Peking University

统计力学及应用大作业

College of Engineering 2001111690 袁磊祺

June 20, 2021

代码可在 https://github.com/circlelq/Statistical-Mechanics-and-Its-Application 查看.

伊辛模型简介

伊辛模型（英语: Ising model）, 是一个以物理学家恩斯特·伊辛为名的数学模型, 用于描述物质的铁磁性. 该模型中包含了可以用来描述单个原子磁矩的参数 σ_i , 其值只能为 $+1$ 或 -1, 分别代表自旋向上或向下, 这些磁矩通常会按照某种规则排列, 形成晶格, 并且在模型中会引入特定交互作用的参数, 使得相邻的自旋互相影响. 虽然该模型相对于物理现实是一个相当简化的模型, 但它却和铁磁性物质一样会产生相变. 事实上, 一个二维的方晶格伊辛模型是已知最简单而会产生相变的物理系统.

定义

令 Λ 为所有晶格点的集合, 其中每个晶格点都有一个所有和它相邻的晶格点的集合 (在数学上称之为图) 并使这些晶格点形成一个 d 维的晶格. 对于每个晶格点 $k \in \Lambda$ 都有一个离散变数 σ_k, 其中 $\sigma_k \in \{+1, -1\}$, 代表一个晶格点的自旋. 而所有变数的集合 $\sigma = (\sigma_k)k \in \Lambda$ 则称作自旋组态.

对于两个相邻的晶格点 $i, j \in \Lambda$, 我们可以引入一个交互作用参数 Jij, 此外, 我们可以假设每个自旋 $j \in \Lambda$ 都和外加的磁场 h_j 作用. 则整个系统的哈密顿量可写成:

$$H(\sigma) = -\sum_{<i\ j>} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu\sum_j h_j\sigma_j \tag{2.1}$$

其中 $<i\ j>$ 代表晶格点 i 和晶格点 j 是相邻的的晶格点. 因此哈密顿量的

第一项为对每一对相邻晶格点的总和 (每一对只算一次), 代表所有自旋之间交互作用的能量, 而第二项则是磁场和自旋交互作用的能量. μ 是晶格点磁矩的值, 值得注意的是, 电子的磁矩和他的自旋方向相反, 所以哈密顿量的第二项应该要是正号比较合理, 但在习惯上, 还是会令第二项为负号. 这里不考虑外界磁场的作用.

Metropolis 方法

用 Metropolis 方法求能量分布

$$\rho = \mathrm{e}^{-E/T}, \tag{3.1}$$

其中

$$E = \sum_i J\sigma_i\sigma_{i+1}, \quad J = \pm 1. \tag{3.2}$$

粒子指向向上时 $\sigma_i = 1$, 向下时, $\sigma_i = -1$.

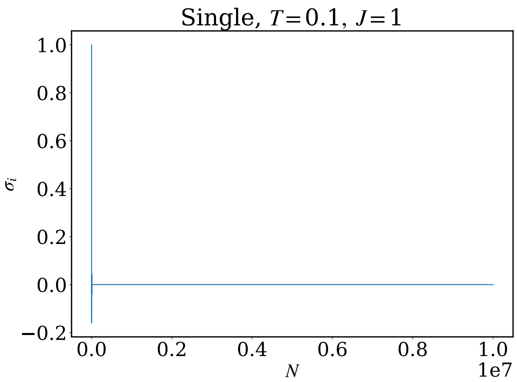
1. 相点初始位置为 50 个点, 全部向上, 取周期边界条件计算其能量.
2. 若指向状态为 x_1, 有两种方式改变状态:
   - 随机选择一个点, 改变其指向,
   - 或者随机选取一段区域, 改变其指向.
3. 根据式 (3.1) 来计算其概率密度.
   (a) 若 $\rho_2 > \rho_1$, 则相点移动到 x_2.
   (b) 若 $\rho_2 < \rho_1$, 则产生一个 $[0,1]$ 中的随机数 ξ, 若 $\xi < \mathrm{e}^{-(E_2-E_1)/T}$ 则相点移动到 x_2. 否则不移动.
4. 重复 2,3, 直到给定的停止条件.

