

二维伊辛模型及其变体的Metropolis算法模拟

摘要

本文首先介绍了该模型在特定条件下的精确解，包括Lars Onsager关于临界温度 (T_c) 的解析解和杨振宁关于自发磁化强度 (M) 的解析解。随后，阐述了采用Metropolis蒙特卡洛算法模拟二维伊辛模型的步骤及其理论基础，包括马尔科夫链、细致平衡条件和玻尔兹曼分布。在此基础上，进一步研究了对经典伊辛模型哈密顿量的六种典型扩展与修正：(1) 改变耦合常数J的大小及符号；(2) 引入随机耦合常数 J_{ij} 的自旋玻璃模型 (Edwards-Anderson模型)；(3) 讨论自旋态数大于二的高自旋伊辛模型 (4) 自旋态数大于二的Potts模型；(5) 采用自旋可在二维平面连续取向的XY模型；(6) 引入非零外磁场H。针对每一种扩展，讨论了其临界温度 T_c (或冻结温度 T_g)、磁化强度 $M(T)$ (或相关序参量) 的理论公式 (若存在解析解) 或其缺失的原因，并通过Metropolis算法模拟观察到的热图或箭头图等现象进行了分析，尽可能与理论 T_c 、 $M(T)$ 进行照应。

I. 二维伊辛模型的精确解

经典伊辛模型的哈密顿量为：

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

- J : 相邻自旋间的耦合常数
- s_i : 每个格点的自旋取值，经典取值为 $\{-1, +1\}$
- B : 外磁场
- 在二维晶格下每个格点自旋与周围四个最近邻格点相互耦合

Lars Onsager在1944年发表的论文《Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition》中，首次给出了二维方格晶格伊辛模型在零外磁场 ($H = 0$) 条件下的严格解，精确地确定了相变点的存在。Onsager得到了临界温度 T_c (设 $k_B = 1$) (居里温度)为：

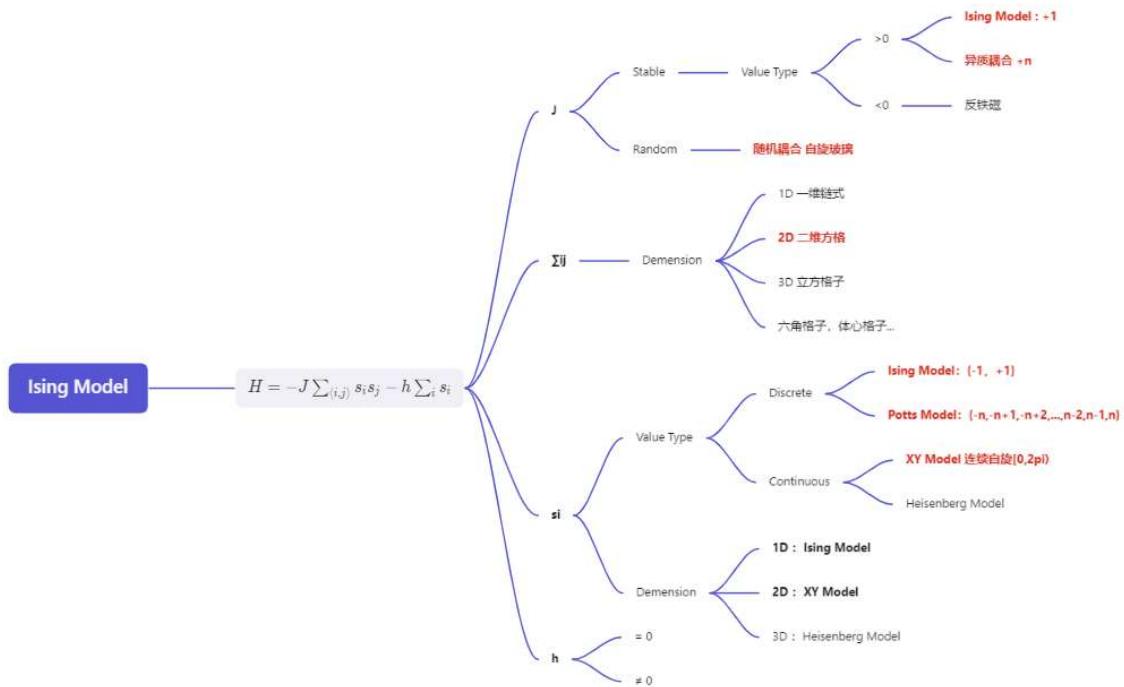
$$T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})}$$

1952年，C.N.Yang应用了Onsager-Kanfram的矩阵方法等等，得到了在零外磁场 ($B = 0$) 且温度低于 T_c 时，二维晶格伊辛模型的自发磁化的闭式表达式：

$$M(T) = \left[1 - \sinh^{-4} \left(\frac{2J}{k_B T} \right) \right]^{1/8}$$

在后续验证模拟结果是否有效时，我们会参考这些理论结果。

II. 可更改的参数与变体模型



从哈密顿量 $H = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i$ 的表达式中，可以发现实际上我们可以对如图所示的参数进行更改以探索它们对系统演化的影响，一些更改会对应与 Ising 模型相似的其他典型模型。图中**标红标粗**的部分是我们会进行模拟的部分。

我们将重点探讨对标准二维伊辛模型哈密顿量的六种关键参数或模式的修改：

- 耦合常数 J 为定值，但 $J \neq 1$
- 耦合常数 J_{ij} 不为定值，而是随机分布 <二维 Edwards-Anderson 自旋玻璃模型>
- $N_s \neq 2$ 的多态自旋
- q 状态的 Potts 模型，耦合机制比有热涨落（容错更大）的常规系统更强烈
- s_i 不再是离散值与标量，而是一个可以在二维平面连续取值的自旋矢量
- 外磁场 $B \neq 0$

III. Metropolis 算法

我们知道最低能量系统对应着最概然分布（玻尔兹曼分布），因此宏观上看来系统会倾向向能量降低的方向演化。我们可以用 Metropolis、Rosenbluth 夫妇、Teller 夫妇于 1953 年提出的 Metropolis 算法来模拟这个过程。

Metropolis 算法是一种广泛应用于模拟统计物理系统的蒙特卡洛方法，对于伊辛模型，其主要方法是每个格点设置一个统一的演化规则，使系统的一系列自选构型出现的概率服从玻尔兹曼分布

$$P(S) \propto \exp\left(-\frac{E(S)}{k_B T}\right)$$

3.1 初始话

首先，我们先在二维网格上随机设置每个格点的自旋值：

```
In [ ]: # 使用连续, 矢量 si (XY) 模型:
    if self.use_xy_model:
        self.lattice = np.random.uniform(0, 2 * np.pi, size=(L, L)) # 随机初始化XY模
        self.model_type_str = "XY"
```

```

        self.num_states = 0
        self.spin_values = None
    # 使用离散, 标量 si (Ising/Potts)模型:
    else:
        self.num_states = int(num_states_for_ising_potts) # si的可能状态数
        if self.num_states <= 1 :
            raise ValueError("Ising/Potts模型的自旋状态数必须大于1")
        self.spin_values = np.arange(self.num_states) - (self.num_states - 1) / 2.0
        self.lattice = np.random.choice(self.spin_values, size=(L, L)) # 初始化晶格

```

以及格点之间的耦合常数 J_{ij} :

```
In [ ]: if self.use_random_J:
    self.J_max_for_random = abs(random_J_max) if not np.isclose(random_J_max, 0)
    # 为每个水平和垂直键生成 [-J_max, J_max] 范围内的随机J值
    self.J_horizontal = np.random.uniform(-self.J_max_for_random, self.J_max_for_random)
    self.J_vertical = np.random.uniform(-self.J_max_for_random, self.J_max_for_random)
else:
    self.J_single = J_value # 单一J值
```

3.2 迭代步骤

a. 演化判定

随机选取一个格点, 以一定的演化规则判定其自旋值是否要改变:

```
In [ ]: # Metropolis算法的单步更新
def metropolis_step(self):
    # 随机选一个格点
    r, c = random.randint(0, self.L - 1), random.randint(0, self.L - 1)

    if self.use_xy_model:
        # 随机生成一个新的角度
        new_angle = np.random.uniform(0, 2 * np.pi)
        # 计算能量变化
        delta_E = self._calculate_delta_E(r, c, new_angle)
        # 如果能量降低或满足Metropolis准则, 则接受新角度
        if delta_E <= 0 or (self.T > 1e-9 and random.random() < np.exp(-self.beta * delta_E)):
            self.lattice[r, c] = new_angle
    else:
        s_old = self.lattice[r, c]
        if self.num_states <= 1: return

        # 从除了当前状态以外的其他可能状态中随机选择一个新状态
        possible_new_states = [s for s in self.spin_values if not np.isclose(s, s_old)]
        if not possible_new_states: return

        # 随机选择一个新的状态
        s_new = random.choice(possible_new_states)
        # 计算能量变化
        delta_E = self._calculate_delta_E(r, c, s_new)
        # 如果能量降低或满足Metropolis准则, 则接受新状态
        if delta_E <= 0 or (self.T > 1e-9 and random.random() < np.exp(-self.beta * delta_E)):
            self.lattice[r, c] = s_new
```

我们可以看到, 演化规则其实是:

$$P = \begin{cases} 1, & \Delta E \leq 0 \\ e^{-\Delta E/(k_B T)}, & \Delta E > 0 \end{cases}$$

