二维 Ising 模型的 Monte Carlo 模拟

冉余 2015301020145 物基二班

【摘要】

介绍二维 Ising 模型的Monte Carlo 模拟。用蒙特卡罗模拟解决 Ising 模型的具体结果。通过研究在不同温度下的磁化曲线，展示了磁性系统的一级相变和磁滞现象。

【关键词】

二维 Ising 模型；Monte Carlo；铁磁性；相变

【背景介绍】

Ising 模型是统计物理中迄今为止唯一的一个同时具备:表述简单、内涵丰富、应用广泛这三种优点的模型。Ising 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（也二级相变）。Ising 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。而当系统处于临界温度 T_C 的时候，Ising 模型表现出一系列幂律行为和自相似现象。

Ising 模型之所以具有如此广泛的应用并不仅仅在于它的模型机制的简单性，更重要的是它可以模拟出广泛存在于自然、社会、人工系统中的临界现象。所谓的临界现象，是指系统在相变临界点附近的时候表现出的一系列的标度现象（Scaling phenomena），以及系统在不同尺度之间的相似性。临界系统之中不同组成部分之间还会发生长程的关联，这种通过局部相互作用而导致长程联系的现象恰恰是真实复杂系统，如社会、经济、认知神经系统的复杂性所在。因此，Ising 模型不仅仅是一个统计物理模型，它更是一个建模各种复杂系统模型的典范。

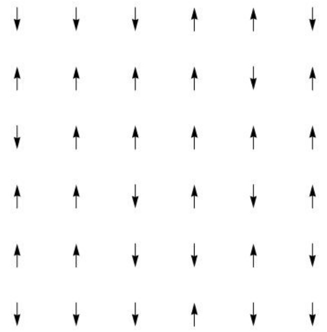
Monte Carlo 方法即统计模拟方法是一种以概率统计理论为指导的数值计算方法，其在许多领域具有重要作用，‘Monte Carlo’一词即是来源于摩纳哥著名赌场的名字。在许多数学、物理问题中，我们常常遇到难以精确求解的问题，而这种问题又可以通过一定的概率模型来构造近似解，这种情况下 Monte Carlo 方法往往十分有效。MonteCarlo 方法最典型的一个应用就是用来进行数值积分。数值积分有不少方法，例如矩形法、梯形法、Simpson 法等，但是它们几乎都只能用来处理低维的积分，对于高维积分完全无能为力。Monte Carlo 方法可以克服这一缺点，对于物理问题中常常遇到高自由度的积分，其误差按中心极限定理仍然随随机试验次数衰减。因而 Monte Carlo 方法是模拟多自由度系统非常有效的方法。

【正文】

Ⅰ. 二维 Ising 模型的 Monte Carlo 方法

1. Ising 模型的表述

[1]考虑一个如下图所示的晶格世界:



假设第i个节点是一个小磁针，每个小磁针有上下两种状态，我们用S_i来表示这个状态，并且

$$s_i = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases}$$

表示磁针朝上或者朝下。网格上相邻的两个小磁针可以发生相互作用。

总能量：

我们可以通过总能量的概念来刻画这种相互作用：即如果两个相邻方格的小磁针状态一致（例如都是朝上），则系统的总能量减 1 单位，否则如果不同就加 1 单位。外界还可能存在磁场，如果小磁针方向与外场方向一致，则能量也会降低。我们定义总能量：

$$E = -J\sum_{<i,j>} s_i s_j - H\sum_i s_i$$

其中J为一个能量耦合常数，E表示系统处于状态组合$\{s_i\}$下的总能量。求和下标$<i,j>$表示对所有相邻的两个小磁针进行求和。我们看到，如果$s_i = s_j$，则总能量就会减少J。H表示外界磁场的强度,它是一个参数，如果外界磁场向上H为正，否则为负。如果某个小磁针的方向与外场一致，则总能量减少一个单位。

温度：

系统的演化并不完全由总能量决定。由于小磁针处于噪声环境中，热涨落又会引起小磁针的状态随机反转。我们可以用温度T来衡量这种环境影响的随机性。T越高，则小磁针发生反转的概率就会越大。

这样，有两种力作用在小磁针上，一种力来源于相邻小磁针以及外场对它的影响，这种影响倾向于使得相邻的小磁针彼此状态一致或者与外场尽量一致，即尽量使得系统的总能量达到最低。另外一种力则来源于环境噪声的扰动，它迫使小磁针无视相邻小磁针的作用而发生随机的状态反转。于是，每个小磁针就挣扎于这两种不同的力量之间。不难想象，假如温度T趋于 0，则每个小磁针都会与外场相一致，那么，最终系统将处于全是+1 或者全是-1 的状态（取决于外场H是正还是负）。假如T特别高，而相互作用强度J特别小，则邻居间的作用可以忽略，每个小磁针都完全随机地取值。

