

蒙特卡洛方法求解 Ising 模型

何翼成 *

May 18, 2022

Project 1

一 题目分析



二维Ising模型的蒙特卡洛模拟（5月18日交）

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle}^N s_i s_j \cdot \text{The spin } s_i \text{ for } i = 1, 2, \dots, N \text{ can take values of either } 1 \text{ or } -1,$$

$$\langle m^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \left\langle \left(\sum_i s_i \right)^2 \right\rangle \quad C = \frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2}{N k_B T^2}.$$

对于三种不同尺寸 (8*8,12*12,16*16)的的2D正方格子 (周期边界条件),画出 m^2 和比热 C 随温度变化的曲线 (不同尺寸相同的物理量画在同一张图上, 取 $J=1$,温度区间取 $1 < T < 3$,温度间隔取0.05

Figure 1: 题目总览

二 代码展示

```
1 clear;clc;
2 Ls=[8,12,16];
3 dT=0.025;Tspan=1:dT:3;
4
```

*学号:520072910043;
邮箱地址: heyicheng@sjtu. edu. cn

```

5 %生成随机初始条件的自旋矩阵
6 N=6e6;%计算次数
7 L_m2=zeros(3,length(Tspan));L_C=L_m2;%分配数据位置
8 for ii=1:3
9     L=Ls(ii);%确认2D正方格子尺寸
10    M=randi([0,1],L,L)*2-1;%生成随机磁矩矩阵
11    m2_T=zeros(1,length(Tspan));H2_T=m2_T;H1_T=m2_T;%分配数据位置
12    for Tn=1:length(Tspan)
13        T=Tspan(Tn);
14        m2_s=[];H2_s=[];H1_s=[];%分配数据位置
15        for nn=1:N
16            M_1=M;%保留磁矩矩阵的原信息
17            loc=randi([1,L],1,2);%随机翻转自旋的坐标
18            x=loc(1);y=loc(2);
19            M_2=M;M_2(x,y)=-M_1(x,y);%翻转后的磁矩矩阵
20            %计算能量差
21            pudM=pud(M);
22            deltaE=2*M_1(x,y)*(pudM(x+2,y+1)+pudM(x,y+1)+pudM(x+1,y+2)+pudM(x+1,y));
23            %判断状态是否保留
24            flag=Metro(deltaE,T);
25            if flag==1
26                M=M_2;
27            else
28                M=M_1;
29            end
30            %计算当前时刻的各物理量，保留以进行时间平均
31            m2=(sum(M(:))^2)/(L^4);
32            H1=H(M);
33            H2=H1^2;
34            m2_s(end+1)=m2;
35            H2_s(end+1)=H2;
36            H1_s(end+1)=H1;
37        end
38        %计算m^2,H^2,H在T=Tspan(Tn)下的期望值
39        l=length(m2_s);
40        m2_s_avg_Tn=sum(m2_s)/l;
41        H2_s_avg_Tn=sum(H2_s)/l;
42        H1_s_avg_Tn=sum(H1_s)/l;
43        %将上述数值记录在提前分配的内存中，以方便进行下一步计算
44        m2_T(Tn)=m2_s_avg_Tn;
45        H2_T(Tn)=H2_s_avg_Tn;
46        H1_T(Tn)=H1_s_avg_Tn;
47        disp("任务数为"+ii+" / 3,已完成第"+Tn+"轮计算，进度为"+Tn/length(Tspan)*100+"%")
48    end
49    L_m2(ii,:)=m2_T;
50    L_C(ii,:)=(H2_T-H1_T.^2)./(L^2*Tspan.^2);
51 end
52 figure(1)
53 plot(Tspan,L_m2(1,:), 'r',Tspan,L_m2(2,:), 'k',Tspan,L_m2(3,:), 'b')

