

应用实例：Ising（伊辛）模型

用磁学的语言来说，Ising模型是由一组自旋自由度组成，这些自旋自由度彼此相互作用并和一个外磁场相互作用。这些自旋自由度可以代表固体中原子的磁矩。

经典的二维 Ising 模型：在一个二维方格子（ $N_x \times N_y$ 尺度）上，每个结点 i 上有一个自旋，可以取值 $+1$ 或 -1 。（此处自旋为经典自由度）相邻自旋通过一个交换耦合能 J 相互作用，此外还存在一个外磁场 B 。

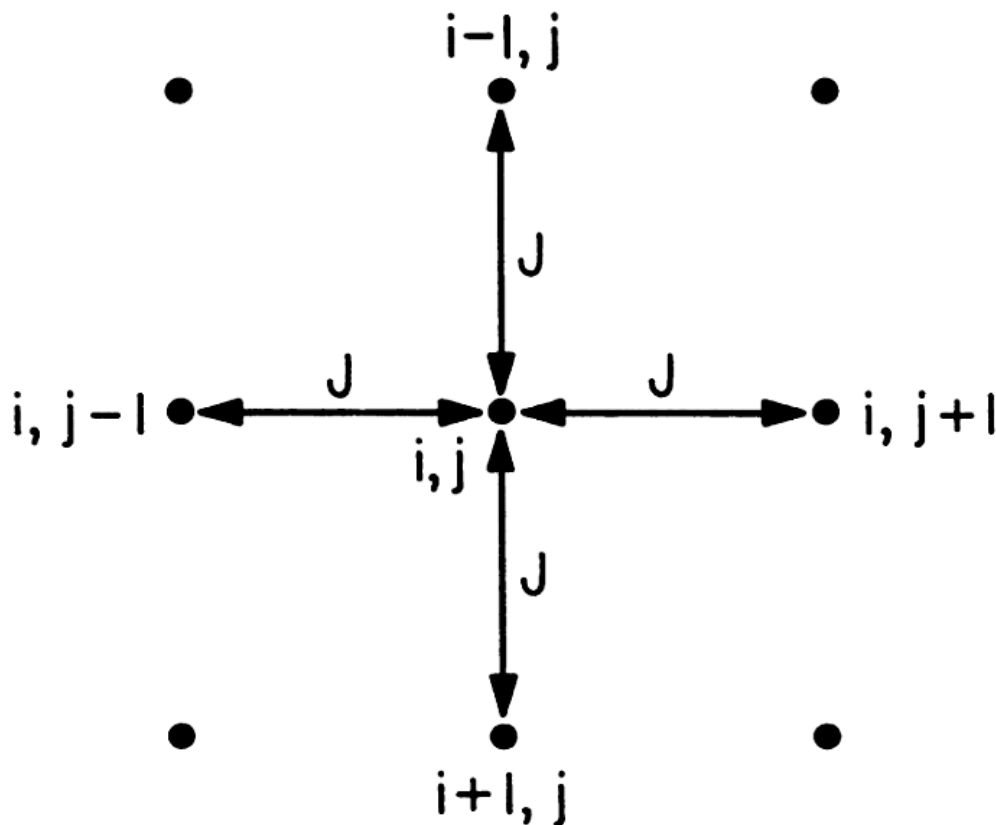
系统的哈密顿量为

$$H = -J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} S_{\alpha} S_{\beta} - B \sum_{\alpha} S_{\alpha}$$

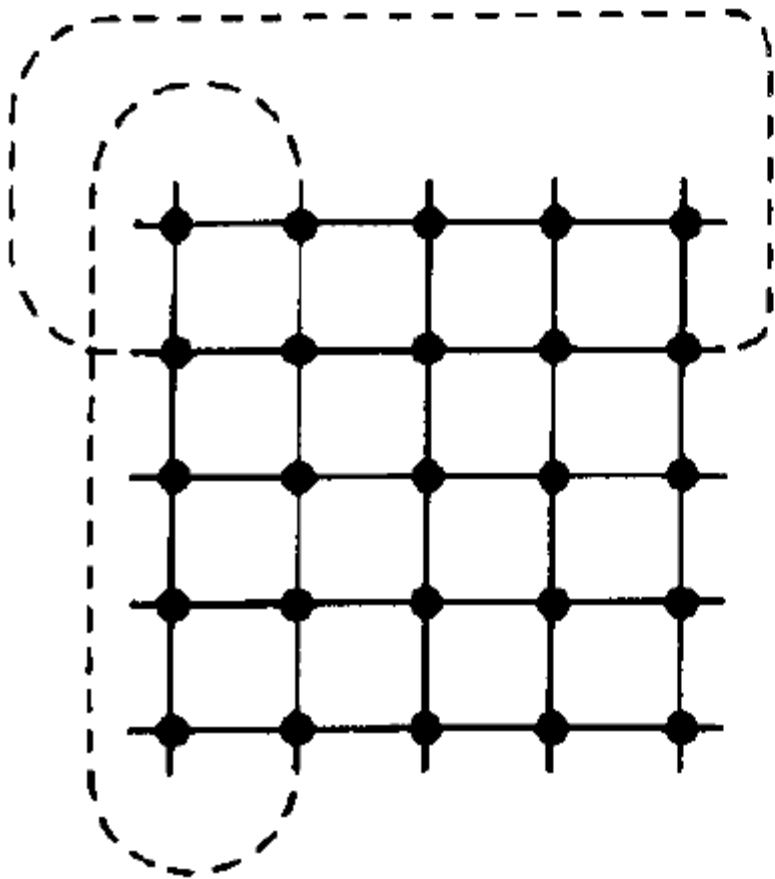
其中 $\langle \alpha\beta \rangle$ 代表对最近邻求和。