于是，整个 Ising 模型就有两个给定的参数T,H来表示环境的温度和磁场强度。

2. Monte Carlo 方法

自然界中存在不少铁磁物质，其特点是无需外加磁场 H 就可以有显著非零的磁化强度 M ，这称为自发磁化，而外磁场的存在则可以改变磁化的取向，但往往会有明显的磁滞效应[2]，即磁性系统的状态会受历史状态显著影响。另外，铁磁性材料对于温度具有一定的敏感性，在低温时呈现铁磁性的材料在突破某一临界温度T时，可以发生顺C磁相变而成为顺磁材料。经典物理的分子环流理论一定程度上可以很好地

解释物质的顺磁性[3]，但对于物质铁磁性质以及与之有关的相变过程则完全无能为力。事实上，量子力学表明物质的铁磁性来源于电子自旋磁矩[4]，这些磁矩之间有着非常强的相互作用，形成强关联系统，正是这种强关联，导致了低温下铁磁物质的自发磁化。

Ising 模型是研究铁磁系统的铁磁性及其有关相变过程的十分成功的模型。Ising 模型虽然十分简单,但其解析解却十分难以得到,20 世纪 40 年代Onsager[4]首次解析地得到无外加磁场情况下二维 Ising 模型的解析解 Onsager 解是统计力学中短程关联系统的第一个可以相变的解析解，在此之前人们一直认为统计力学无法预言相变。但直至今日，有外加磁场的二维 Ising 模型，以及更高维度的 Ising 模型的严格解析解仍未能得到。考虑到最近邻磁矩的相互作用和每个磁矩与外场 H 的相互作用，则系统的能量[5]可以写为：

$$E = -J\sum_{<i,j>} s_i s_j - \mu H \sum_i s_i \qquad \text{[Ising 模型能量] (1)}$$

其中第一项要对所有相邻磁矩求和。

下面我们来讨论 Ising 模型的计算机模拟：

在一个仿真周期，模拟程序会根据当前的状态组合 $s_i(t)$，进行小的改进（例如翻转某个小磁针），从而得到一个新的状态组合 $s_i^{'}$，但是系统下一时刻的状态并不是直接取该状态组合，而是根据概率发生：

$$s_i(t+1) = \begin{cases} s_i^{'} & with\ \ possibility\ \ \ \mu \\ s_i & with\ \ possibility\ 1\text{-}\ \mu \end{cases}$$

其中概率按照下面公式计算：

$$\mu = \min\{\exp(E(s_i(t) - E(s_i^{'}))/(KT)),1\}$$

也就是说，系统会按照概率 μ 接受新的状态组合 $s_i^{'}$。其中 μ 与新状态组合能量与当前能量的差值以及温度有关。如果状态组合 $s_i^{'}$ 的能量值大于原状态组合 $s_i(t)$ 的能量值，则 $\mu < 1$ 但不为 0，所以系统有可能接受这个状态组合。如果 $E(s_i^{'}) < E(s_i(t))$，则 $\mu = 1$，则系统肯定会接受状态组合 $s_i^{'}$。这样，系统会更加倾向于往能量减少的状态组合方向演化，但是也会以一定的概率演化到能量大的状态组合，这种演化到能量较大的状态组合的概率由参数 T 确定。如果 T 越大，则系统接受一个能量较高状态组合的概率也会越大，也就是说系统越随机。否则系统会比较规矩地沿着能量下降的方式演化，系统相对秩序。