其中 P 为改变该格点自旋值（在 $N_s = 2$ 时即为翻转）的概率， ΔE 为进行此自旋改变会为系统带来的能量改变

也就是当此自旋值的改变能降低系统能量的话，就直接确认选择改变；当此改变会升高系统能量时，以与升高能量呈指数级负相关的概率选择是否还是要选择改变。

注意，当 $N_s \neq 2$ 时，随机选取了格点之后，还要在剩余自旋状态里随机选择一个目标状态。

b. 计算 ΔE

针对不同的 $\{J, N_s, Dim(s_i), H\}$ 参数情况，我们对这个最小步骤metropolis_step进行相应 ΔE 的计算：

```
In [ ]: # 计算Delta_E: 某格点自旋从旧状态变为新状态时，系统能量的变化
def _calculate_delta_E(self, r, c, new_spin_val_or_angle):
    if self.use_xy_model:
        theta_old = self.lattice[r, c]
        theta_new = new_spin_val_or_angle
        if np.isclose(theta_old, theta_new): return 0.0
    else:
        s_old = self.lattice[r, c]
        s_new = new_spin_val_or_angle
        if np.isclose(s_old, s_new): return 0.0

    # 获取格点(r,c)的四个最近邻的状态值（使用周期性边界条件）
    s_up = self.lattice[(r - 1) % self.L, c]
    s_down = self.lattice[(r + 1) % self.L, c]
    s_left = self.lattice[r, (c - 1) % self.L]
    s_right = self.lattice[r, (c + 1) % self.L]
    neighbors_states = [s_up, s_down, s_left, s_right]

    # 获取连接格点(r,c)与邻居的四个J值
    if self.use_random_J:
        Js_for_bonds = [self.J_vertical[(r - 1) % self.L, c], self.J_vertical[r, c],
                         self.J_horizontal[r, (c - 1) % self.L], self.J_horizontal[r, (c + 1) % self.L]]
    else:
        Js_for_bonds = [self.J_single] * 4

    delta_E_interaction = 0 # 初始化ΔE的相互作用部分
    delta_E_field = 0 # 初始化ΔE的外场部分

    if self.use_xy_model:
        # XY模型能量计算: E_interaction = -J * cos(theta_i - theta_j)
        for i in range(4): # 分别计算四边再相加
            J_bond = Js_for_bonds[i]
            theta_k = neighbors_states[i]
            delta_E_interaction += -J_bond * (np.cos(theta_new - theta_k) - np.cos(theta_old - theta_k))
        # 外场对XY模型的贡献（假定外场H沿x轴方向, H_scalar > 0 表示场指向 +x）
        delta_E_field = -self.H_scalar * (np.cos(theta_new) - np.cos(theta_old))

    elif self.use_potts_interaction:
        # Potts模型能量计算: E_interaction = -J * delta(s_i, s_j)
        for i in range(4): # 分别计算四边再相加
            J_bond = Js_for_bonds[i]
            s_k = neighbors_states[i]
            term_old = 1.0 if np.isclose(s_old, s_k) else 0.0
            term_new = 1.0 if np.isclose(s_new, s_k) else 0.0
            delta_E_interaction += -J_bond * (term_new - term_old)
        # 外场对Potts模型的贡献
        delta_E_field = -self.H_scalar * (s_new - s_old)

    else:
        # Ising能量计算: E_interaction = -J * s_i * s_j
```

```

    for i in range(4):
        J_bond = Js_for_bonds[i]
        s_k = neighbors_states[i]
        delta_E_interaction += -J_bond * s_k * (s_new - s_old)
    # 外场对Ising的贡献
    delta_E_field = -self.H_scalar * (s_new - s_old)

    return delta_E_interaction + delta_E_field # 总能量变化= ΔE_interaction + ΔE_field

```

总结下来就是对于格点 (i, j) 的自旋改变，总能量变化为：

$$\Delta E = \Delta E_{\text{interaction}} + \Delta E_{\text{field}}$$

其中相互作用能的变化 $\Delta E_{\text{interaction}}$ 对于不同模型有不同的计算方式：

Ising Like:

$$\Delta E_{\text{interaction}} = - \sum_{k \in \text{n.n.}} J_{ik} s_k (s_{\text{new}} - s_{\text{old}})$$

Potts:

$$\Delta E_{\text{interaction}} = - \sum_{k \in \text{n.n.}} J_{ik} [\delta(s_{\text{new}}, s_k) - \delta(s_{\text{old}}, s_k)]$$

XY:

$$\Delta E_{\text{interaction}} = - \sum_{k \in \text{n.n.}} J_{ik} [\cos(\theta_{\text{new}} - \theta_k) - \cos(\theta_{\text{old}} - \theta_k)]$$

其中：

- n.n. 表示最近邻格点集合
- J_{ik} 为耦合常数
- s_k 为邻居格点的自旋值
- $s_{\text{new}}, s_{\text{old}}$ 为自旋的新旧取值
- $\theta_{\text{new}}, \theta_{\text{old}}$ 为XY模型中自旋的新旧角度

Ising Like/Potts:

$$\Delta E_{\text{field}} = -H(s_{\text{new}} - s_{\text{old}})$$

XY:

$$\Delta E_{\text{field}} = -H(\cos \theta_{\text{new}} - \cos \theta_{\text{old}})$$

其中：

- H 为外场强度（对于XY模型，假定外场沿x轴正方向）

c. 步进

在Metropolis算法中，一个Monte Carlo Step是指平均每个自旋都尝试了一次翻转(也就是 $L * L$ 次随机选择格子，随机判定是否翻转/改变自旋值，其中 L 为方形模拟网络的边长格子数)，所以我们定义一个Sweep为执行 $L * L$ 次Metropolis_step：

```
In [ ]: # 运行nums_sweeps_to_run次sweep
          # 每个sweep包含N个Metropolis单步(sweep:平均每个自旋都被尝试改变一次)
```

```

def run_model_sweeps(self, num_sweeps_to_run):
    for _ in range(num_sweeps_to_run): [self.metropolis_step() for _ in range(self.N)

```

在程序中，我们对一个模拟会运行的默认Sweep个数可以在 Class Ising_app 的 `__init__` 初始化中修改：

```

In [ ]: # 常规模拟的sweep默认设置
self.total_sweeps_to_show = 500 # 总sweeps
self.sweeps_per_frame = 2 # 每隔多少sweeps更新一次图像
self.data_log_interval = 5 # 每隔多少sweeps记录一次M/E数据

# 批量实验的Sweep默认设置
self.batch_sweeps_per_temp_var = tk.StringVar(value="500")

```

d. Metropolis算法的原理

为什么

$$P = \begin{cases} 1, & \Delta E \leq 0 \\ e^{-\Delta E/(k_B T)}, & \Delta E > 0 \end{cases}$$

这个演化规则会起作用呢？这是个对单个格点的判定，但明明每个粒子自身是无法知道自己的自旋要如何改变才能让系统能量降低的——

这个算法的核心在于构造了一个**马尔科夫链 (Markov Chain)**，概率满足细致平衡条件：

$$P_{eq}(\mathcal{S}_A)W(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B) = P_{eq}(\mathcal{S}_B)W(\mathcal{S}_B \rightarrow \mathcal{S}_A)$$

- $P_{eq}(\mathcal{S}_A)$: 在目标分布下系统处于状态（构型）A的概率
- $W(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B)$: 从状态A转移到状态B的条件概率

这类似于我们推导各种分布（不限于玻尔兹曼分布）时所使用的**等概率原理**，或者说这个等式形象地体现了**稳态**的要求。

怎么让这个等式成立呢，我们让

$$g(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B)$$

表示从状态A**提议**到状态B的概率

$$A(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B)$$

表示这个提议的**接受**概率

那么

$$W(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B) = g(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B)A(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B)$$

在我们的算法中， $g(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B) = g(\mathcal{S}_B \rightarrow \mathcal{S}_A)$ (这是Metropolis-Hastings算法提议概率对称的特例)，因此细致平衡条件变为：

$$P_{eq}(\mathcal{S}_A)A(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B) = P_{eq}(\mathcal{S}_B)A(\mathcal{S}_B \rightarrow \mathcal{S}_A)$$

我们发现这个式子很对称，而这个算法用了一个特别的解：

$$A(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B) = \min \left(1, \frac{P_{eq}(\mathcal{S}_B)}{P_{eq}(\mathcal{S}_A)} \right)$$

$A(\mathcal{S}_B \rightarrow \mathcal{S}_A)$ 同理。

因此在玻尔兹曼分布

$$P_{eq}(\mathcal{S}) = \frac{1}{Z} e^{-E(\mathcal{S})/(k_B T)}$$

下，当 $E_{\mathcal{S}_A} > E_{\mathcal{S}_B}$ 时

$$A(\mathcal{S}_A \rightarrow \mathcal{S}_B) = \min \left(1, \frac{P_{eq}(\mathcal{S}_B)}{P_{eq}(\mathcal{S}_A)} \right) = \min \left(1, e^{-(E(\mathcal{S}_B) - E(\mathcal{S}_A))/(k_B T)} \right) = 1$$

$$A(\mathcal{S}_B \rightarrow \mathcal{S}_A) = \min \left(1, \frac{P_{eq}(\mathcal{S}_A)}{P_{eq}(\mathcal{S}_B)} \right) = \min \left(1, e^{-(E(\mathcal{S}_A) - E(\mathcal{S}_B))/(k_B T)} \right) = e^{-(E(\mathcal{S}_A) - E(\mathcal{S}_B))/(k_B T)}$$

此时代入细致平衡条件公式，会发现等式两边都等于 $P_{eq}(\mathcal{S}_A)$ ，等式成立。同理，当 $E_{\mathcal{S}_A} < E_{\mathcal{S}_B}$ ，等式两边都等于 $P_{eq}(\mathcal{S}_B)$

也就是说，这个算法不仅适用于构造玻尔兹曼分布，只要已知根据目标分布，就可以根据该分布下两个状态的概率比值大小，来设计两个状态间转移的概率，分布概率越大越容易成功转移到。这也非常地符合直觉。

- 这里向高能量演化的概率 $e^{-\Delta E/(k_B T)}$ 类似于一种热涨落，也提供了对相空间更充分的探索，否则只使用 $\Delta E < 0$ 的贪心算法会更容易陷入能量的局部最小值
- 构建马尔科夫链相当于通过一种智能的随机行走过程，有效地抽取那些对系综平均贡献最大的构型，而不是直接计算庞大数目的所有可能的构型

IV. 模拟示例

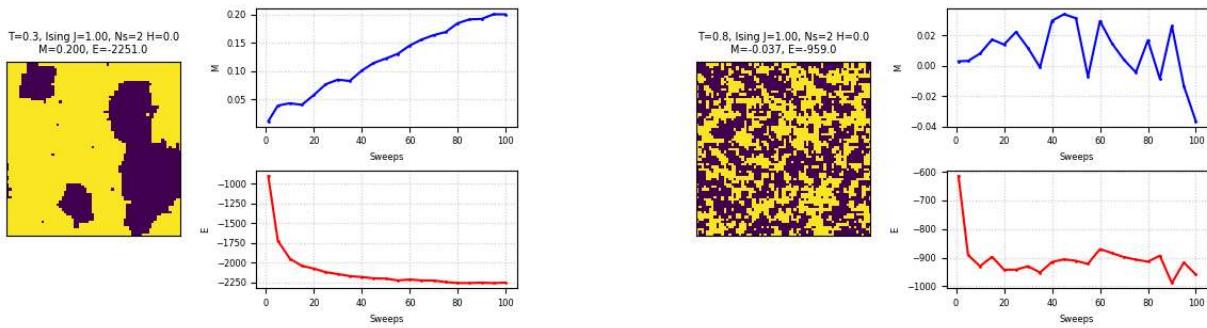
我们接下来展示系统在不同参量设置下的

- 演化热图（颜色代表自旋取值，按大小顺序进行映射）
- 箭头图（用于XY模型）
- $E(t), M(t)$ t为演化时间
- $E(T), M(T)$ T为演化温度

我们先展示标准的Ising模型($J = 1, N_s = 2, B = 0$)，选取 $T = 0.3$ 和 $T = 0.8$ 进行对比，以供后续参考

注：

- 没有说明的地方，我们都统一sweep数为100，即给予同一演化时间长度，再观察系统状态
- 在讨论外场 B 的影响之前，我们都假设 $B = 0$
- 我们使用的 N_s 与 s_i 之间的映射为当 $N_s = 2 \rightarrow s_i = \{-0.5, +0.5\}$, $N_s = 3 \rightarrow s_i = \{-1, 0, +1\}$ ，基于广义伊辛模型，此时标准 $Tc \approx 2.269/4 \approx 0.567$ 这个映射只改变了参考尺度，没有改变物理实质