模拟结果

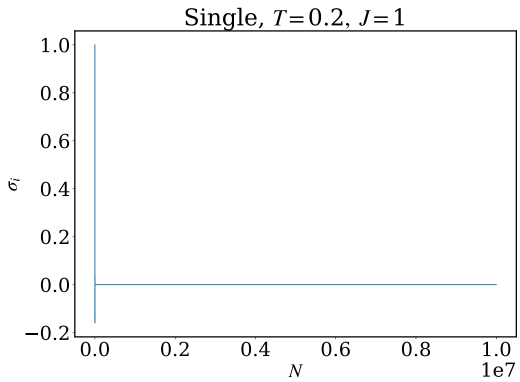
分别考虑 $J = 1, -1$ 两种情况.

当 $J = 1$ 时为竞争关系, 如图 4.1 和 4.2 所示, 分别为每次变动一个点和每次变动一个区域内的点的结果. 取 $N = 1 \times 10^7$ 次模拟. 可以发现两种方法获得的 σ_i 变化基本相同.

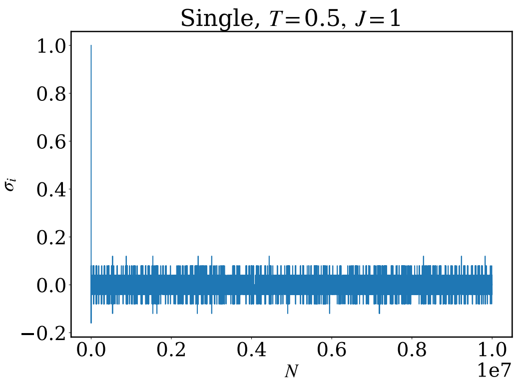
当温度 T 较小时,σ_i 基本保持为 0, 当温度 T 增大时,σ_i 的震荡开始增加.