```

```

54 xlabel('Temperature');ylabel('<m^2>');
55 legend("L=8","L=12","L=16");
56 figure(2)
57 plot(Tspan,L_C(1,:), 'r',Tspan,L_C(2,:), 'k',Tspan,L_C(3,:), 'b')
58 xlabel('Temperature');ylabel('C');
59 legend("L=8","L=12","L=16");
60 %%
61 %Metropolis算法函数的定义
62 function flag=Metro(deltaE,T)
63     beta=1/T;
64     if deltaE<=0
65         p=1;
66     else
67         p=exp(-beta*deltaE);
68     end
69     z=rand();
70     if z<p
71         flag=1;
72     else
73         flag=0;
74     end
75 end
76 %%
77 %Pud, 辅助计算。输出(L+2)**2的矩阵
78 function pudM=pud(M)
79 L=size(M,1);
80 pudM=zeros(L+2,L+2);%分配储存空间
81 %padding, 采用周期性边界条件
82 pudM(2:(L+1),2:(L+1))=M;
83 %行的移动
84 pudM(1,2:(L+1))=M(L,:);
85 pudM(L+2,2:(L+1))=M(1,:);
86 %列的移动
87 pudM(2:(L+1),1)=M(:,L);
88 pudM(2:(L+1),L+2)=M(:,1);
89 end
90
91 %能量计算
92 function E=H(M)
93 L=size(M,1);
94 pudM=pud(M);
95 H=0;
96 for i=2:L
97     for j=2:L
98         H=H-pudM(i,j)*(pudM(i,j-1)+pudM(i,j+1)+pudM(i-1,j)+pudM(i+1,j));
99     end
100 end
101 E=H/2;
102 end