伊辛模型最早被用来研究磁相变，另一个有趣的应用是二元合金。

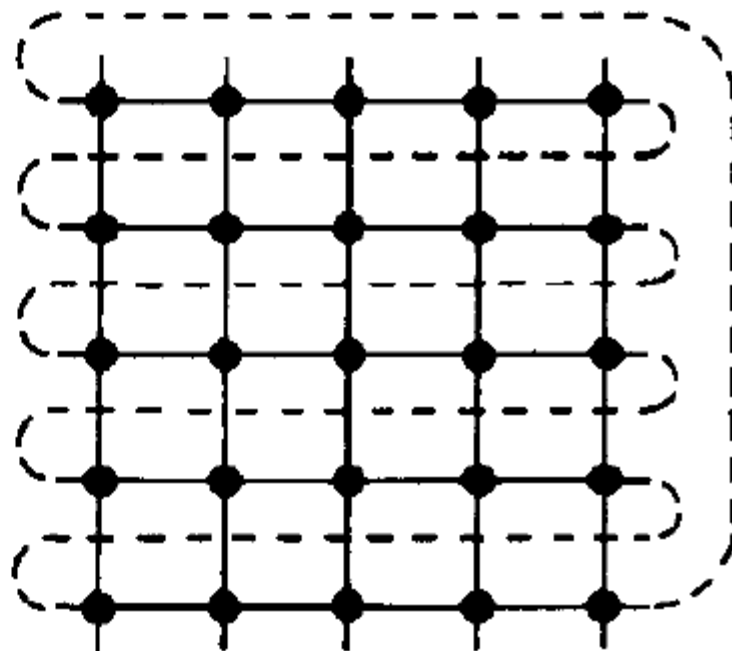
二维 Ising 模型示意图



二维 Ising 模型两种不同的典型的边界条件



周期边界条件



螺旋边界条件

交换耦合能 J

零温下，当没有外磁场时

- $J > 0$ ：则所有自旋都朝同一方向，系统能量会最低，对应铁磁态(铁磁性)
- $J < 0$ ：则相邻两个自旋朝向相反，系统能量会最低，对应反铁磁态（反铁磁性）

$$H = -J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} S_{\alpha} S_{\beta} - B \sum_{\alpha} S_{\alpha}$$

见Matlab程序（可用程序验证）
Ising_model.m

正则系综下物理量的计算

对于一个二维Ising模型，给出全部 $N_x \times N_y = N$ 个自旋量的值就规定了系统的位形，对于 N 个格点构成的平面，由于每个格点具有向上或者向下两个不同自旋，因此 N 个格点构成的位形数目为 2^N ，任何一个位形在正则系综中的权重为

$$w(S) = \frac{e^{-H(S)}}{Z} \quad H(S) = -J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} S_\alpha S_\beta - B \sum_{\alpha} S_\alpha$$

其中 Z 为配分函数

$$Z(J, B) = \sum_S^{2^N} e^{-H(S)}$$

磁化强度

$$M = \sum_{S=1}^{2^N} w(S) \left(\sum_{\alpha=1}^N S_\alpha \right) = \left\langle \sum_{\alpha=1}^N S_\alpha \right\rangle \quad (1)$$

磁化率

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \sum_{S=1}^{2^N} w(S) \left(\sum_{\alpha=1}^N S_{\alpha} \right)^2 - M^2$$
$$= \left\langle \left(\sum_{\alpha=1}^N S_{\alpha} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_{\alpha=1}^N S_{\alpha} \right\rangle^2$$

