Ising模型

丁历杰

1 模型简介

对于一系列晶格点的集合S,其中每一个晶格点都有一个所有与之相邻的晶格点的集合T,并另这些晶格点形成一个d维的晶格.对于每一个晶格点$k \in S$都有一个离散参数$\sigma_k \ in(+1,-1)$,代表每一个晶格点的自旋.而所有的离散参数集合$\Sigma \equiv \sigma_{kk\in S}$为体系的自旋组态. 对于每两个相邻的晶格点$i,j \in S$,引入相互作用参数$J_{ij}$,并假设每个晶格点都和外加磁场$h_j$作用,则体系的Hamilton量可以写作:

$$H(\sigma) = -\sum_{\langle i,j\rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \mu\sum_j h_j\sigma_j \tag{1.0.1}$$

其中$\langle i,j\rangle$代表i和j晶格点是相邻的,在Hamilton量的计算中只对每一堆晶格点计算一次.第二项是磁场与自旋的相互作用能,μ是晶格点的磁矩.

Ising模型 [1]是统计力学中关于相变的较为基础的模型.它的最早的提出者是Wilhelm Lenz(1920).后来他让他的学生Ernst Ising对一维的Ising模型进行求解,但是并没有发现相变现象,因此也没有得到更多物理学家的关注.随后,Lars Onsager于1944年对二维的Ising模型进行了解析求解($H = 0$的情况,$H \neq 0$尚无解析接),并同时发现了二维Ising模型中的相变现象,从而引起了更多学者的关注.之后,随着Landau、Ginzburg等人的努力.人们发现了Ising模型与量子场论之间的联系,并创立了平行的统计场论.

2 统计分析

在Ising模型中,粒子数固定,粒子自旋(广义坐标)的取值范围固定,所以如果定义了温度T固定(达到热平衡)的话,那么有其组成的系综就是一个正则系综.其相空间中的概率分布为Boltzman分布:

$$\begin{aligned} P_T(\Sigma) &= \frac{e^{-H(\Sigma)/(k_BT)}}{Z} \\ Z &= \sum_{\Sigma} e^{-H(\Sigma)/(k_BT)} \end{aligned} \tag{2.0.2}$$

因而对于任何一个可观测量Ω,都可以写作:

$$\langle\Omega\rangle = \sum_{\Sigma}\Omega(\Sigma)P_T(\Sigma) \tag{2.0.3}$$

2.1 关于参数的讨论

在Hamilton量中参数J_{ij}和h_i值得进一步探讨.

$$\begin{cases} J_{ij} > 0, \text{称该体系为铁磁性} \\ J_{ij} < 0, \text{称该体系为反铁磁性} \\ J_{ij} = 0, \text{说明晶格点间无相互作用} \end{cases}$$

$$\begin{cases} h_i > 0, \text{则晶格点} i \text{趋于正向} \\ h_i < 0, \text{则晶格点} i \text{趋于反向} \\ h_i = 0, \text{则说明没有外加力长作用} \end{cases}$$

2.2 模型的简化

常见的简化模型为:

1. 没有外加力场作用: $H(\sigma) = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j$
2. 进一步的,所有晶格相互作用是相同的: $H(\sigma) = -J\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i\sigma_j$

2.3 一维Ising模型解析解

对于正则系综,体系的特征函数是Helmoholtz自由能F,达到平衡态时F取极小值. [2]

$$F = -k_B T \ln Z \tag{2.3.1}$$

2.3.1 h=0

对于h=0的情况,可以在一维自由边界条件下进行求解,N个自旋排成一列,端点之间没有相互作用,此时系统的Hamilton量为:

$$E(\Sigma) = -J\sum_{i=1}^{N-1} \sigma_i\sigma_{i+1} = -J(\sigma_1\sigma_2 + \cdots + \sigma_{N-1}\sigma_N) \tag{2.3.2}$$

令$K \equiv J/K_B T, \sigma_i' = \sigma_i\sigma_{i-1}(i \leq 2)$,则系统的配分函数:

$$Z = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N} e^{K(\sigma_1\sigma_2+\cdots+\sigma_{N-1}\sigma_N)} = 2\prod_{i=2}^{N}\sum_{\sigma_i'} e^{K\sigma_i'} = 2[e^K + e^{-K}]^{N-1} \tag{2.3.3}$$

进而由(2.3.1)式,对于$N \to \infty$每个粒子的平均自由能$f = \frac{F}{N} = -k_B T \ln[e^K + e^{-K}]$,除了$T = 0, \infty$外f及其温度的高阶导数没有奇点,所以不存在相变.

