

三维伊辛模型临界点温度的模拟计算

林旭升

(汕头大学物理学系, 汕头, 515063)

摘要 用蒙特卡罗方法计算了三维伊辛模型的临界点温度, 模拟计算的结果表明: 与坐标空间重正化群方法相比, 蒙特卡罗方法具有过程简单, 效率高, 结果准确的特点。

关键词 伊辛模型; 临界点温度; 平均每格点磁化强度; 蒙特卡罗步

引言

二维伊辛(Ising)模型的临界问题早在40年代由昂萨格严格求出, 但三维情况的严格求解至今仍是个难题。用重正化群方法求解从理论上讲能无限接近理论解, 但选用小集团则结果不准确, 选用大集团则工作量庞大, 主要困难是累积展开(cumulant expansion)的高阶项处理十分复杂^[1]。蒙特卡罗方法是一种有效的途径, 尽管存在临界慢化问题, 但可以通过选择恰当的跃迁概率函数而得到改善^[2~4]。本文先对二维情况模拟计算, 把得到的结果与严格解比较以验证模拟算法的正确性, 再将其用到三维情况计算。

1 计算模型

图1是三维自旋网格中的任一格点处的自旋 S_i , 及其最近邻六个格点上的自旋 $S_1 \sim S_6$, 现考虑单轴各向异性情形, 即所有的 S_i 只能取 ± 1 , 最近邻的自旋相互作用能为 $E = -J \sum S_i S_j$, 其中 J 为交换积分, 对铁磁物质 $J > 0$, 求和只对每个格点的最近邻进行。

蒙特卡罗方法是: 模拟点阵系统从随机产生的一初态到与特定温度 T 对应的平衡态的演化, 得到系统在平衡状态下的各种微观态, 每个微观态给出了该温度下可接受的各格点自旋指向的一种分布, 由指向分布情况可求出磁化强度, 选取多个微观态样本求得平均磁化强度。

比较不同温度下的平均磁化强度就可确定相变临界点。具体做法是: 从初状态开始, 按一定的抽样方法决定每个格点的自旋是否反转。设 $\Delta E = E_2 - E_1$ 表示 S_i 反转前后自旋相

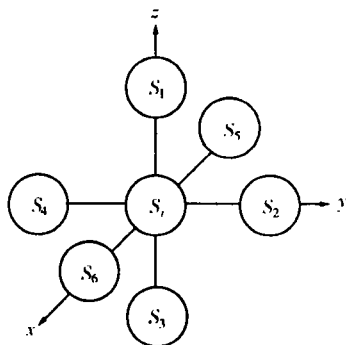


图1 三维自旋格点模型

相互作用能的增量, 取 S_i 发生变化的几率 p 满足: 当 $\Delta E \geq 0$ 时, $p = \exp(-\Delta E/kT)$; 其中 k 为玻尔兹曼常数; 当 $\Delta E < 0$ 时, $p = 1$. 当对所有的格点都进行了这样的处理后, 系统的状态就朝着某温度 T 对应的平衡态前进了一步, 称为一个蒙特卡罗步 (MCS). 经过足够多的 MCS, 系统就进入平衡态. 我们实际上是在构造系统状态演化的马尔可夫 (Markov) 过程, 这样选取 S_i 反转概率满足了细致平衡条件的要求^[5]. 下面的表 1 和表 2 给出二维、三维两种情况时 S_i 的所有近邻情形及相应的反转概率, 其中 x 表示自旋指向与 S_i 相同的最近邻格点数.