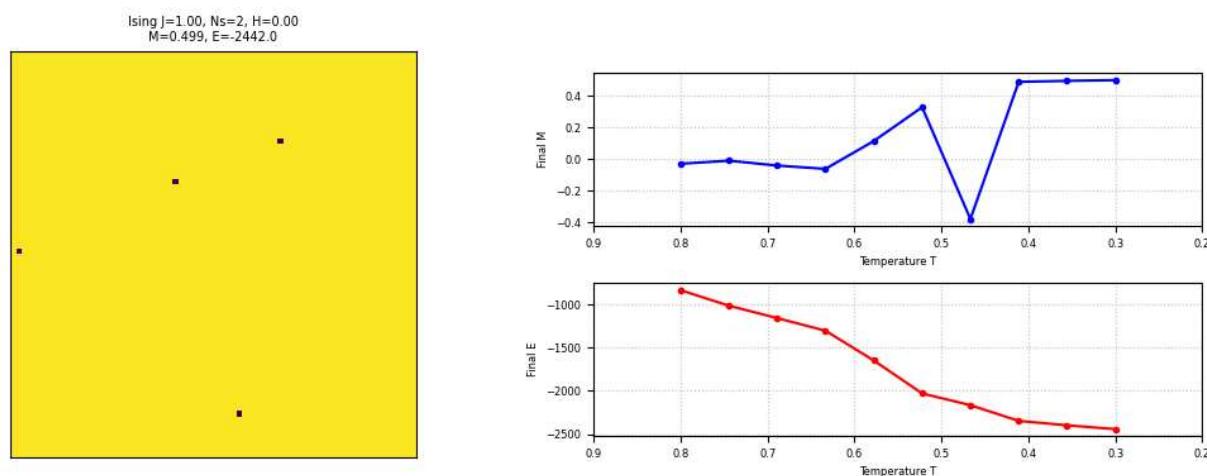
我们可以看到，在100个sweep下，左侧 $T = 0.3$ 的系统虽然还没有完全演化到 $M = 0.5$ ，但是由于 $T < T_c$ ，序参量 M 是在稳定增加的。尽管二者都在朝着 E 减小的方向发展，但右侧的 $T = 0.8$ 的 M 只在0附近振荡，无自发磁化。

我们可以来验证一下 T_c 是否确实约为0.567：

我们将实验点取在刚才的两个经验点 ($T = 0.3, T = 0.8$ 之间，数量为10)，为了让获得的每个 M 值确实为系统演化稳态时的值，我们这次把sweep加到1000，给予它足够的演化时间：

批量实验
温度区间 T: 0.3 ~ 0.8
温度点数量: 10
每温度点Sweeps数: 500

实验结果为：



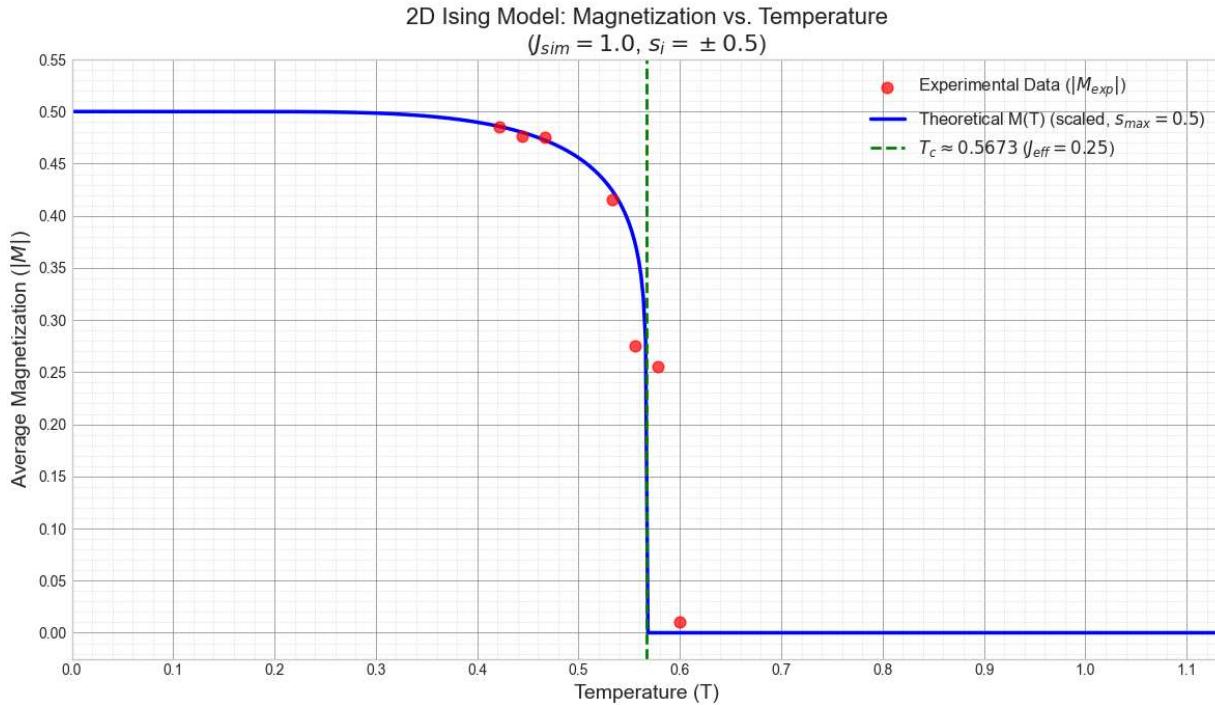
- 左侧为最后一个实验温度点的热图结果，格点几乎全为一种颜色，即形成宏观的单色畴，系统处于高度有序的铁磁态
- 我们还可以看到，在 T 靠近0.56时， $M(T)$ 的绝对值确实从在0附近震荡的情况，变成了出现大幅的变化(增加)，并且最后靠近 $|M|$ 最大值0.5（前期未达到，可以增加sweep数目和格点数目）
- 这符合格点自旋在 T_c 下自发有序的理论。

我们再缩小取点范围，保存并导出实验数据，尝试将模拟得到的 $M(T)$ 与理论的 $M(T)$ 曲线进行照应：

```

0.4222, 0.485102, -
0.4444, 0.475918, -
0.4667, 0.475102, -
0.5333, 0.415714, -
0.5556, 0.275510, -
0.5778, -0.255714,
0.6000, -0.010000,

```



在我们L=70的有限格点下和有限sweep下，实验结果是会有一些误差，但数据点也基本落在了理论曲线上！（其实悄悄去掉了亚稳态的结果）

4.1 关于J

a. J值大小

我们前面说过Onsager得到了临界温度 T_c (设 $k_B = 1$) (居里温度)为：

$$T_c = \frac{2J}{\ln(1 + \sqrt{2})}$$

也就是说当 $J = a * 1$ (对于经典Ising模型)时， T_c 会同比例升高a倍

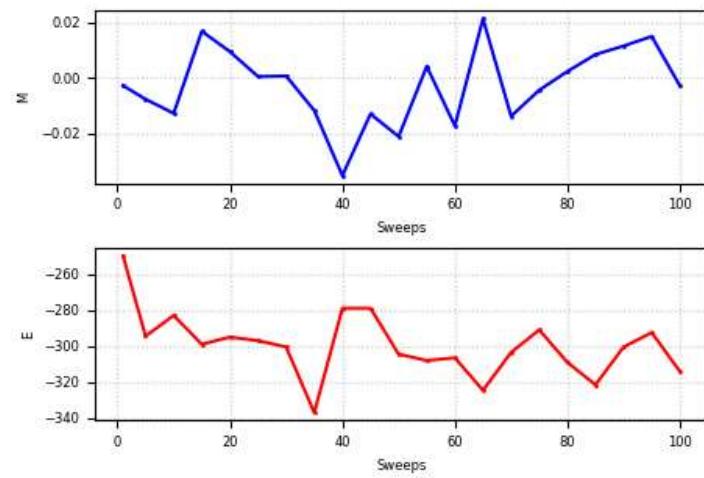
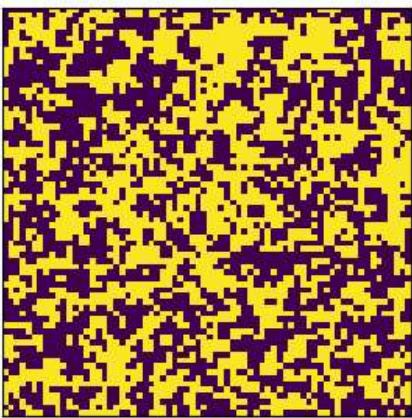
相应的

$$M(T) = \left[1 - \sinh^{-4} \left(\frac{2a}{T} \right) \right]^{1/8}$$

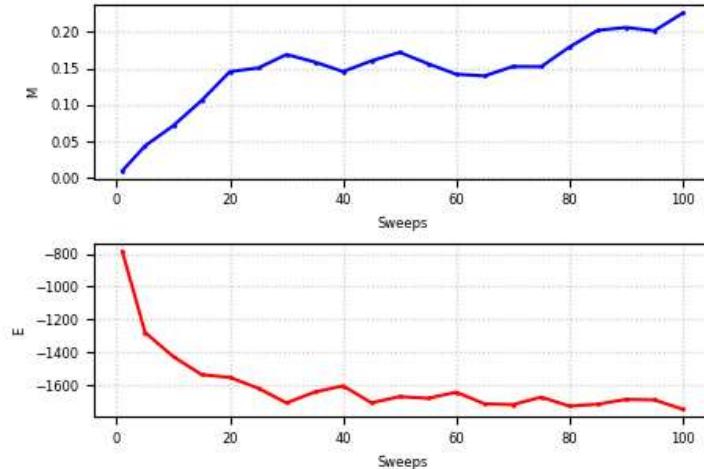
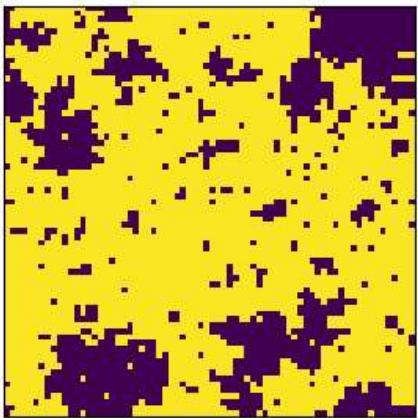
M 在 T_c 附近的收敛速度发生了变化，相当于将温度轴拉伸了a倍