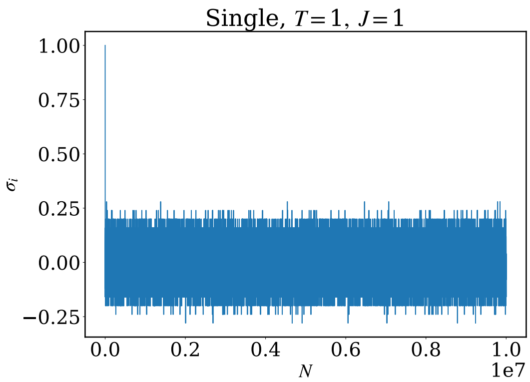
(a) $T = 0.1$



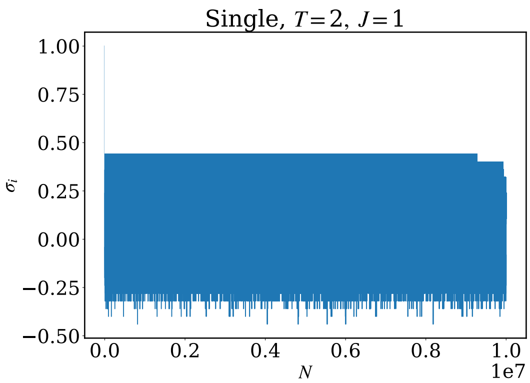
(b) $T = 0.2$



(c) $T = 0.5$

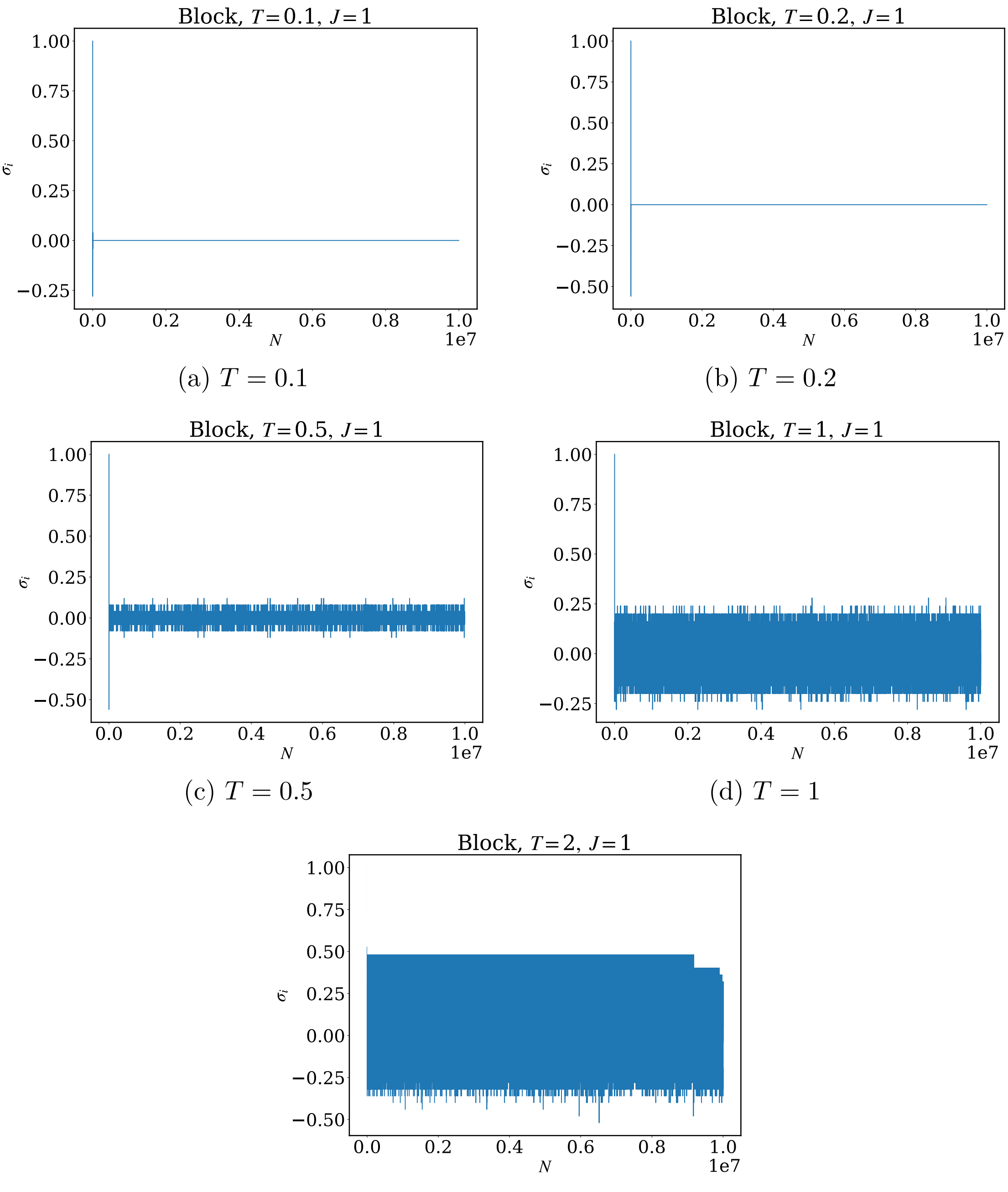


(d) $T = 1$



(e) $T = 2$

图 4.1. 每次变动一个点. $J = 1$.



(a) $T = 0.1$

(b) $T = 0.2$

(c) $T = 0.5$

(d) $T = 1$

(e) $T = 2$

图 4.2. 每次变动一个区域内的点. $J = 1$.

当 $J=-1$ 时为合作关系, 如图 4.3 和 4.4 所示, 当每次变动一个点时,$T=0.1, 0.2$ 时 σ_i 都保持为 1 不变, 而当 $T\leq 0.5$ 时,σ_i 开始在 $[-1,1]$ 之间震荡. 而当 $T=2$ 时, 震荡的范围缩小了.

对于区域反转,T 较小时, 在 $[-1,1]$ 之间震荡, 并且都达到了 $1,-1$, 而当 $T=1,2$ 时, 震荡的范围缩小了.

2D Ising 模型

对于二维 Ising 模型,

$$E=-J\sum_i \sigma_i\sigma_{i'}. \tag{5.1}$$

其中 i' 表示临近的点.

Wolff 算法

Wolff 算法的过程如下

1. 随机选择一个格点.
2. 依次看所取格点的周边, 如果是同向的相邻点, 则以

$$P_{\mathrm{add}}=1-\mathrm{e}^{-2\beta J}, \tag{5.2}$$

的概率加入集团. 其中 $\beta=\frac{1}{T}$, $J=1$.