表 1 二维格点自旋的近邻情形及相应的反转概率 (取演化前 $S_i = 1$)

x	E_1	E_2	ΔE	p
4	$-4J$	$4J$	$8J$	$\exp(-8J/kT)$
3	$-2J$	$2J$	$4J$	$\exp(-4J/kT)$
2	0	0	0	1
1	$2J$	$-2J$	$-4J$	1
0	$4J$	$-4J$	$-8J$	1

表 2 三维格点自旋的近邻情形及相应的反转概率 (取演化前 $S_i = 1$)

x	E_1	E_2	ΔE	p
6	$-6J$	$6J$	$12J$	$\exp(-12J/kT)$
5	$-4J$	$4J$	$8J$	$\exp(-8J/kT)$
4	$-2J$	$2J$	$4J$	$\exp(-4J/kT)$
3	0	0	0	1
2	$2J$	$-2J$	$-4J$	1
1	$4J$	$-4J$	$-8J$	1
0	$6J$	$-6J$	$-12J$	1

2 算 法

对二维情况的具体做法如下, 作适当修改后不难扩展到三维情形:

(1) 先选定点阵的规格 $N \times N$ 及温度 (即 J/kT) 的起始值.

(2) 任取一个自旋点阵排列作为起始状态, 由每一格点 S_i 及其近邻自旋情况, 由表 1 可得 S_i 反转的概率 p . 当 S_i 为点阵边缘的格点时, 可采用周期性边界条件确定 S_i 的近邻. 即是: 如 S_i 在第一行, 则取点阵最后一行且相同列的格点做为其上近邻; 如 S_i 在最后一列上, 则取点阵第一列且相同行的格点做为其右近邻, 如此等等.

(3) 由 $[0, 1]$ 均匀分布产生一个随机数 ξ , 与得到的 p 值比较: 若 $p > \xi$ 则接受 S_i 的反转; 若 $p \leq \xi$ 则认为 S_i 不变.

(4) 按上面 (2) 和 (3) 节的方法确定点阵上所有格点的自旋指向, 即完成了一个蒙特卡罗步 (MCS).

(5) 演化足够多的 MCS (设为 N_1 步), 使系统达到平衡状态. 选取点阵的格点数越

多, 需要的 MCS 越多. 以后每隔若干 MCS (设为 N_2 步) 抽取一个状态作为样本, 计算样本的每格点磁化强度 $M = \sum S_i / N^2$, 求和对所有格点进行. 收集足够多的样本 (设为 N_3 个), 求平均每格点磁化强度 $\langle M \rangle$.

(6) 将 J/kT 值加上一增加量作为新的 J/kT 值, 重复 (2) ~ (5) 节, 即可得到 $\langle M \rangle$ 随 J/kT 值的变化关系.

3 结果及分析

按上述算法编程, 即可进行模拟计算, 表 3 为四种规格的二维点阵 40×40 , 60×60 , 100×100 和 150×150 的模拟结果. 四种规格的 N_1 次除第一种取 500 外, 后面的三种均取 2000, 而 N_2 均为 10, N_3 均为 100 个. 为使表格不致太大, 只列出部分 J/kT (0.40 ~ 0.50) 相应的结果.

表 3 三种规格的二维点阵的 $\langle M \rangle$ 随 J/kT 的变化

J/kT	0.40	0.41	0.42	0.43	0.44	0.45	0.46	0.47	0.48	0.49	0.50
40×40	0.139	0.183	0.281	0.339	0.697	0.708	0.816	0.844	0.851	0.871	0.884
60×60	0.108	0.173	0.168	0.237	0.676	0.770	0.794	0.818	0.849	0.874	0.884
100×100	0.052	0.047	0.072	0.161	0.545	0.710	0.808	0.835	0.854	0.875	0.895
150×150	0.034	0.042	0.125	0.224	0.590	0.725	0.794	0.800	0.821	0.865	0.874

从表 3 可看到: 在任何温度下, $\langle M \rangle$ 均不为零, 这主要是模型的有限尺度效应造成, 随着点阵的规模的增大而得到改善; 不管是哪一种规格的点阵, 当 J/kT 值在 0.44 以前时均接近于零, 在 0.44 附近时 $\langle M \rangle$ 均突然显著增大, 以后明显趋于缓慢, 说明临界点在 0.44 ~ 0.45 范围, 与严格解结果 0.44069 比较, 可知用表 3 来确定临界点时, 误差不会超过 3%, 说明上述的算法是正确的.