例如，我们来对比 $J = \{0.5, 1, 2, 4\}$ 在 $T = 0.55$ 时的演化情况：

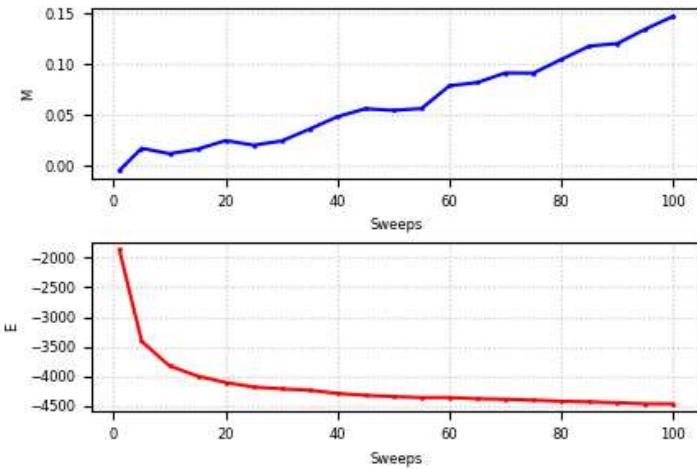
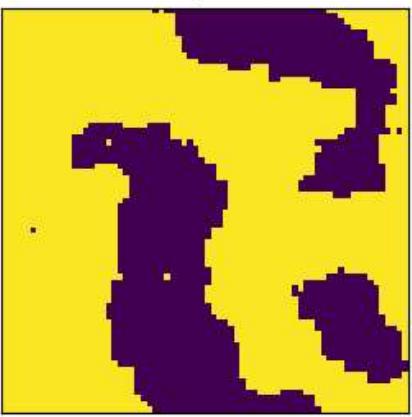
T=0.55, Ising J=0.50, Ns=2 H=0.0
M=-0.003, E=-314.0



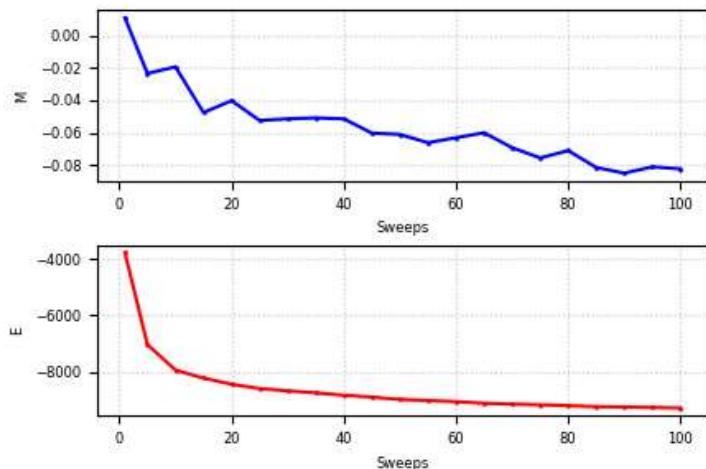
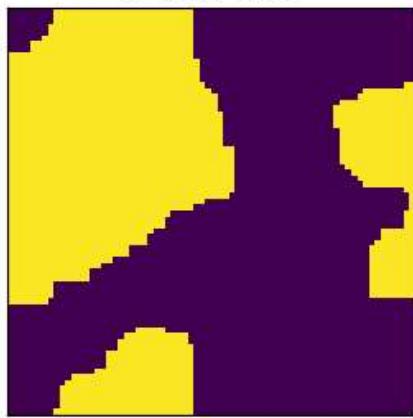
T=0.55, Ising J=1.00, Ns=2 H=0.0
M=0.226, E=-1748.0



T=0.55, Ising J=2.00, Ns=2 H=0.0
M=0.147, E=-4462.0



T=0.55, Ising J=4.00, Ns=2 H=0.0
M=-0.082, E=-9296.0



我们可以看到在略低于 $J = 1$ 的 $T_c(0.567)$ 的温度下, $J = 0.5$ 时系统并没有自发磁化的迹象, M 在 0 附近振荡, 而从 $J = 1$ 开始, J 越大, M 和 E 都出现了收敛的情况, 收敛速度有变慢, 但这说明 T_c 确实随着 J 的增大而增大了

我们来量化一下这个结果, 看看 T_c 是不是同 J 等比例增大了:

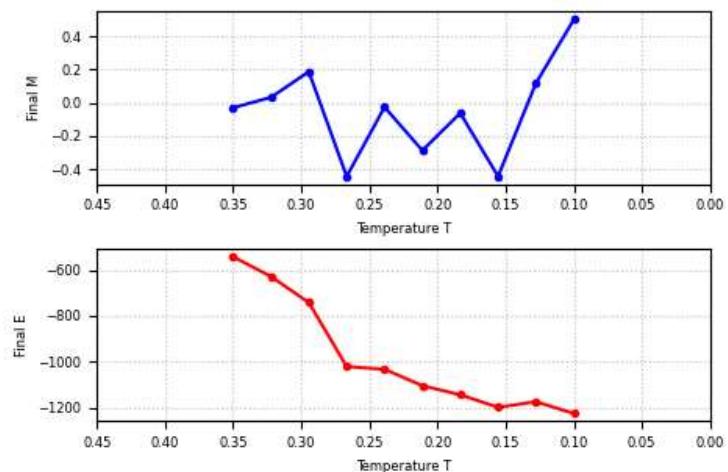
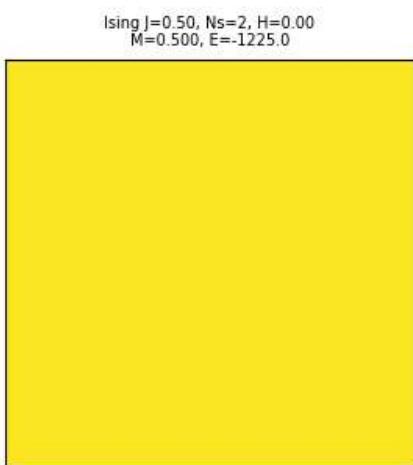
批量实验

温度区间 T: ~

温度点数量:

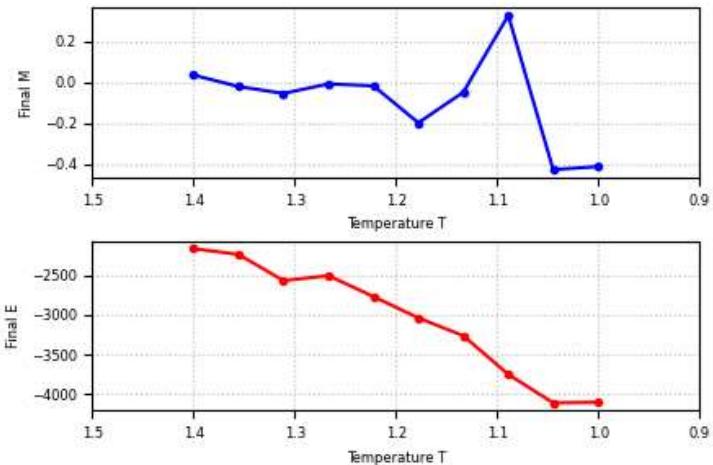
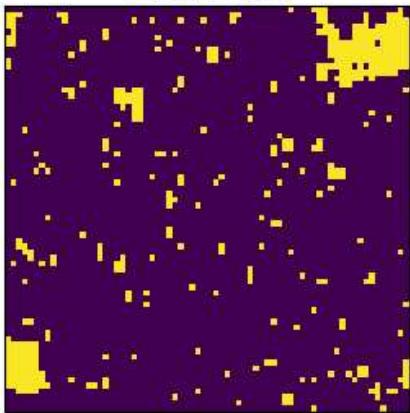
每温度点Sweeps数:

按照这个设置找到每一个 J 的 T_c 大概取值, 绘制 $M(T)$, $E(T)$ 曲线:

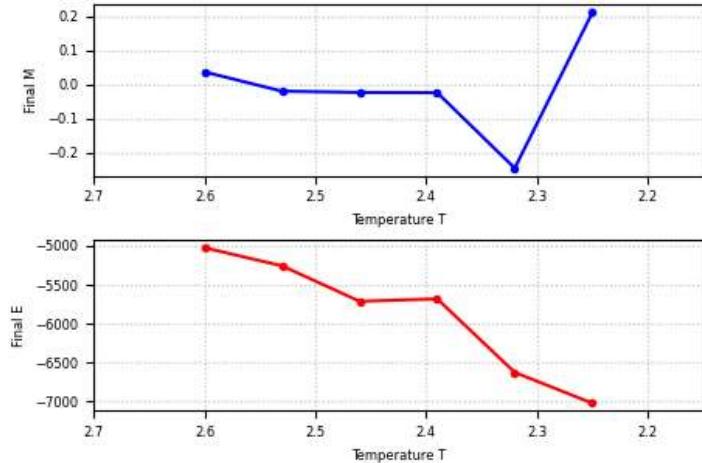
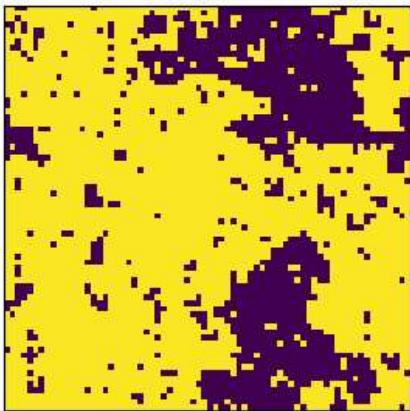


$J = 1$ 前面已经验证过了

Ising J=2.00, Ns=2, H=0.00
M=-0.411, E=-4104.0



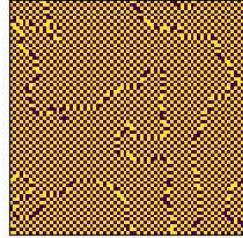
Ising J=4.00, Ns=2, H=0.00
M=0.211, E=-7020.0



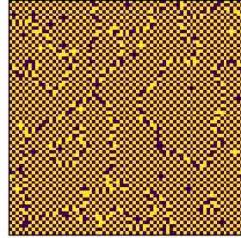
可以发现每个 J 取值下 $|M(T)|$ 发生剧烈变化且后期接近 0.5 的 T 值确实在按 J 的比例增加（理论： $T_c = \{0.284, 0.567, 1.134, 2.268\}$ ），且印证了“收敛速度发生了变化，相当于将温度轴拉伸了 a 倍”的理论

最后，前面设置的 J 都为正值，而我们知道 J 是指自旋之间的耦合强度——于是我们来看看当 J 设为超级负值时，系统的自旋超级反平行性质：

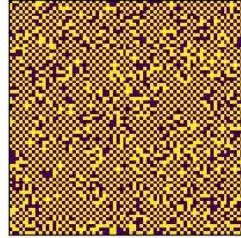
T=1.25, Ising J=-5.00, Ns=2 H=0.0
M=0.000, E=-10975.0



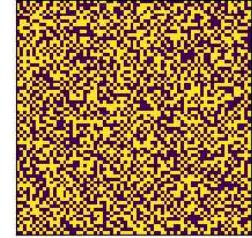
T=2.15, Ising J=-5.00, Ns=2 H=0.0
M=-0.003, E=-10130.0