能量

$$E = \sum_{S=1}^{2^N} w(S) H(S) = \langle H(S) \rangle$$

定场比热容：能量的平均涨落

$$C_B = \sum_{S=1}^{2^N} w(S) H^2(S) - E^2$$
$$= \langle H^2(S) \rangle - \langle H(S) \rangle^2$$

二维 Ising 模型的解析结果

Ising模型的思想最早由德国物理学家W.Lenz于1920年在《物理学杂志》提出。后来，他将这个模型交给他的学生E. Ising去做博士论文。Ising本人在1925年证明，空间维数 $D=1$ 时，Ising模型没有相变，并错误地推断 $D \geq 2$ 时也没有相变。事隔十年之后的1936年，英国物理学家R.E.Peierls从物理考虑指出，Ising模型在 $D=2$ 时应当有相变。1941年，H. A. Kramers和G.H.Wannier从“对称性”的考虑出发，严格算出 $D=2$ 的正方晶格上Ising模型的相变点是

$$\eta_c = \tanh\left(\frac{J}{k_B T}\right) = \sqrt{2} - 1 = 0.4142 \cdots$$

Lars Onsager 于1944 年得到二维 Ising 模型的精确解，并证明存在相变点，这是统计物理学发展过程中的里程碑。在无穷大格子的极限下，可得到 Ising模型的精确解. $B=0$ 时，能量为

$$E = -N_s J (\coth 2J) \left[1 + \frac{2}{\pi} \kappa' K_1(\kappa) \right]$$

比热容为

$$c_B = N_s \frac{2}{\pi} (J \coth 2J)^2 \left[2K_1(\kappa) - 2E_1(\kappa) - (1 - \kappa') \left[\frac{\pi}{2} + \kappa' K_1(\kappa) \right] \right]$$

磁化强度 M 在 $J > J_c$ 时为

$$M = \pm N_s \frac{(1 + z^2)^{1/4} (1 - 6z^2 + z^4)^{1/8}}{(1 - z^2)^{1/2}}$$

在 $J < J_c$ 时为零. 在以上各个表示式中,

$$\kappa = 2 \frac{\sinh 2J}{\cosh^2 2J} \leq 1, \quad \kappa' = 2 \tanh^2 2J - 1$$

$$K_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{(1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi)^{1/2}}, \quad E_1(\kappa) \equiv \int_0^{\pi/2} d\varphi (1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi)^{1/2}$$

$z = e^{-2J}$, 及 $J_c = 0.4406868$ 为 J 的临界值, 这时的 $\kappa = 1$, K_1 在这里有一个对数奇点。于是, 在这一耦合强度下所有的热力学函数都出现奇异性, 强烈暗示在此处发生相变。这可由磁化强度的行为证实, 它在临界耦合以下的值为零, 在这一耦合强度以上则可以取两个大小相等而符合相反的值中的任一个。**杨振宁在1952年给出了外磁场很小时二维Ising模型的解析解。**

三维伊辛模型仍然缺乏精确解。

Ising模型的蒙特卡洛解法

Ising模型的数值解在以下两个方面是有用的：它既可以用来阐明我们讨论过的计算方法，而且又容易推广到更复杂的Hamilton量的情形。

由磁化率等物理量的计算公式我们可以看出，求和包括的项数非常大，直接求和是不可能的。**以一个 16×16 的小格子为例，有 $2^{256} \approx 10^{77}$ 个不同的位形。**

最有效的方法是用Metropolis算法产生概率分布为 $w(S)$ 的自旋位形 S ，然后在这些位形上对所需要的观测量（如能量，磁化强度等）**求平均**。

为了落实Metropolis算法，我们可以用**随机改变所有自旋**的方法来取从 S 到 S_t 的试探步。但是，这将把我们带到一个同 S 很不相同的位形，因而有很高的概率遭到摒弃。

有用的方法是：我们考虑同前一种位形相差在只有一个自旋反转的试探位形。

这可以用以下的方法得到：对格子进行系统的扫描，并考虑是否使每一个自旋反转（每次反转一个自旋）。于是我们考虑两种位形 S 和 S_t ，它们之间的差别只在于有一个自旋 $S_\alpha = S_{ij}$ 反转了方向。这一试探步是否被接受依赖于权函数的比值

$$r = \frac{w(S_t)}{w(S)} = e^{-H(S_t) + H(S)}$$

当 $r > 1$ 或者 r 大于 一个在0和1之间均匀分布的随机数rand时，试探步被接受，那么自旋 S_{ij} 反转；否则就不反转。

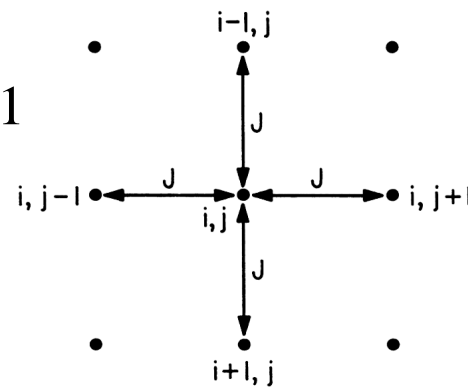
$$H = -J \sum_{\langle \alpha \beta \rangle} S_{\alpha} S_{\beta} - B \sum_{\alpha} S_{\alpha}$$