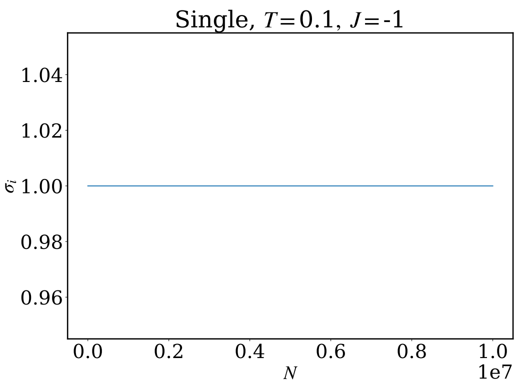
3. 对新加入的格点重复步骤 2, 知道形成一个最大的集团.
4. 直接反转集团中所有格点的方向.

通过理论分析可知这样的过程将满足

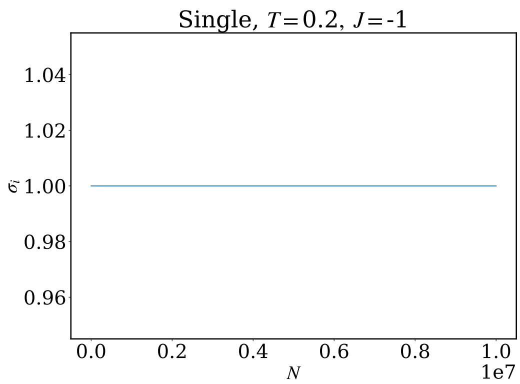
$$\frac{T(\mu\to\nu)A(\mu\to\nu)}{T(\nu\to\mu)A(\nu\to\mu)}=\mathrm{e}^{-\beta\left(E_\nu-E_\mu\right)}. \tag{5.3}$$

其中 μ,ν 分别为初态和末态. 网格是 20×20, 周期边界条件. 当 $T(0\to 5J)$ 时, 画出 $<\sigma>$ 和 T 的关系.

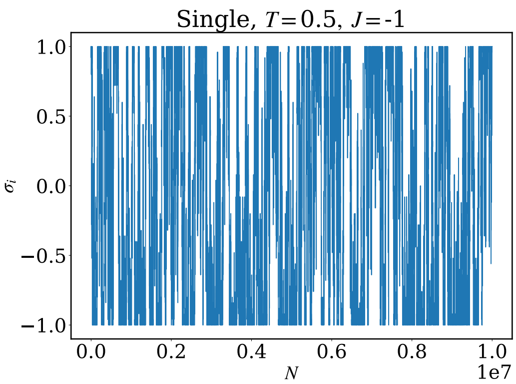
如图 5.1 所示为二维格点 $<\sigma_i>$ 随迭代次数的变化关系, $J=1$, 迭代 1×10^6 次. 当 T 较小时, $<\sigma_i>$ 在 $[-1,1]$ 之间震荡, T 增大后, 震荡范围减小. 如图 5.2 所示, 为当 $T(0\to 5J)$ 时, $<\sigma>$ 和 T 的关系. 其中 $<\sigma>$ 取了绝对值, 可以发现 $<\sigma>$ 随 T 的增加而增大.