T=3.0, Ising J=-5.00, Ns=2 H=0.0
M=-0.002, E=-7495.0



T=5.0, Ising J=-5.00, Ns=2 H=0.0
M=0.003, E=-3450.0



只需要简单的 30 个 sweep，就可以在各个温度下（包括了 T_c 以上），演化成像棋盘一样，接近稳态的情况。

b. 随机 J 值

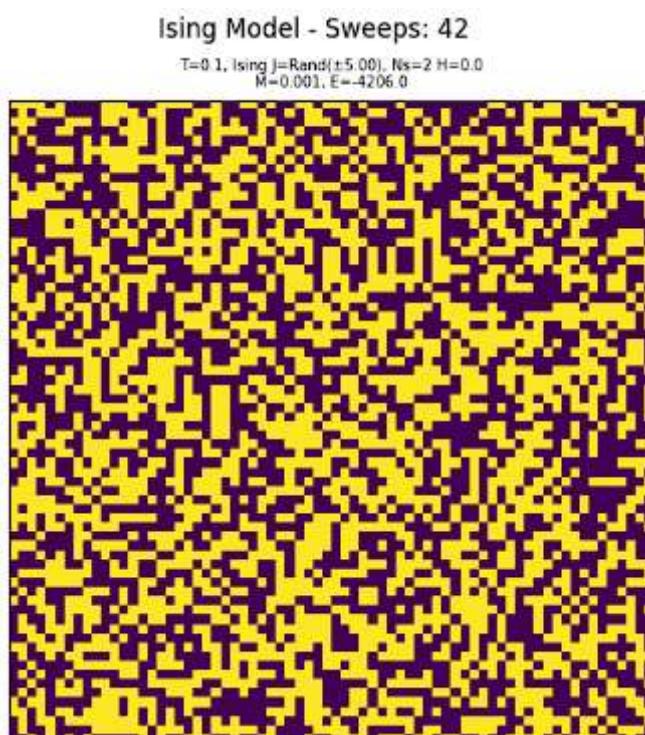
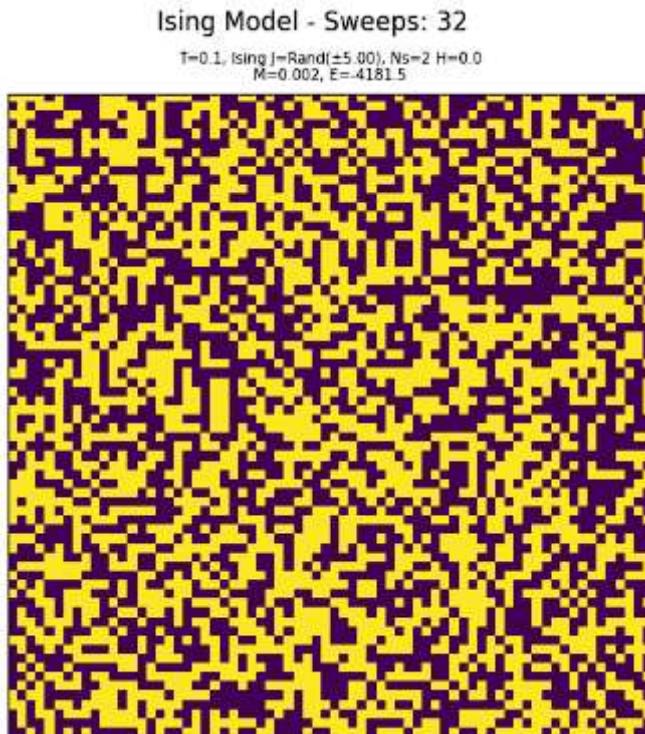
自旋玻璃随机 J (Edwards-Anderson 模型) 的 J 值不再是一个常数，而是对于每个格点周围的键值，在一定范围内以一定概率分布进行取值。常见的分布有土 J 分布和高斯分布。我们的程序里使用的是平均分布 $rand(-J_{max}, +J_{max})$ ， J_{max} 就取常规设定处的 J 值。

根据自旋玻璃的两个重要特征：

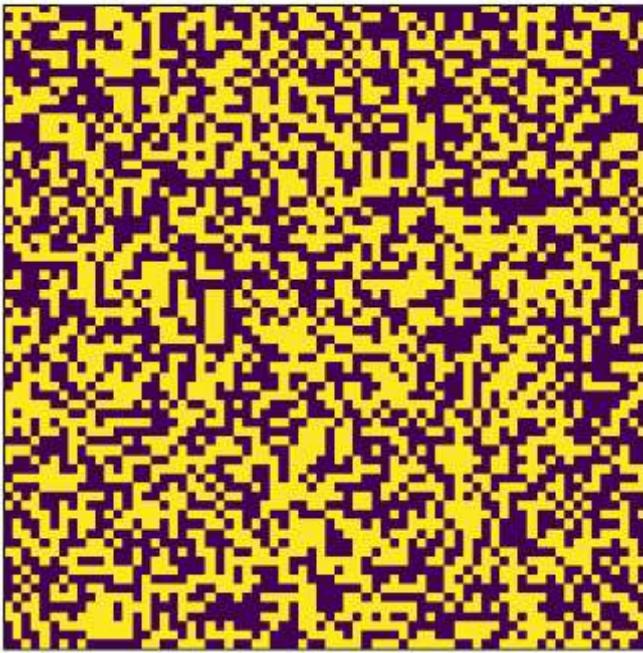
- **淬火无序**: J 虽随机，但固定，代表材料结构中固有的无序性质
- **竞争相互作用**: J 可正可负，导致阻挫，系统无法找到一个合适的自旋构型使所有相互作用能量同时降到最低

可以较直观地理解到，系统通常没有全局的铁磁或反铁磁有序（相变温度/冻结温度 T_g （通常认为 0 ?），序参量此时为 $q_{EA} = \langle \langle s_i \rangle_T^2 \rangle_J$ ），但此时由于**固有性质**和**竞争性质**，会导致系统局部的演化类似于**冻结状态**，也就是局部的亚稳态。

我们设定一个较小的温度（以靠近或者低于 T_g ，否则总是顺磁相，无明显畴结构），以及较大的 J 范围来让系统可能出现的耦合的性质更强烈，来观察系统出现许多能量相近但构型显著不同的局部极小值的情况：



Ising Model - Sweeps: 52
 T=0.1, Ising J=Rand(±5.00), Ns=2 H=0.0
 M=0.001, E=-4213.5



任意选一些局部进行观察，我们就会发现，该系统在不同sweep进度下，虽然整体无序，但确实出现了类似于冻结的情况！

4.2 关于 N_s

我们以 $s_k = -\frac{N_s-1}{2} + (k-1)$, $k \in \{1, 2, \dots, N_s\}$ 来定义当自旋取值数目为 N_s 时自旋的可选数值。当 $N_s \neq 2$ 且哈密顿量形式不变时（与下文Potts对比），这是一种高自旋伊辛模型，实际上与标准伊辛模型是同一种普适类，它们的临界指数都相同。

在平均场理论近似下，高自旋伊辛模型的临界温度满足

$$k_B T_c \approx \frac{zJ}{3} S_{max}(S_{max} + 1)$$

- 其中 z 为配位数，在二维情况下 $z = 4$
- 说明 N_s 越大， S_{max} （对应着最大有效磁矩）越大， T_c 越大。

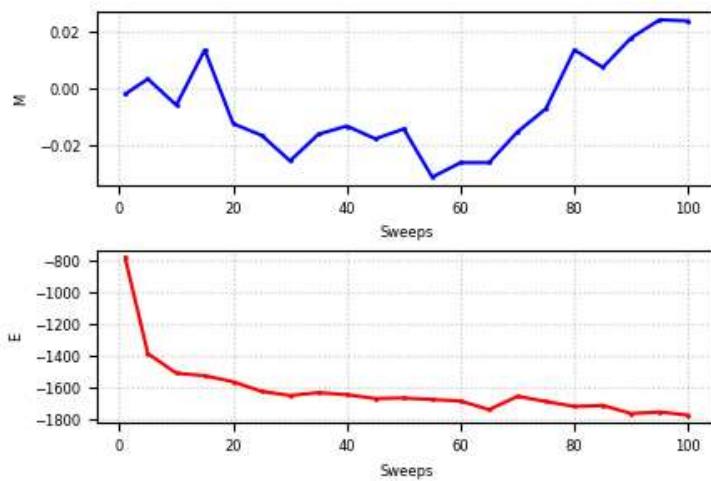
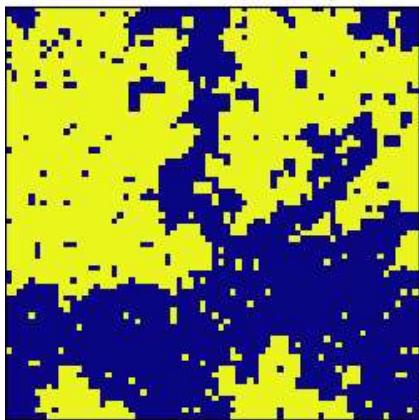
令 $k_B = 1$ ，由 $S_{max} = 0.5(N_s - 1)$ 的线性关系我们也可以量化出 T_c 与 N_s 的正向关系

$$T_c \propto J(N_s^2 - 1)$$

我们来大致验证一下：

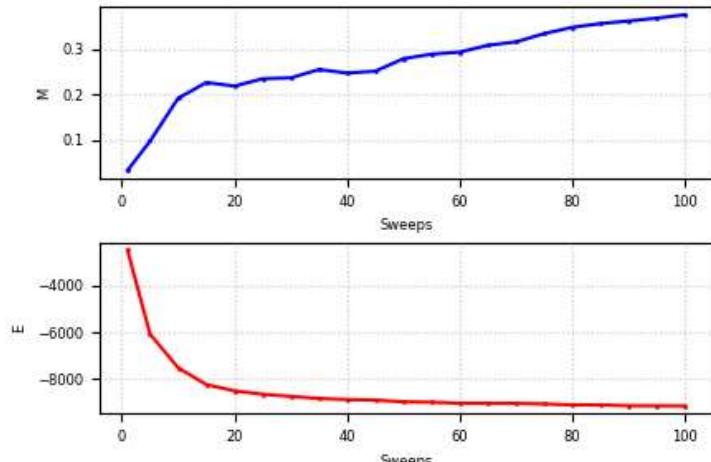
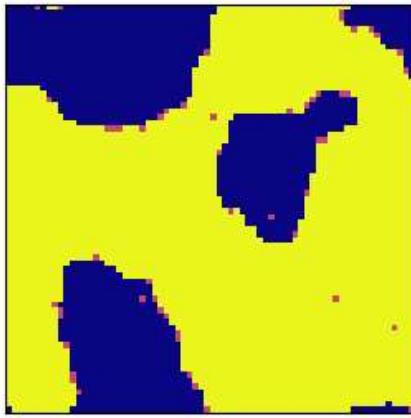
首先我们让 $N_s = \{2, 3, 4, 5\}$, $T = 0.55$ (并且换了一个色号)