只有包含 S_{α} 的项才对 r 有贡献，**只考虑最近邻相互作用**时，我们可以得到 (**推导**)

$$r = \frac{w(S_t)}{w(S)} = e^{-H(S_t) + H(S)} = e^{-2S_{\alpha}(Jf + B)} \quad (2)$$

其中 $f = S_{i+1,j} + S_{i-1,j} + S_{i,j+1} + S_{i,j-1}$

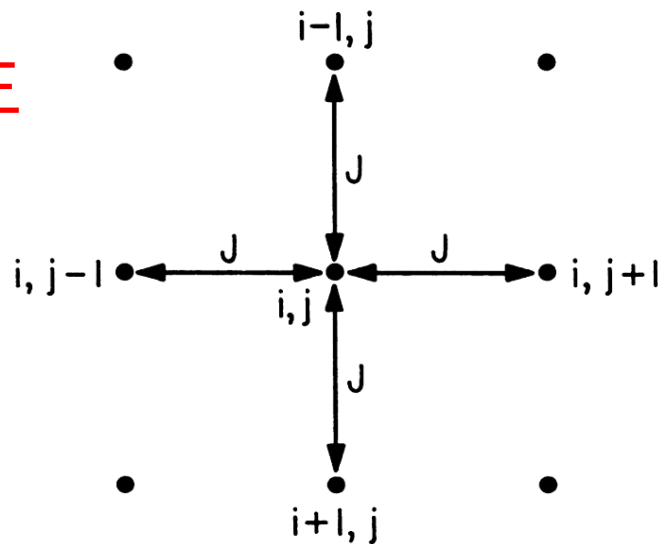
为要反转的自旋 S_{ij} 的四个邻居自旋之和。



由于 S 的取值只能是-1或1，则 f 只能取5个不同的值（分别为-4, -2, 0, 2, 4）。由于 S_α 有两个可能的取值（-1或1），则 r 只能取10个不同的值。这些值可以在正式计算开始之前就计算好并存在一个数组中，这样就不必要重复计算指数式了。