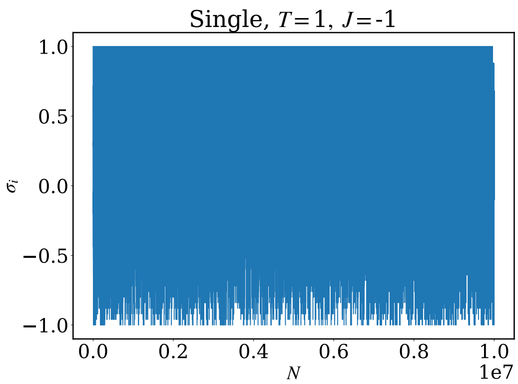
(a) $T = 0.1$



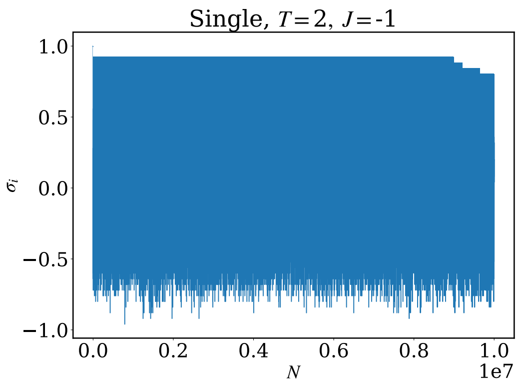
(b) $T = 0.2$



(c) $T = 0.5$

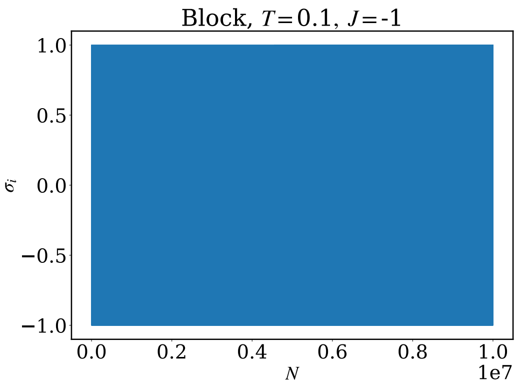


(d) $T = 1$

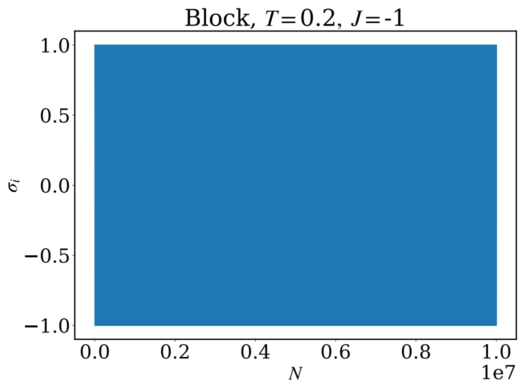


(e) $T = 2$

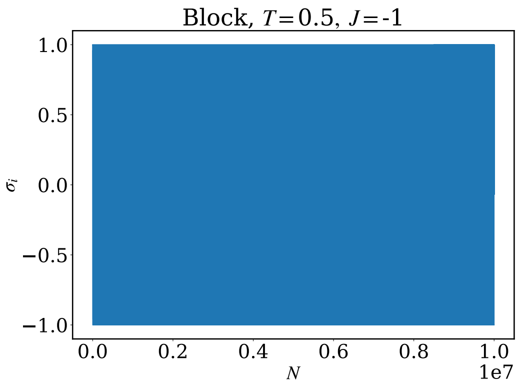
图 4.3. 每次变动一个点. $J = -1$.