```

三 结果分析与结论

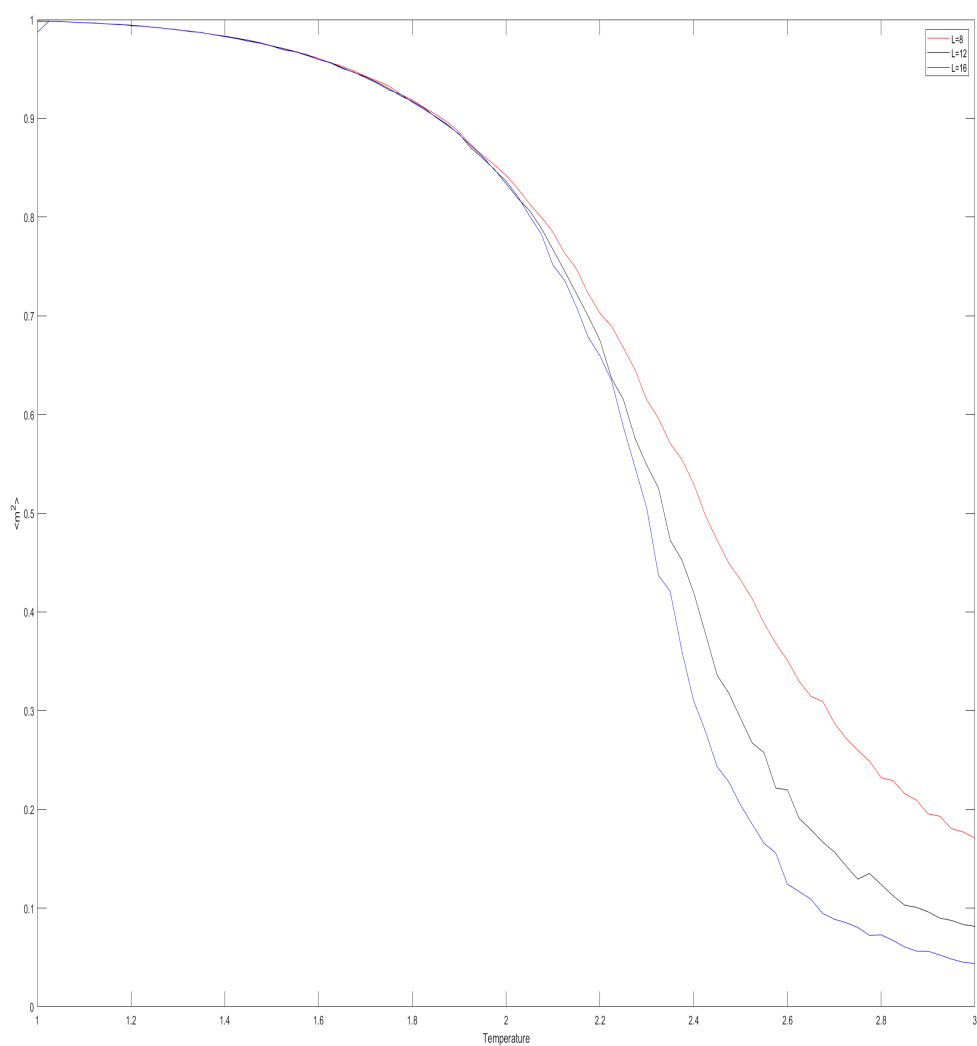


Figure 2: m 的平方随温度 T 的变化

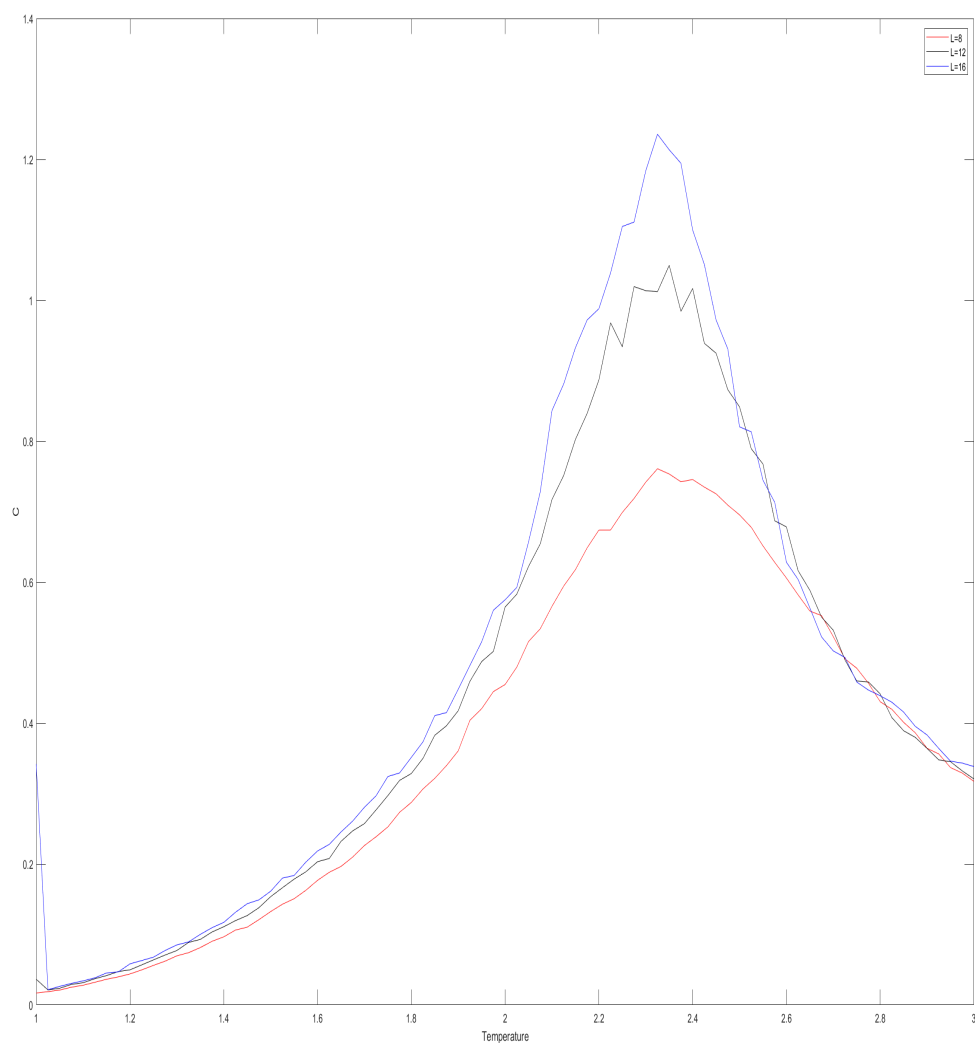


Figure 3: C 随温度 T 的变化