当然，如果我们用的是包含几个自旋同时反转的位形，则 r 的表达式会非常复杂，我们不采用此方法。

如果考虑次紧邻相互作用，或者求解三维Ising模型，则 f 的取值应该如何？

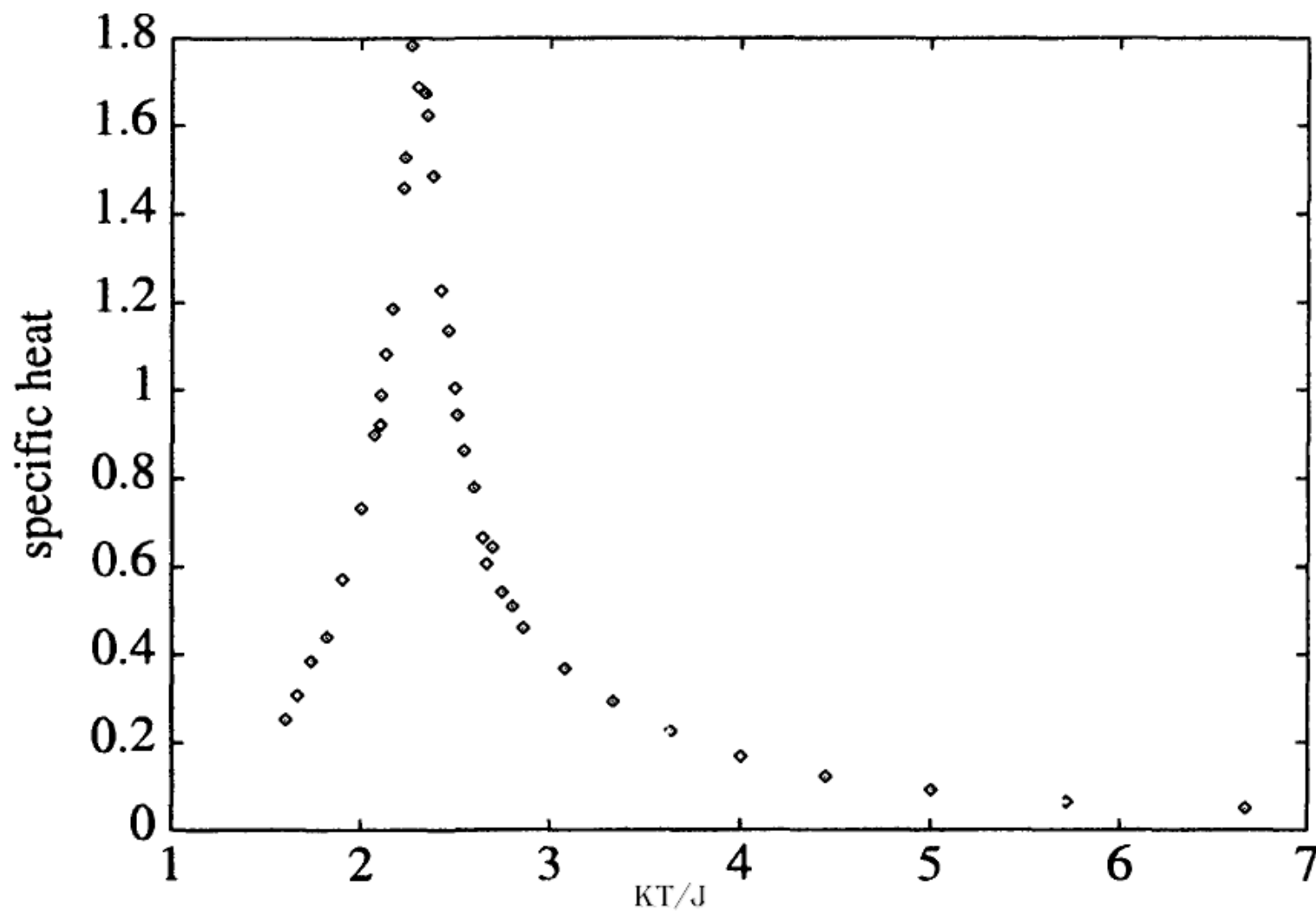


二维 Ising 模型的具体算法

- (1). 随机生成一个初始构型
- (2). 选择一个格点 i
- (3). 计算如果将点 i 的自旋翻转引起的能量变化 ΔE
- (4). 生成一个随机数 r , $0 < r < 1$
- (5). 如果 $r < \exp(-\Delta E)$, 则翻转格点 i 的自旋, 见 (2) 式
- (6). 执行第二步;
- (7). 完成一定步数的扫描后, 计算磁化强度等物理量;
- (8). 多次抽样, 对计算结果取平均值, 取为期望值。