T=0.55, Ising J=1.00, Ns=2 H=0.0
M=0.024, E=-1774.0



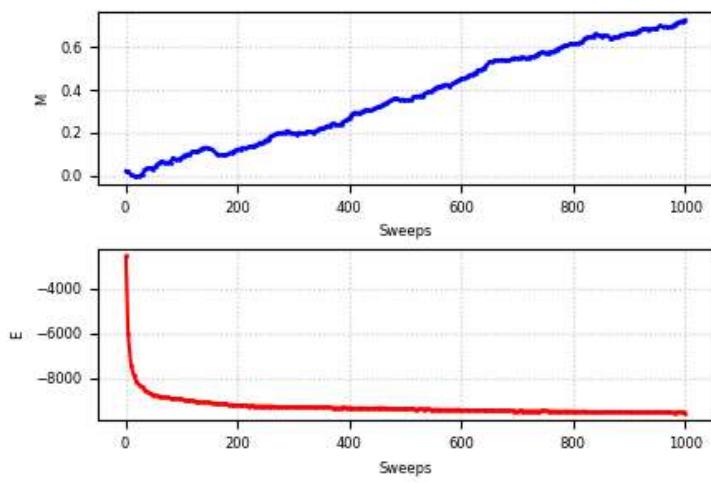
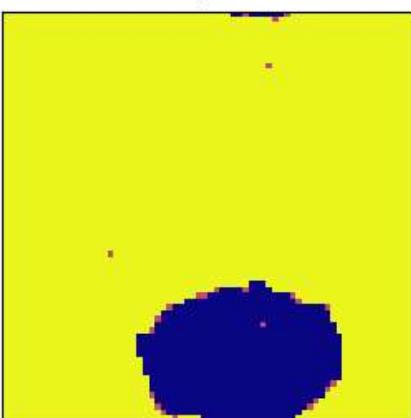
$N_s = 3$, sweep=100

T=0.55, Ising J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=0.376, E=-9144.0



给 $N_s = 3$ 充分的 sweep (1000个, 其实还不是很充分), 检查其 M_{Final} 与 S_{max} 成正比, 即是否变为1:

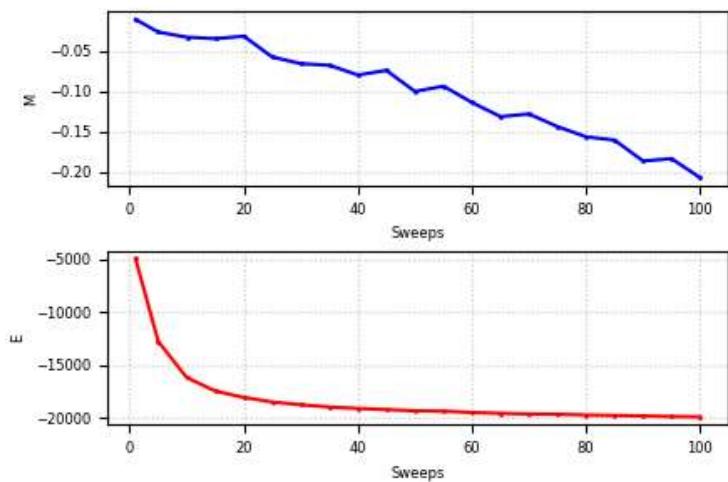
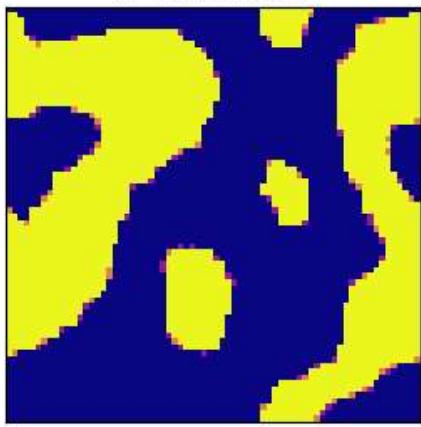
T=0.55, Ising J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=0.729, E=-9539.0



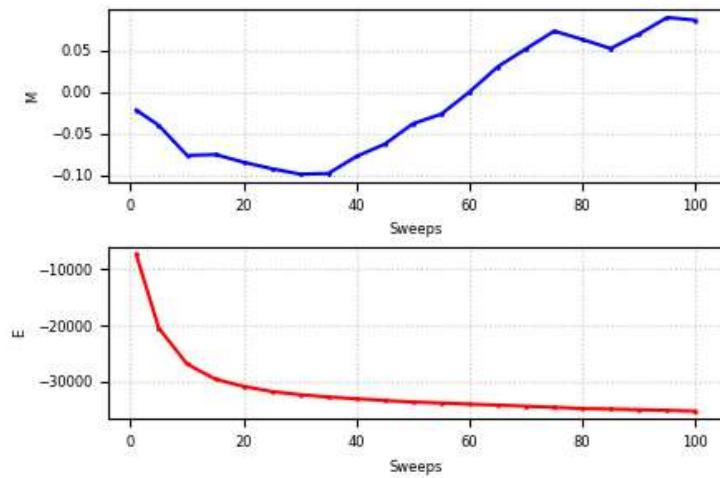
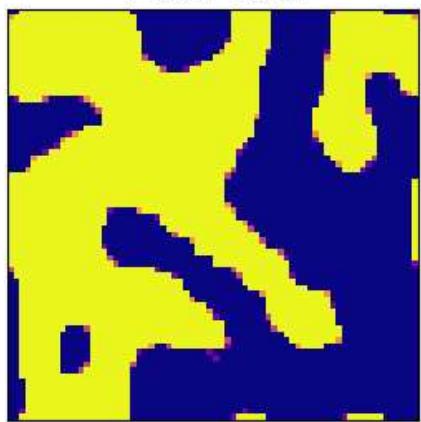
虽然 M 没到1, 但这和理论相符。因为其实我们不用一一验证 M_{Final} , 只要确定它有收敛趋势, 最后结果必然为每个自旋都取 S_{max} .

继续模拟 $N_s = 4$ 和 $N_s = 5$:

T=0.55, Ising J=1.00, Ns=4 H=0.0
M=-0.207, E=-19887.0



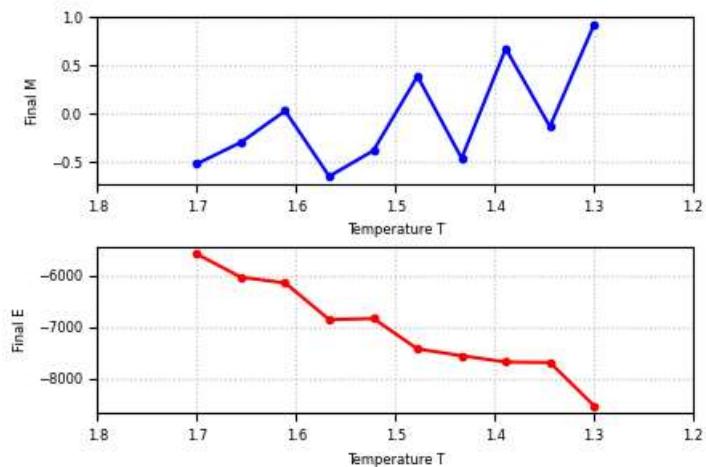
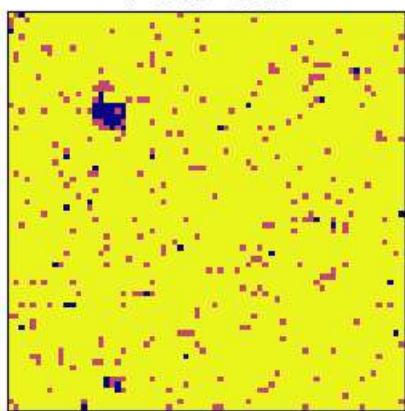
T=0.55, Ising J=1.00, Ns=5 H=0.0
M=0.086, E=-35242.0



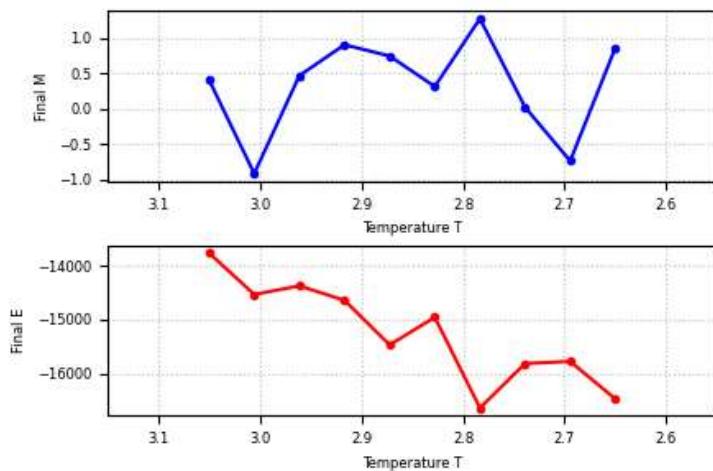
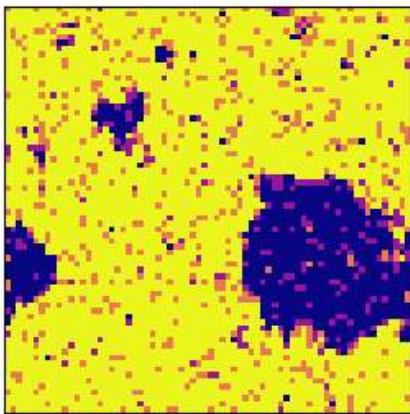
总之，同样的sweep下更多的自旋取值确实对应了更明显的有序！

现在进行批量实验证 $T_c \propto J(N_s^2 - 1)$:

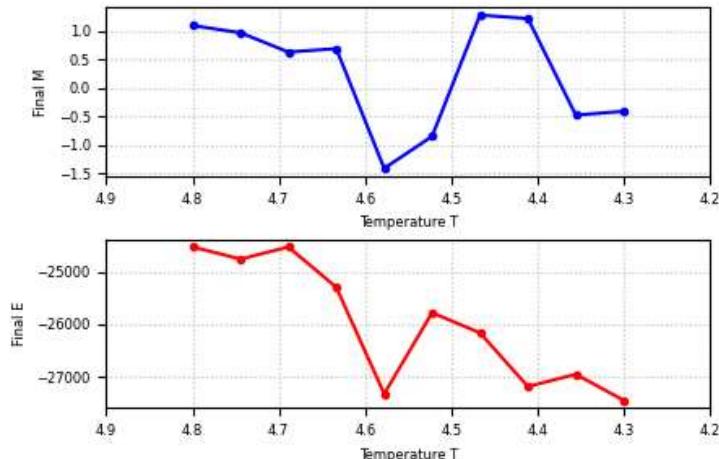
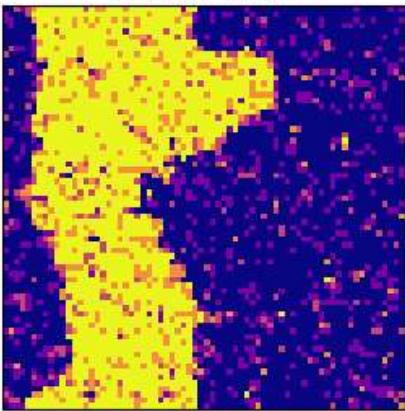
Ising J=1.00, Ns=3, H=0.00
M=0.921, E=-8537.0



Ising $J=1.00$, $N_s=4$, $H=0.00$
 $M=0.864$, $E=-16478.0$



Ising $J=1.00$, $N_s=5$, $H=0.00$
 $M=-0.409$, $E=-27448.0$



按照近似，以 $N_s = 2$ 作为参照，其 $T_c = 0.567$ ，则其余 N_s 的对应 T_c 应该为 $1.512, 2.835, 4.531$

我们可以看到按照理论 T_c 预设的 T 区间内 $M(T)$ 确实在进行收敛，它们的 $M(T)$ 的变化速率越来越慢。但可以发现在近似情况下我们预估的值应该都（远远地）偏小了。