下面是坐标空间重整化群方法求解的两个例子, 对于二维三角点阵, 采用一阶累积展开算出的临界点 J/kT 值与严格解相差达 26%^[6]; 对于二维正方点阵, 文献^[7]给出临界点 J/kT 值为 0.50698, 与严格解相差超过 13%. 实际上对于重整化群方法, 从二阶累积项开始, 展开已变得十分困难. 由于工作量很大不得不做适当的切断近似, 而这又影响了结果的准确性. 因此, 采用模拟计算方法的效率高, 结果准确.

尽管三维 Ising 模型的严格解仍是一个世界难题, 但我们仍可采用模拟计算的方法求解, 方法与二维情况所用的基本相同, 注意在三维情况时 S_i 的近邻情况及反转概率应改用上面给出的表 2 外, 编程时也应应对周期性边界条件做相应的扩展. 下面的表 4 为对 $11 \times 11 \times 11$, $21 \times 21 \times 21$, $31 \times 31 \times 31$ 点阵 (用规格 1 ~ 3 表示) 的计算结果, 不难看出: 临界点 J/kT 在 0.22 ~ 0.23.

表 4 三种规格的三维点阵的 $\langle M \rangle$ 随 J/kT 的变化 ($N_1=1500$, $N_2=10$, $N_3=200$)

J/kT	0.15	0.16	0.17	0.18	0.19	0.20	0.21	0.22	0.23	0.24	0.25	0.26	0.27	0.28
规格 1	0.048	0.057	0.059	0.079	0.098	0.113	0.145	0.279	0.491	0.657	0.727	0.797	0.827	0.857
规格 2	0.020	0.018	0.025	0.021	0.030	0.040	0.057	0.125	0.514	0.643	0.730	0.779	0.821	0.855
规格 3	0.010	0.011	0.014	0.014	0.018	0.021	0.031	0.051	0.495	0.615	0.718	0.781	0.828	0.851

通过缩小 J/kT 取值范围、降低其增量再进行模拟计算, 应可准确决定临界点的位置, 下面对规格 3 点阵的进行计算, J/kT 取值范围缩小在 $0.22 \sim 0.23$, J/kT 的增量为 0.001 . 由表 5 可看出, 当 J/kT 值从 0.223 增至 0.224 时 $\langle M \rangle$ 从 0.128 增至 0.222 , 变化最大, 故临界点的 J/kT 值取为 0.223 .

表 5 三维情况的临界点的确定 ($N_1=1500$, $N_2=10$, $N_3=200$)

J/kT	0.220	0.221	0.222	0.223	0.224	0.225	0.226	0.227	0.228	0.229	0.230
规格 3	0.051	0.088	0.108	0.128	0.222	0.284	0.352	0.421	0.462	0.487	0.495

参 考 文 献

- 1 北京大学物理学系《量子统计物理学》编写组, 量子统计物理学. 北京: 北京大学出版社, 1987. 380~400
- 2 Swendsen R H and Wang J S, Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. *Phys. Rev. Lett.* 1987, 58 (2): 86~88
- 3 Hasenbusch M, and Meyer S. Cluster—update acceleration of interface roughening in the 3D Ising model. *Phys. Rev. Lett.* 1991, 66 (5): 530~533
- 4 Kabdel D, Domany E, Brandt A. Simulations without critical slowing down; Ising and three—state Potts models. *Physical Review B*, 1989, 40: 330~344
- 5 K. 宾德等. 统计物理学中的蒙特卡罗模拟方法. 秦克诚译. 北京: 北京大学出版社, 1994. 21~24
- 6 北京大学物理学系《量子统计物理学》编写组, 量子统计物理学. 北京: 北京大学出版社, 1987. 394
- 7 冯 端等. 金属物理学. 第二卷. 相变. 北京: 科学出版社, 1990. 362~366

A simulation for calculating the critical point temperature of 3D Ising model

Lin Xusheng

(Department of Physics, Shantou University, Shantou, 515063)

Abstract A Monte—Carlo simulation is used to calculate the critical point temperature of 3D Ising model. Results show that the simulation is simple in processing, high in efficiency and accurate in finding result when compared with the position space renormalization group (PSRG) method.

Key words Ising model; critical point temperature; intensity of magnetization per lattice point; Monte-Carlo step