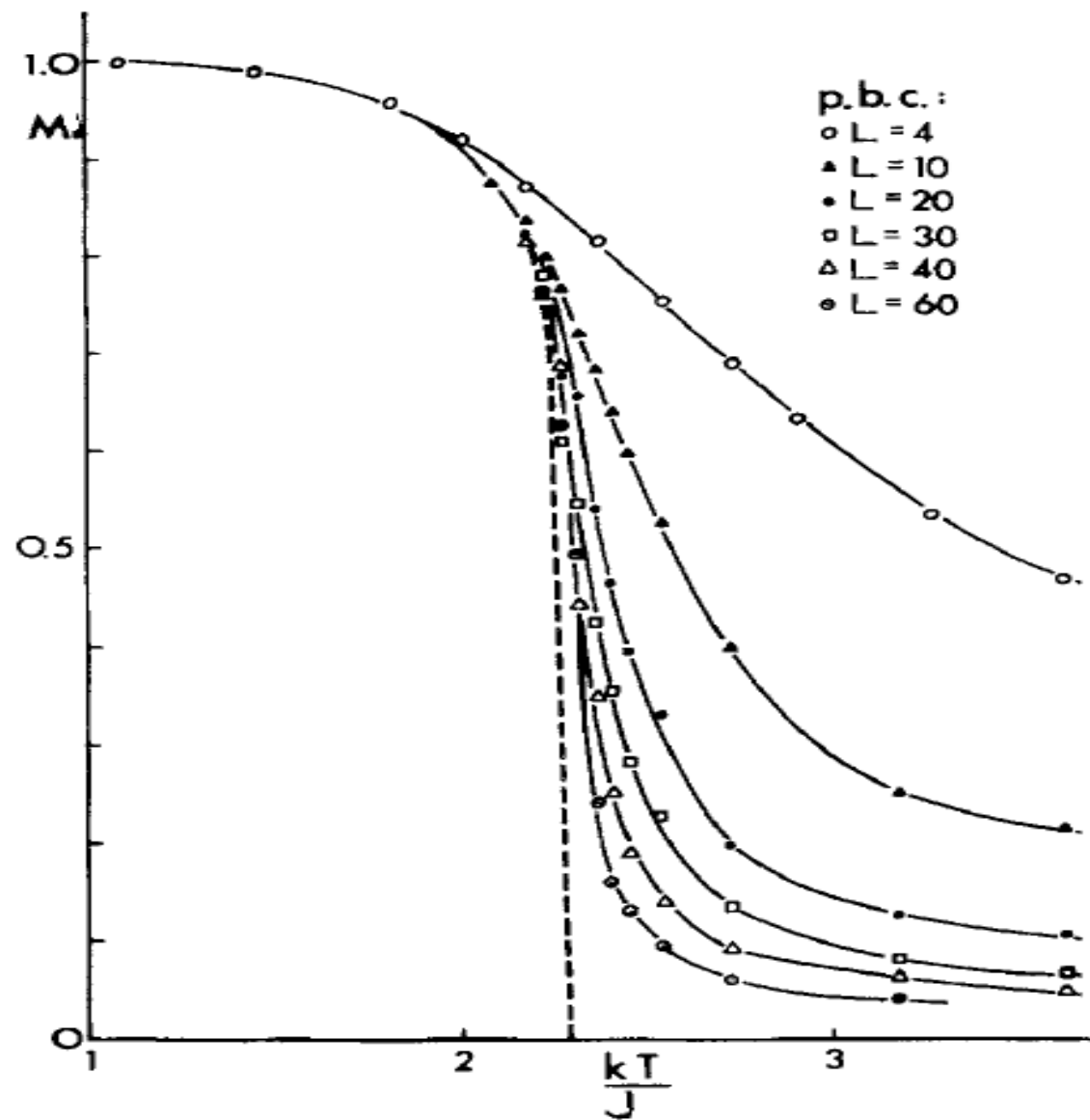
$$r = \frac{w(S_t)}{w(S)} = e^{-H(S_t) + H(S)} = e^{-2S_\alpha (Jf + B)} \quad (2)$$

