。试

(1) 取 $L = 32, \beta J = 0.5, H = 0$，计算平均自旋 $\overline{s} = \sum_{i,j} s_{i,j}/L^2$ 随着迭代次数 $n$ 的变化。当 $n$ 大于多少时可以认为迭代趋于收敛？检验此时你得到了一个非零的 $\overline{s}$。

(2) 利用收敛后的构型分布来计算物理量。维持其余参数不变，画出 $U, C_H, \mathcal{M}, \chi$ 随 $\beta J > 0$ 变化的关系图。检验 $C_H, \chi$ 在某个 $\beta J = \alpha_c$ 附近出现峰值，而 $\mathcal{M}$ 在 $\beta J > \alpha_c$ 时出现了分叉。

(3) 使用更大的网格，增加 $M$ 与 $N$。检验随着网格的增大，峰位 $\alpha_c$ 发生了移动，并且峰宽 $\Delta\alpha$ 变得更窄，峰高 $\chi_{\max}$ 上升；验证其中存在幂律 $\alpha_c(N) - \alpha_c(\infty) \propto N^{-\nu}, \Delta\alpha \propto N^{-\mu}, \chi_{\max} \propto N^{\lambda}$，并给出你对诸参数的估计。

(4) 给出 $\beta J$ 在小于、等于、大于 $\alpha_c$ 时自旋在格点上典型的分布图样，描述你所观察到的现象。

(5) 演示铁磁相的滞回现象：取 $\beta J > \alpha_c$，$H = H_0 > 0$，迭代直至分布收敛；以某种方式令 $H$ 在 $\pm H_0$ 之间以 $N$ 为周期往复变换（例如，$H_k = H_0 \cos(2\pi k/N)$）,$H$ 每变化一次后都重新迭代 $M$ 次，统计此时的 $\mathcal{M}_k$；对于不同的 $M \times N$，画出 $\mathcal{M}(H)$ 的变化关系图。