4.3 Potts模型

Potts模型有两个特征：

- 自旋数目 N_s 也可以取 > 2 ，但一般称 N_s 为 q
- 相互作用更加极端（非黑即白），因为其系统 $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(s_i, s_j)$

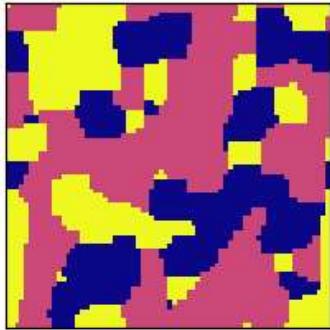
理论上，二维 q -state Potts 模型的临界温度：

$$T_c = \frac{J}{\ln(1 + \sqrt{q})}$$

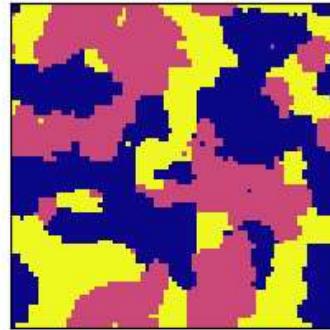
- 对于 $q \leq 4$ 是二阶相变，在 T_c 处序参量会连续变化，对于 $q > 4$ 是一阶相变，在 T_c 处序参量突变，系统存在潜热。
- 我们发现，同样是状态数增多，但现在 T_c 随着状态数 q 的增大而减小，这与前面的高自旋伊辛模型相反。

因此，我们设定一些较低的温度，来观察其相对有序的状态：

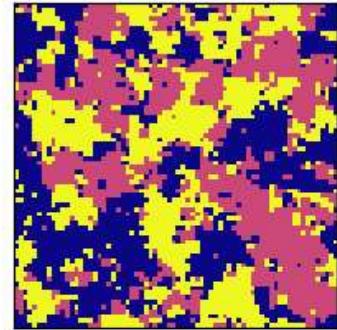
T=0.1, Potts J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=-0.024, E=-8910.0



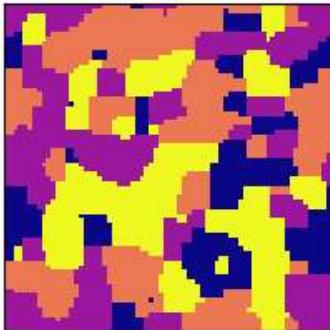
T=0.55, Potts J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=-0.109, E=-8781.0



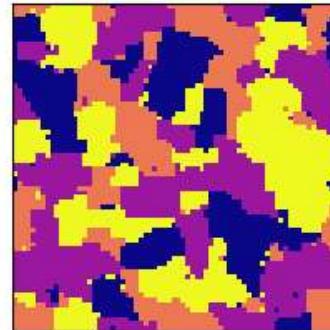
T=1.0, Potts J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=-0.041, E=-7166.0



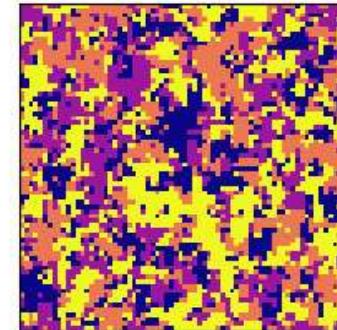
T=0.1, Potts J=1.00, Ns=4 H=0.0
M=0.138, E=-8649.0



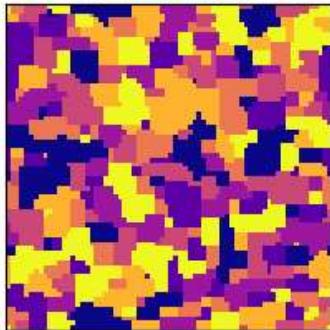
T=0.55, Potts J=1.00, Ns=4 H=0.0
M=0.040, E=-8420.0



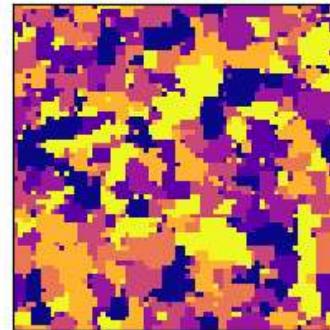
T=1.0, Potts J=1.00, Ns=4 H=0.0
M=0.133, E=-5517.0



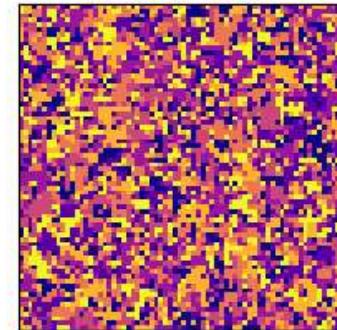
T=0.1, Potts J=1.00, Ns=7 H=0.0
M=0.129, E=-7696.0



T=0.55, Potts J=1.00, Ns=7 H=0.0
M=0.136, E=-6960.0



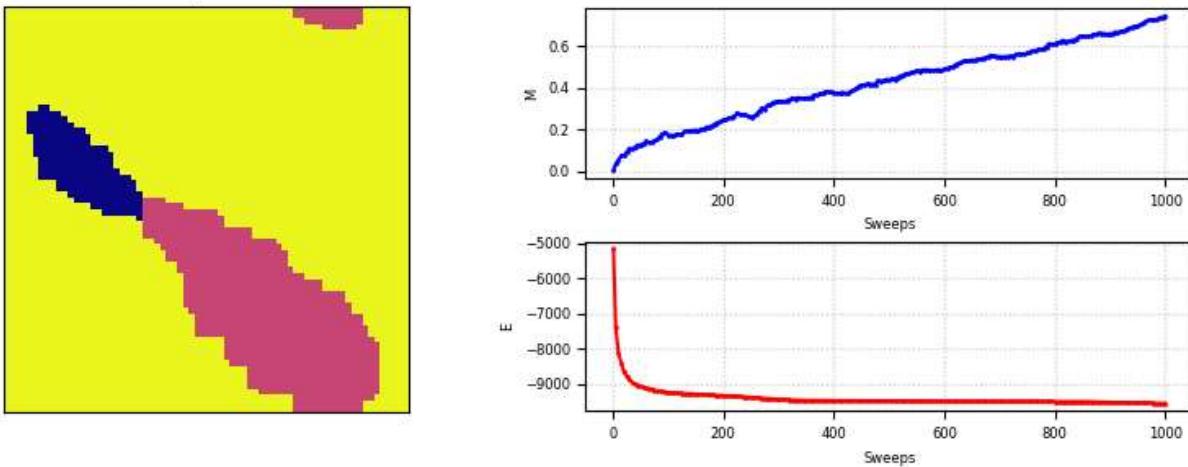
T=1.0, Potts J=1.00, Ns=7 H=0.0
M=-0.011, E=-3353.0



可以发现，Potts模型的鲜明特征是形成**大面积的、相对稳定的畴**。畴的边界是不同颜色区域的界面（且体现了一种**界面张力**）。随着温度降低，畴的面积会越大。这其实从Potts模型的自旋之间**非黑即白**的作用形式就可以直觉地看出来。

即使 $q=3$ （已经很小）， $T = 0.1$ （已经很小），1000个sweep（已经充分），系统也没有演化到完全有序的状态：

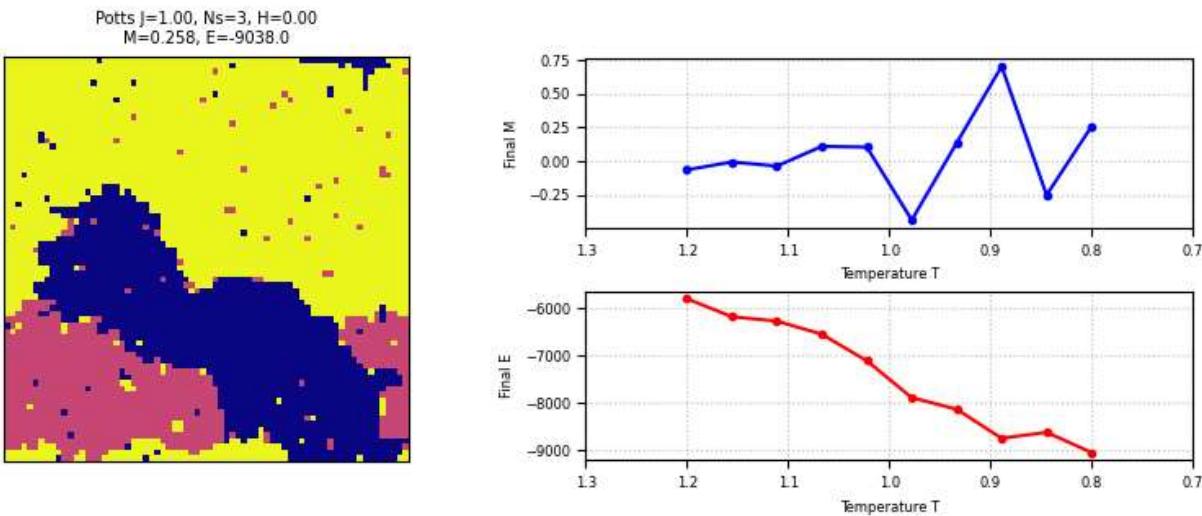
T=0.1, Potts J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=0.745, E=-9560.0



这或许也可以解释为什么 T_c 随着状态数 q 的增大而减小。 q 值越大，畴的数目会越多，但畴是局部稳定的，因此系统要达到完全有序的状态会需要更低的临界温度。

我们来设定较低的 q 和尽量低的温度，以及充足的 sweep 来寻找其 T_c ：

理论上 $q = 3$ 时， $T_c = 0.995$



可以看到这次的模拟 T_c 与理论就十分符合。

4.4 XY模型

XY模型的系统哈密顿量为：

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)$$

其磁化强度为

$$M(T) = \left| \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \vec{s}_i \right\rangle \right|$$

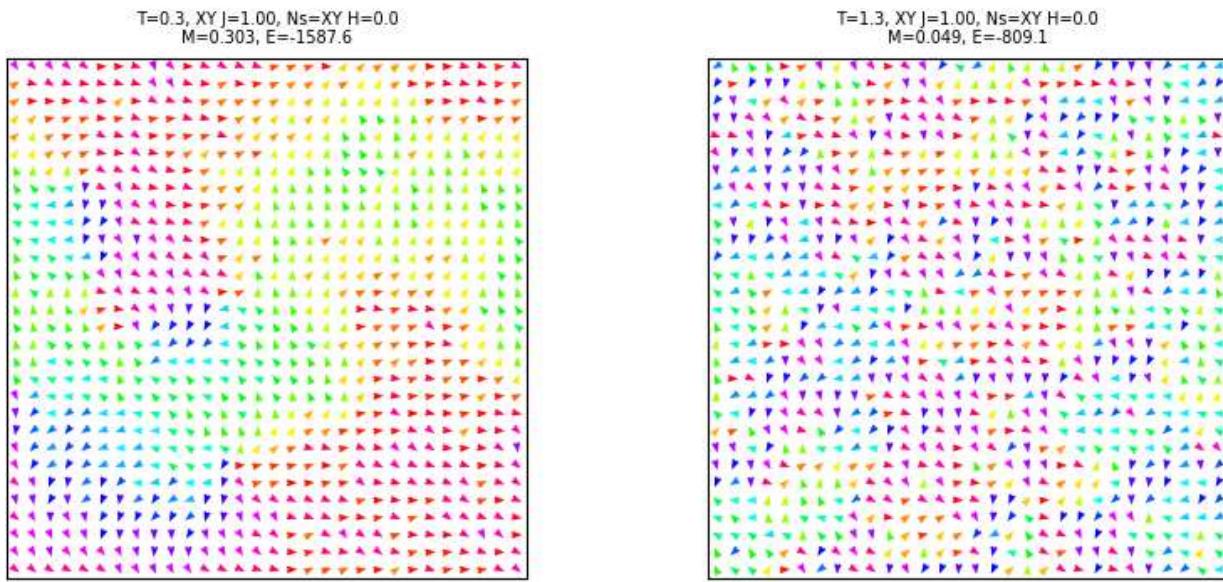
由 Mermin-Wagner 定理，在任何有限温度 $T > 0$ 下，该系统的 M 均为 0。因此，XY 模型的有序性不是通过平均磁化强度来表征的，而是通过自旋-自旋关联函数的衰减行为和拓扑性质（如涡旋密度）来刻画。