比热随温度变化曲线



20×20 格子

磁化强度随温度变化曲线

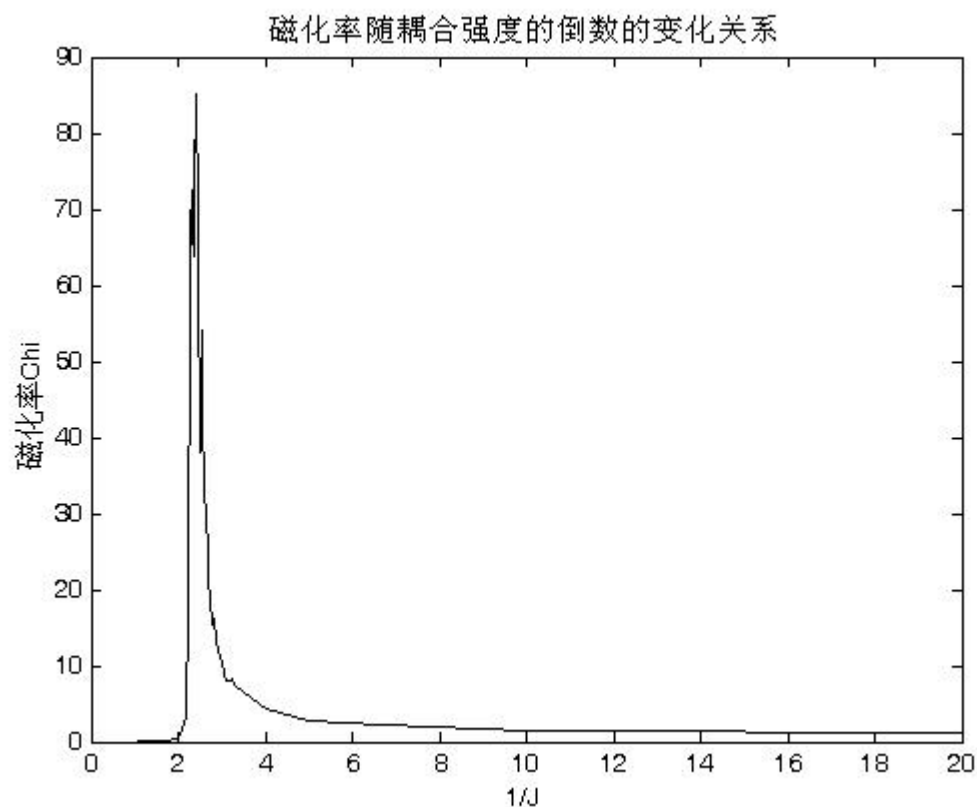
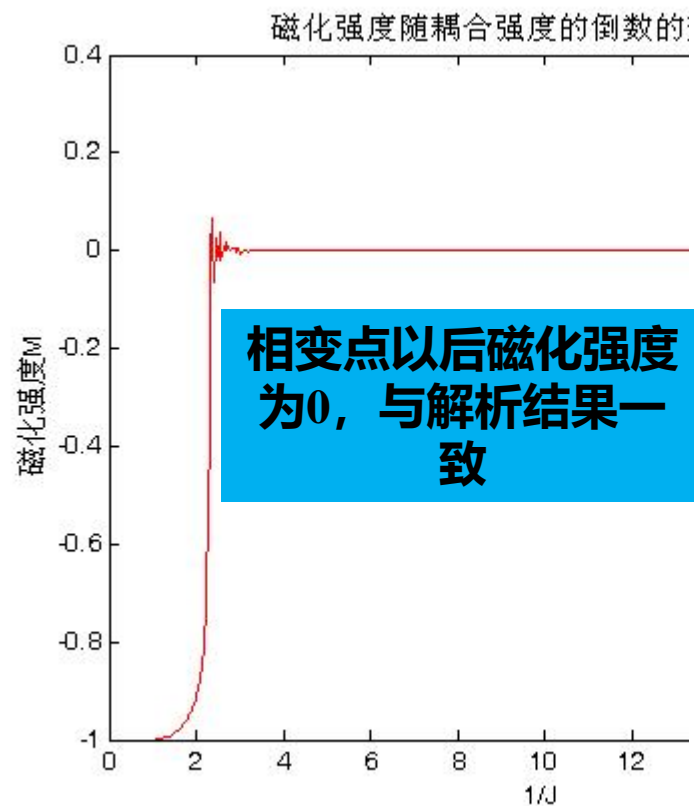
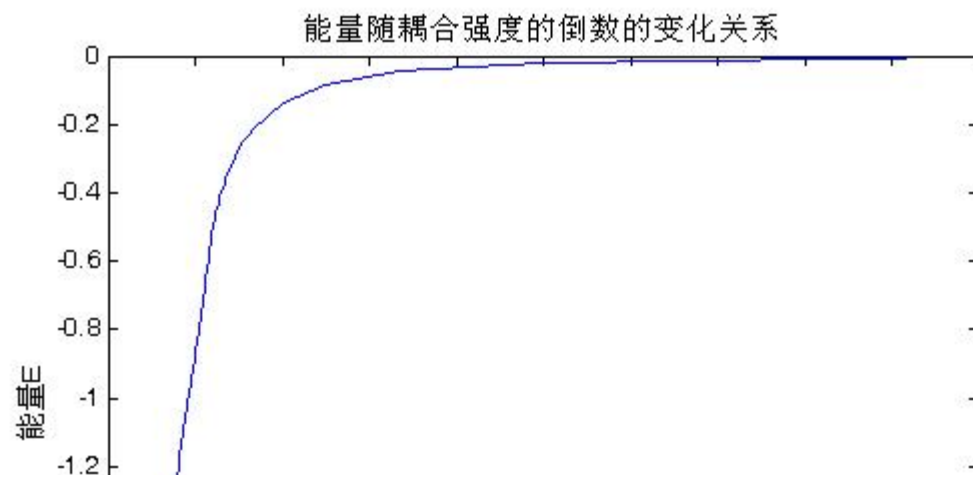
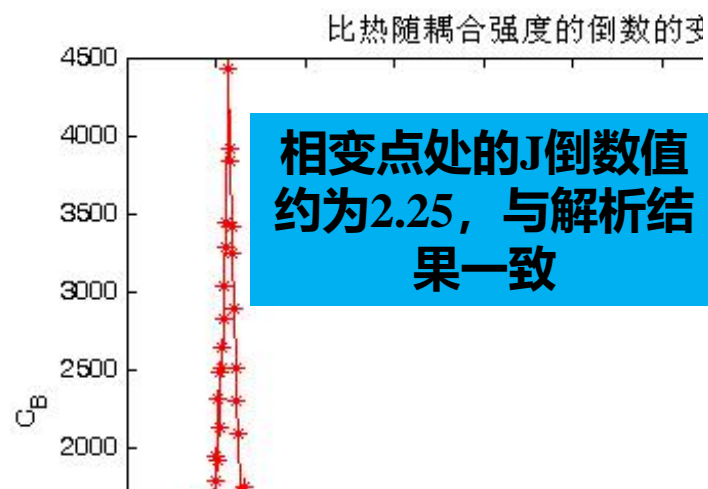