按照这个接受概率规则，每一时刻，系统生成一个新的候选状态组合，然后再根据能量的大小决定是否接受它。于是，就进行了一步系统演化。

按照上述算法，系统可以最终达到如下的概率分布状态：

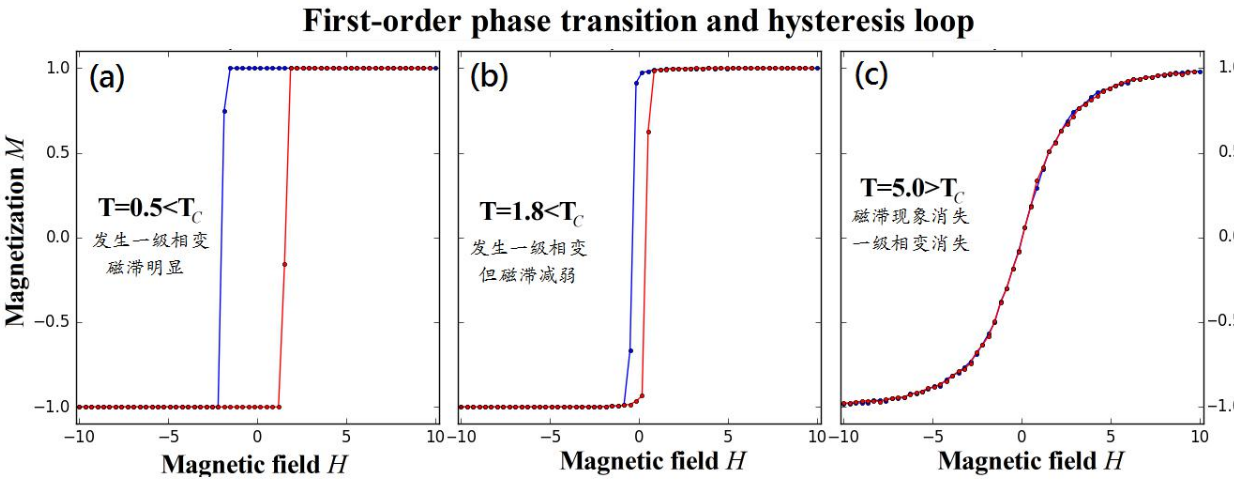
$$P_s = \frac{1}{Z}\exp(-\frac{E_s}{KT}) \qquad \text{[Boltzman 分布] (2)}$$

这和假设该系统与一个温度为 T 的定温热源接触，系统微观态服从的 Boltzmann 分布一样。

Ⅱ.Ising 模型的一级相变

Ising 模型中有温度、磁场强度两个可调的环境参数，这使得 Ising 模型不仅可以展示二级相变，还可以展示一级相变。和二级相变相比，一级相变往往变化更突然，没有涨落的变大来预兆一级相变的发生。我们通过考虑不难得到：磁矩系统低温下自发磁化，但是自发磁化的取向在没有外磁场时应该是随机的(两个取向是同等的稳态)，但是一旦加上外磁场，则沿外磁场的自发磁化成为真正的稳态，相反的自发磁化取向变成亚稳的，可以想见，磁矩只要经历充分长的时间，一定会翻转到与外磁场相

同的方向；倘若外磁场一旦反向，则磁矩会再次翻转，此即所谓一级相变。值得一提的是，由于亚稳态仍然存在，因此系统越过从亚稳态翻转到稳态需要越过一定的势垒，这往往就



会带来磁滞效应。而且可以预见，温度越高时，热运动剧烈，则磁矩应该更容易越过势垒，从而磁滞效应应该减弱，另一方面，温度升高过临界温度以后，由于自发磁化现象消失，预计一级相变也会消失。下面就通过 Monte carlo 方法模拟 Ising 模型的一级相变问题。相应的程序可见 fianl-code。可以发现，磁矩系统在磁场强度越过零点时，翻转非常迅速。除了偶尔的涨落以外，磁矩大部分翻转。可见 Ising 模型内确实存在一级相变。为进一步研究一级相变与温度的关系，以及磁滞现象，我们改变温度参数，在不同的温度下作出磁场强度变化时磁矩系统的磁化强度随之的改变。相应的结果如上图所示。

【结论】

通过研究在不同温度下的磁化曲线，展示了磁性系统的一级相变和磁滞现象。并且发现，一级相变对于温度是敏感的，当温度低于临界温度时，可以有一级相变，但是温度高于临界温度以后，磁化强度不再跃变，取而代之的是缓慢的连续变化，一级相变消失。磁滞现象也对温度敏感，低温下磁滞现象明显，温度升高之后，磁滞现象有所减弱，温度超过临界温度以后，磁滞现象已经十分微弱。

Ising 模型不仅仅是一个统计物理模型，它更是一个建模各种复杂系统模型的典范。

【参考文献】

[1] 集智百科.ISING 模型[Z].

[2] 赵凯华, 陈熙谋. 电磁学[M]. 高等教育出版社, 2011.

[3] Kittel C. Introduction to solid state physics[M]. Wiley, 2005.

[4] Herrera J M, Bachschmidt A, Villain F, et al. Mixed valency and magnetism in cyanometallates and Prussian blue analogues[J]. Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 2008, 366(1862): 127-138.

[5] 百度百科.伊辛模型[Z].