2.3.2 $h \neq 0$

对于$h \neq 0$的情况,可以周期边界条件进行求解,,此时系统的Hamilton量为:

$$E(\Sigma) = -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} - H\sum_{i=1}^{N}\sigma_i \tag{2.3.4}$$

令$K \equiv J/K_BT, I = H/K_BT$,则系统的配分函数:

$$Z = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N} e^{I\sigma_1}e^{K\sigma_1\sigma_2}e^{I\sigma_2}e^{K\sigma_2\sigma_3}\ldots^{I\sigma_N}e^{K\sigma_N\sigma_1} = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N} V_{\sigma_1,\sigma_2}V_{\sigma_2,\sigma_3}\dot{s}V_{\sigma_N,\sigma_1} \tag{2.3.5}$$

其中的$V_{\sigma_i,\sigma_j} = e^{\frac{I\sigma_i}{2}}e^{K\sigma_i\sigma_j}e^{\frac{I\sigma_j}{2}}$ 可以视σ_i, σ_j的取值视为矩阵:

$$V = \begin{bmatrix} e^{K+I} & e^{-K+I} \\ e^{-K+I} & e^{K-I} \end{bmatrix}$$

进而:

$$Z = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N}\langle\sigma_1|V|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|V|\sigma_3\rangle\ldots\langle\sigma_N|V|\sigma_1\rangle = \sum_{\sigma_1}\langle\sigma_1|V^N|\sigma_1\rangle = TrV^N = \lambda_+^N + \lambda_-^N$$

$$\lambda_\pm = e^K\cosh I \pm \sqrt{e^{2K}\sinh I^2 + e^{-2K}}$$

进而由(2.3.1)式,对于$N \to \infty$每个粒子的平均自由能

$$f = \frac{F}{N} \approx -k_BT\ln e^K\cosh I + \sqrt{e^{2K}\sinh I^2 + e^{-2K}}(\lambda_+ > \lambda_-)$$

同样地除了$T = 0, \infty$外f及其温度的高阶导数没有奇点,所以不存在相变.

3 模拟分析

下面对二维的Ising模型进行模拟计算: 所采用的Hamilton量

$$E(\Sigma) = -J\sum_{i,j}\sigma_{i,j}(\sigma_{i-1,j} + \sigma_{i+1,j} + \sigma_{i,j-1} + \sigma_{i,j+1}) - H\sum_{i,j}\sigma_{i,j} \tag{3.0.6}$$

3.1 程序结构

为了加强程序的模块化，编写了如下的类来进行算法实现。

```
class ising
{
private:
    struct neighbor
    {
        int spin;
        int ux, uy;
        int dx, dy;
        int lx, ly;
        int rx, ry;
    } **mark;
    int size;
    int up_count;
    double up_rate;
    double T;
    double J;
    double H;
    /*
    neighbor is a struct for every lattice info storage
    and mark is a 2 dimensional neighbor pointer
     which contain all the map
    size is the size of the table
    m is the average spin
    T is the temperature
    h is the megnetic field
     */
public:
    ising(  int size_,
            double up_rate_,
            double T_,
            double J_,
            double H_);
    void refresh(   double T_,
                    double J_,
                    double H_);
    //refresh the object's parameters  as you wish!
    //will set all spins up
    void reset( double T_,
                double J_,
                double H_);
    //reset the object's parameters as you wish
```

```
42      //will not reset spins' direction
43
44
45      int get_size(); //size getting
46      int get_up_count(); //up_count getting
47      double get_up_rate(); //up_rate getting
48      double get_T();
49      double get_J();
50      double get_H();
51      double get_z(); //z = (exp(2J/T-)1)
52      double get_energy(); //get the energy
53      double get_m(); //get m = average(s)
54
55      //Algorithms
56      void metropolis(int steps);
57      void swendsen_wang(int steps);
58      void wolff(int steps);
59      void worm(int steps);
60
61
62
63      //output data methods
64      void output_mark_pos(std::string filename);
65      void output_n_E_m(  int init_step,
66                          int steps,
67                          int per_step,
68                          std::string filename);
69      void output_T_E_C_m(int equi_step,
70                          int ave_step,
71                          int step_per_ave,
72                          double T_start,
73                          double T_end,
74                          double delta_T,
75                          std::string filename);
76      void output_H_E_C_m(int equi_step,
77                          int ave_step,
78                          int step_per_ave,
79                          double H_start,
80                          double H_end,
81                          double delta_H,
82                          std::string filename);
```

```
83
84      void output_T_H_E_C_m(int equi_step,
85                            int ave_step,
86                            int step_per_ave,
87                            double T_start,
88                            double T_end,
89                            double delta_T,
90                            double H_start,
91                            double H_end,
92                            double delta_H,
93                            std::string filename);
94      void output_H_loop_E_C_m(int equi_step,
95                               int ave_step,
96                               int step_per_ave,
97                               double H_start,
98                               double H_end,
99                               double delta_H,
100                              std::string filename);
101 };
```

3.2 模拟算法

细致平衡 由主方程 [5]可以的到细致平衡解:

$$\frac{P(x \to x')}{P(x' \to x)} = \frac{P(x')}{P(x)} \tag{3.2.1}$$

3.2.1 Metropolis

Metropolis算法 [3]是一种Markov Chain Monte Carlo(MCMC)算法,由Metropolis等人在1953年提出 [4].