二维 Ising 模型蒙特卡洛算法的程序实现

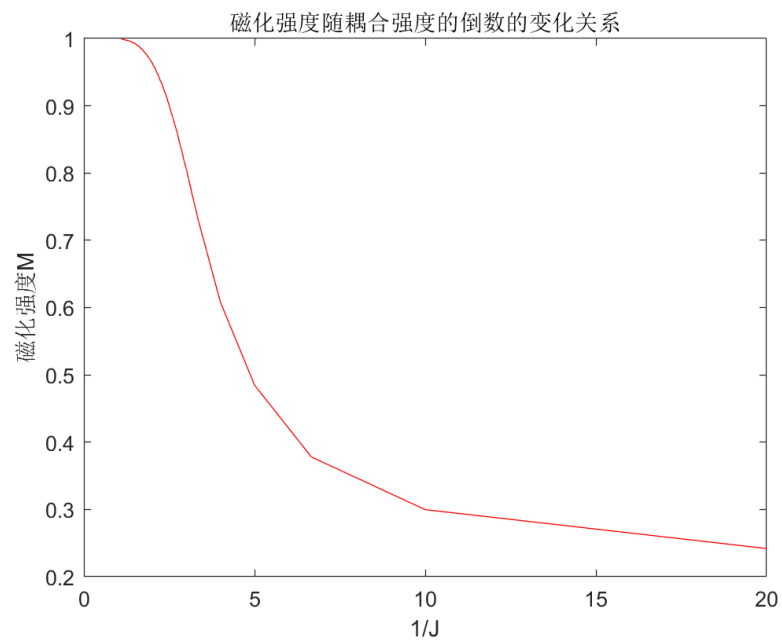
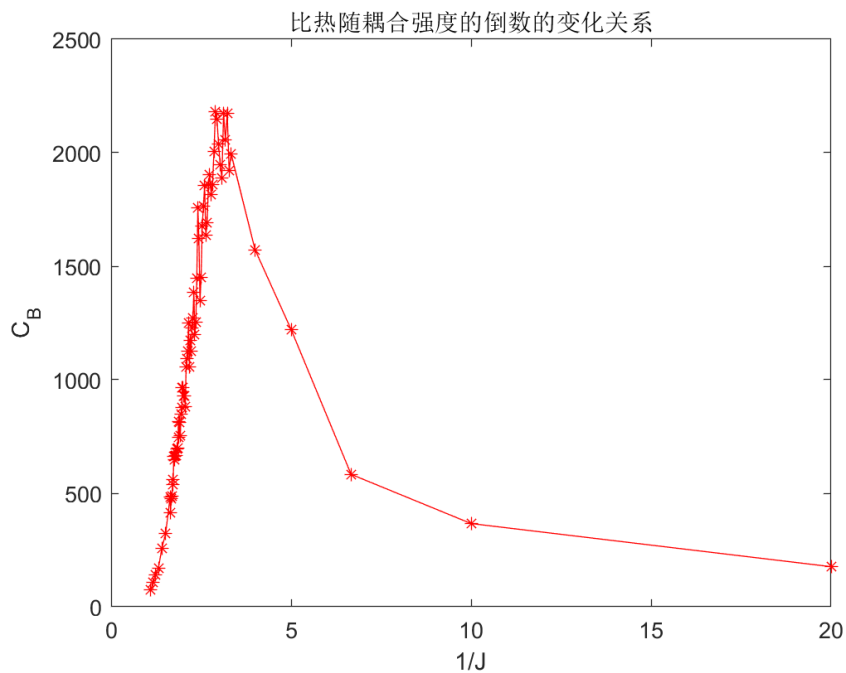
选择格子在水平和竖直方向上的大小都为50，耦合强度和外磁场强度分别为 $J=0.3$ ， $B=0$ 。

热化扫描50次（此时不计算可观测量），数据分成10个小组，每组50个样本，每个样本的抽样间隔为5。

见Matlab程序
`Ising_model.m`



计算B不为0时的Ising模型，讨论结果



Metropolis 算法可能存在的问题

Metropolis 算法在系统接近临界点时会出现问题。以三维伊辛模型为例，在**温度很高**时，几乎所有的自旋都是不相关的，自旋的翻转有很高的几率被接受。从而能够很快的到达不同的构型，使得到的平均值接近平衡态情形。

但是，当系统的温度降至**临界温度**附近，磁畴开始形成。单独反转一个自旋一般会提升能量，因而很难被接受。整个磁畴的反转虽然可能降低能量，但需要很多步骤才能完成。这个困难被称为临界慢化。

解决这个问题的第一个方法由 Swendsen 和 Wang 在 1987 年提出。