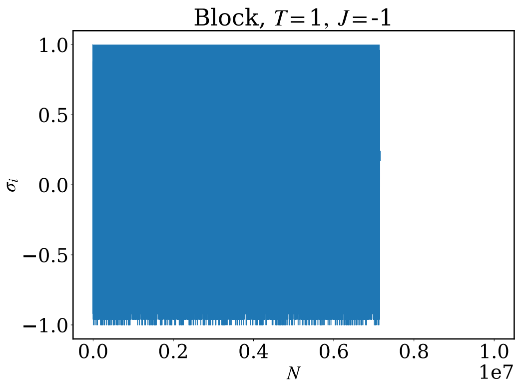
(a) $T = 0.1$



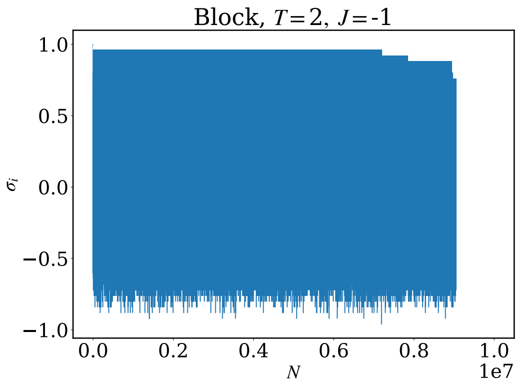
(b) $T = 0.2$



(c) $T = 0.5$

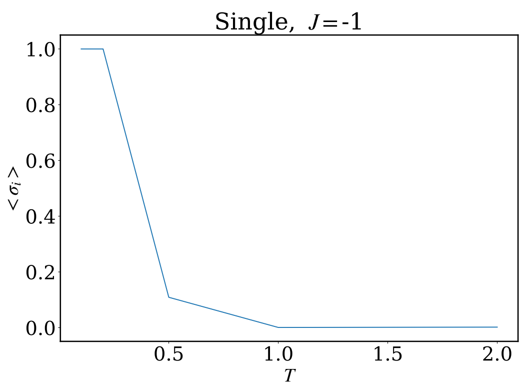


(d) $T = 1$

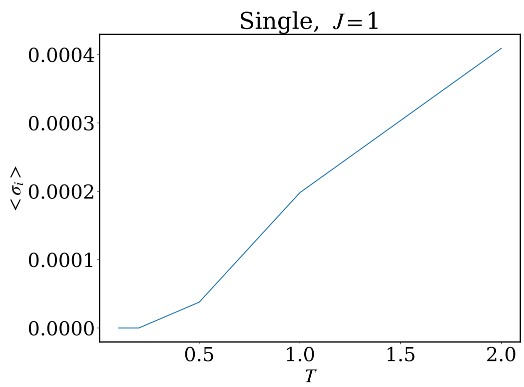


(e) $T = 2$

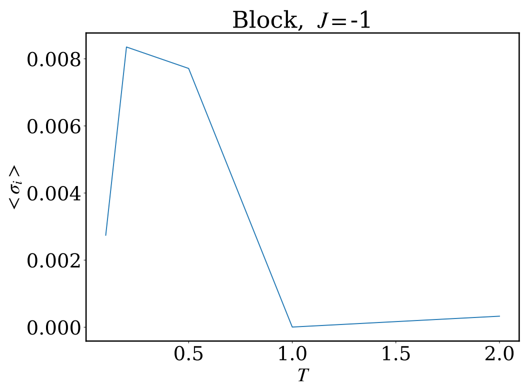
图 4.4. 每次变动一个区域内的点. $J = -1$.