虽然没有经典意义上的长程有序，但是其在低温下展现出一种独特的拓扑有序状态，拥有（耳熟能详的）Kosterlitz-Thouless (KT) 相变。理论上，KT相变温度为：

$$T_{KT} \approx \frac{0.89J}{k_B}$$

- 当 $T < T_{KT}$, 涡旋和反涡旋以紧密束缚**偶极子对**形式存在。这些束缚对的存在不破坏系统的准长程有序
- 当 $T > T_{KT}$, 涡旋-反涡旋对解离成自由的、独立的涡旋和反涡旋。这一效应会破坏自旋方向的远距离关联，导致系统进入无序态。

我们来通过模拟大致观察一下这个现象：



在低温下确实可以看到涡旋与反涡旋，且它们几乎是连在一起的，且涡旋更成片更大（从相互作用的形式可以直观理解）。而较高温下（反）涡旋独立，且很小。

4.5 外场B

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j - B \sum_i s_i$$

外磁场 B 作为一个共轭于序参量（磁化强度 M ）的场，根据相变理论的一般原理，当其不等于0时，会抹平尖锐的相变点。因此，此时没有一个明确的 T_c 使系统在该温度下出现**自发磁化**。

从 H 的形式我们可以看出增加的外场作用项会导致更多与 B 同向的自旋构型该项能量更低。

因此，理论上：

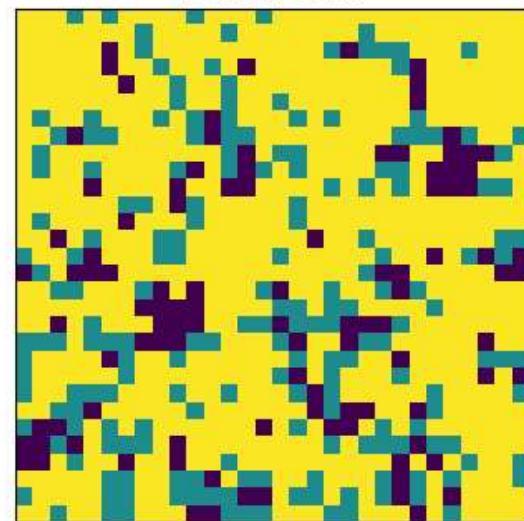
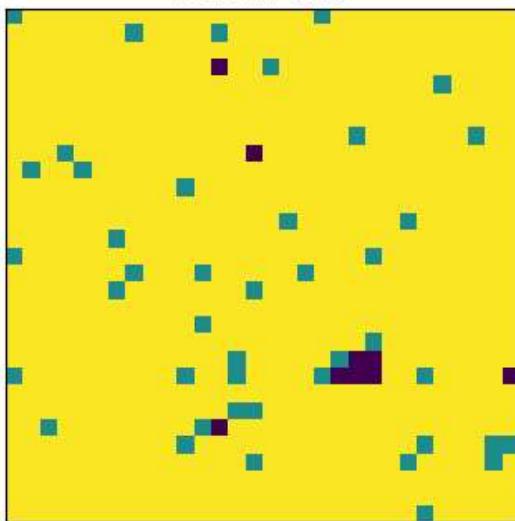
- 高温极限： $M \approx B/T$
- 低温极限： $M \approx \text{sgn}(B)$ 即自旋都沿外磁场方向排列
- 当温度从高温向低温变化时，磁化强度是平滑地、连续地从高温极限到低温极限变化的

我们来简单验证一下：

Ising模型：

T=1.3, Ising J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=0.932, E=-2011.5

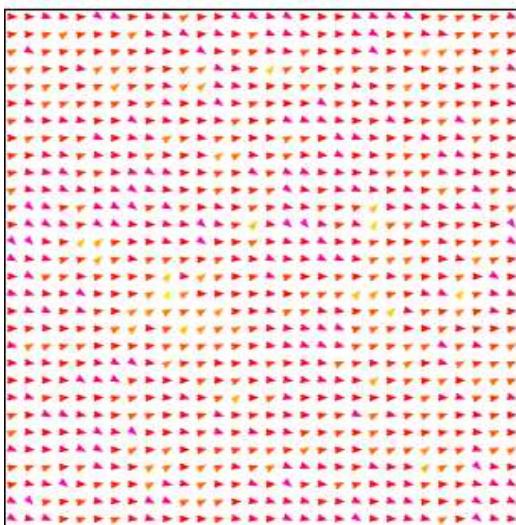
T=2.25, Ising J=1.00, Ns=3 H=0.0
M=0.554, E=-1041.5



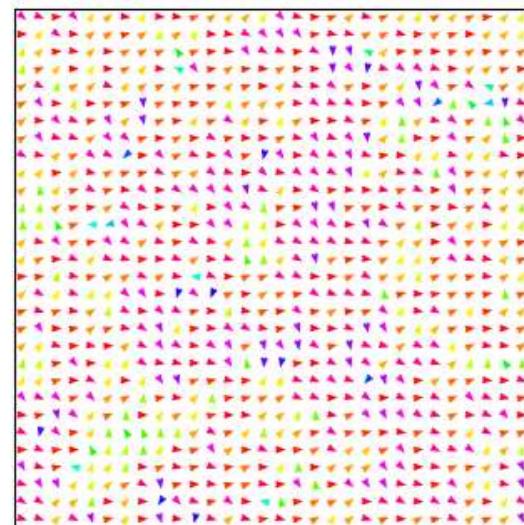
仅10个sweep，系统就已经趋向同一个自旋了

XY模型的方向箭头可能更直观（温度和前面模拟的XY模型相同）：

T=0.3, XY J=1.00, Ns=XY H=0.0
M=0.953, E=-2114.4

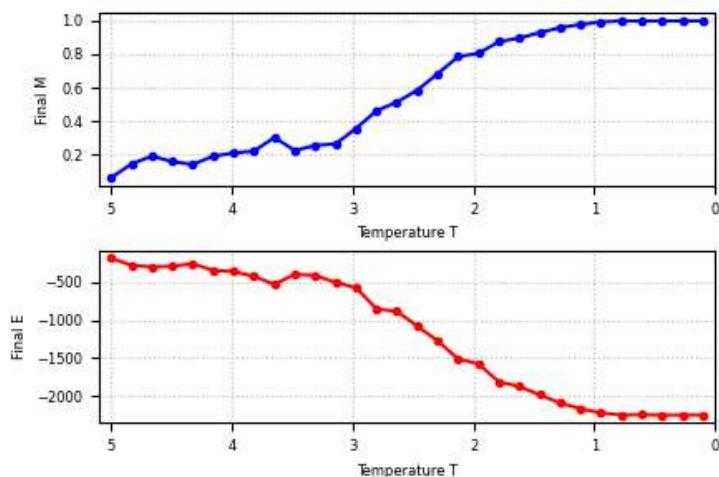
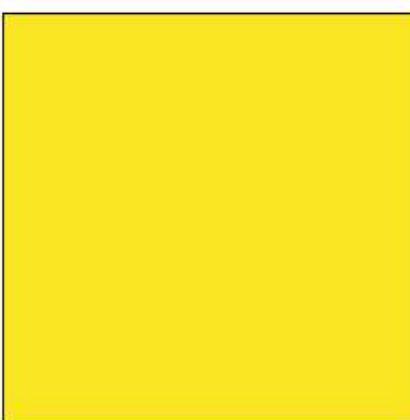


T=1.3, XY J=1.00, Ns=XY H=0.0
M=0.736, E=-1545.9



- 注意，代码中外磁场为 H ，在这里为 B ，为了和哈密顿量区分

Ising J=1.00, Ns=3, H=0.50
M=1.000, E=-2250.0



$M(T)$ 曲线确实有平滑地、连续地从高温极限到低温极限变化，最终值为与 B 同向可取的 S_{max}

V. 总结

我们制作了一个可交互的程序，使用Metropolis算法模拟了伊辛模型，对其参数对系统的影响进行了一些探索，并大致地与理论进行了照应。

这个项目名称叫Hello Ising，完整代码在[我认为可以改进的地方有：](https://github.com/White-Lulu>Hello-Ising，里面还有关于这个程序的简单的使用说明</p></div><div data-bbox=)

- (小论文里的) 理论说明再充分一些
- 有些地方模拟与理论的照应可能有些粗糙
- 程序设定里，可以增加更多和理论相照应的功能，这样更符合学术用途
- 优化算法，减少亚稳态情况的出现
- 这个项目可以涉及更多量化系统有序特征的参数，例如关联函数，特征长度，临界指数等等
- 其实伊辛模型更像一个数学模型，它可以适用于很多有近邻相互作用的系统，比如社会学模拟，比如神经网络，伊辛模型和元胞自动机很像，而后者就是常用的复杂系统模拟模型。因此我们还可以拓展这方面的可视化（但今天来不及了）
- 其实作者还想到可以探索一下IsingModel→元胞自动机→标度不变性（→分形）→共形不变性→共形场论→全息→黑洞...?!的直觉链，似乎其实有很多相关研究的（但今天来不及了）

感谢你的观看！

参考文献

- [1]Onsager, L. (1944). *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*. *Physical Review*, **65**(3-4), 117–149.
- [2]C. N. Yang, *The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model*, *Physical Review*, **85**(5), 808–816 (1952).
- [3]N. Metropolis et al., *Equation of state calculations by fast computing machines*, *J. Chem. Phys.*, **21**(6), 1087–1092 (1953).
- [4]Edwards, S. F., & Anderson, P. W. (1975). *Theory of spin glasses*. *Journal of Physics F: Metal Physics*, **5**(5), 965–974.
- [5]Wu, F. Y. (1982). *The Potts model*. *Reviews of Modern Physics*, **54**(1), 235–268.
- [6]Kosterlitz, J. M., & Thouless, D. J. (1973). *Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems*. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **6**(7), 1181–1203.
- [7]McCoy, B. M., & Wu, T. T. (1973). *The Two-Dimensional Ising Model*. *Harvard University Press*.