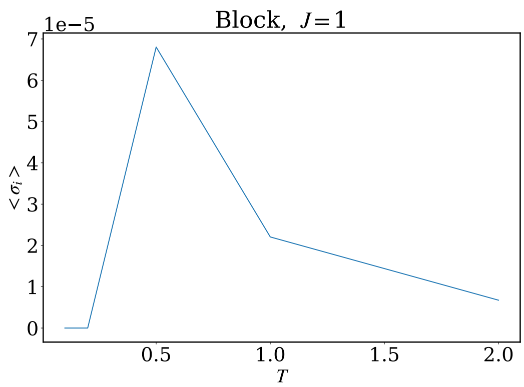
(a) Single, $J = -1$



(b) Single, $J = 1$

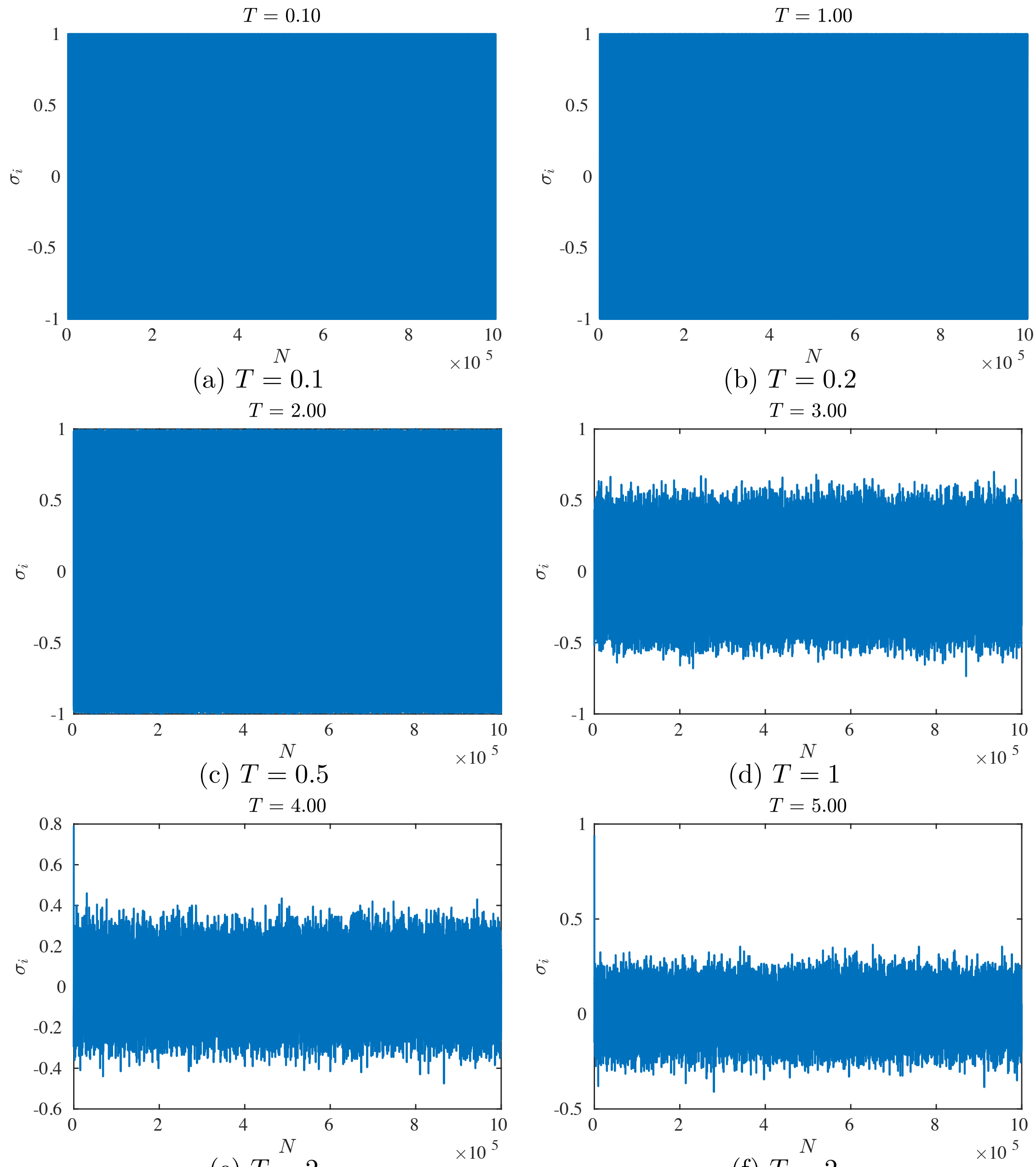


(c) Block, $J = -1$



(d) Block, $J = 1$

图 4.5. $J = -1$, 1 时 $< \sigma_i >$ 随 T 的变化关系.



(a) $T = 0.1$ (b) $T = 0.2$ (c) $T = 0.5$ (d) $T = 1$ (e) $T = 2$ (f) $T = 2$

图 5.1. 二维格点 $<\sigma_i>$ 随迭代次数的变化关系, $J = 1$.

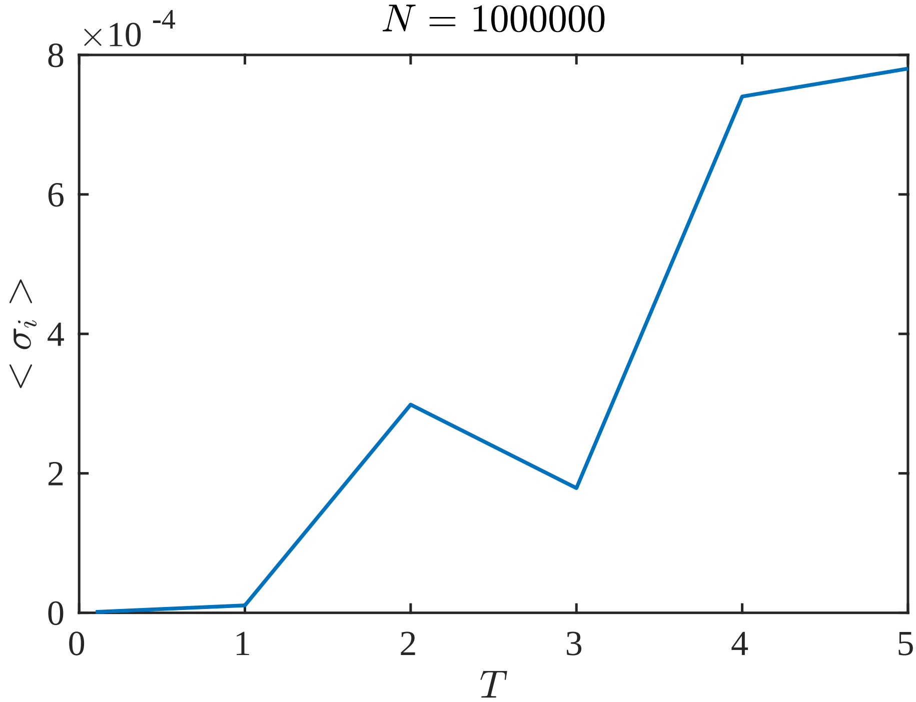


图 5.2. $<\sigma_i>$ 随 T 的变化关系.