算法导出 为了得到Metropolis算法,将细致平衡中的转移概率分为两个部分:提议概率$g(x \to x')$和接受概率$A(x \to x')$.

$$P(x \to x') = g(x \to x')A(x \to x')$$

进而:

$$\frac{A(x \to x')}{A(x' \to x)} = \frac{P(x')}{P(x)} \frac{g(x' \to x)}{g(x \to x')}$$

选择满足上述条件的接受概率,便可满足细致平衡条件,而Metropolis算法为:

$$A(x \to x') = \min\left(1, \frac{P(x')}{P(x)} \frac{g(x' \to x)}{g(x \to x')}\right) \tag{3.2.2}$$

具体算法 在本次的模拟中,具体采用的算法是.

1. 以均匀分布随机选取一个晶格点,计算它的局域能量E_{old}
2. 反转它,计算新的局域能量E_{new}
3. 以概率min$(1, e^{-(E_{new}-E_{old})/k_BT})$接受新的状态
4. 重复上述步骤

3.2.2 Swendsen-Wang

Swendsen-Wang方法是处理临界慢化问题的一种加速方法,整个系统被分为一系列的团簇集团,每个团簇集团再被随机的赋予新的自旋值.由Swendsen和Wang于1987年提出 [6],具体的团簇产生由逾渗模型中的Hoshen-Kopelman的逾渗集团标记法 [7]产生.

具体算法

1. 产生初始自旋构型(比如可以先由Metropolis法热化)
2. 进行自旋键逾渗变换
3. 由Hoshen-Kopelman的逾渗集团标记法将所有联键的集团逐一标识
4. 对每个集团分别产生(+1,-1)的随机整数,赋予该集团中所有的晶格点该自旋值.
5. 重复2至4步

3.2.3 Worff

Worff算法也是一种集团算法,由Worff于1989年提出 [8].与Swendsen-wang 算法所不同的是,Worff算法一次只反转一个集团,并且集团的产生并不是连接所有的键逾渗中的联键集团. [9]

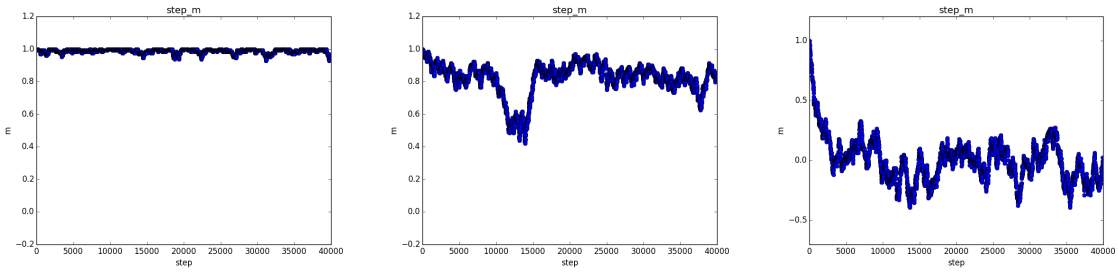
具体算法

1. 选取一个随机晶格点i,将其放入集团标记数组C
2. 遍历所有未遍历过的C中晶格点的邻居晶格点j,
3. 如果$\sigma_j = \sigma_i$, 则以$p = 1 - \exp(-2J/k_BT)$的概率接受它加入C(若拒绝了之后便不会再遍历到)
4. 当C中晶格点的邻居中没有未遍历过的了,C中所有的自旋反向.
5. 重复上述步骤

3.3 模拟分析

不同温度下,由于涨落的不同,从而构成平衡态的状态大不相同.

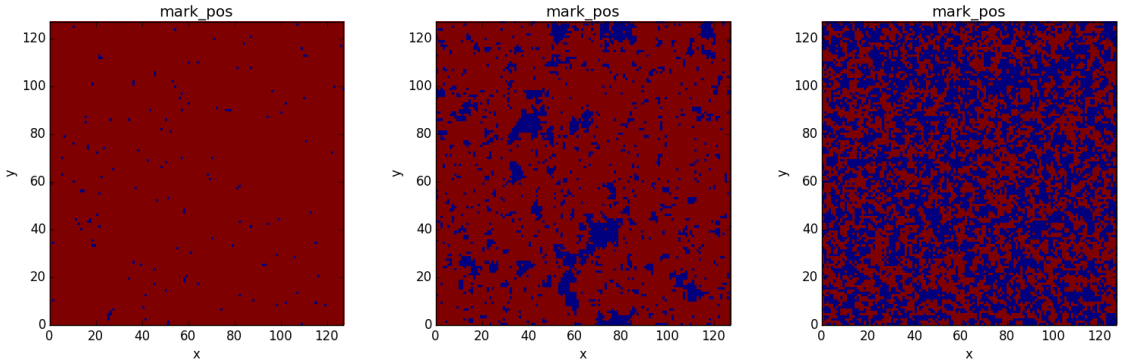
Figure 1: m随演化步数的变化



(a) T=1.50,J=1,H=0 (b) T=2.25,J=1,H=0 (c) T=4,J=1,H=0

可以看到不同温度下平均磁矩m随演化步数的变化

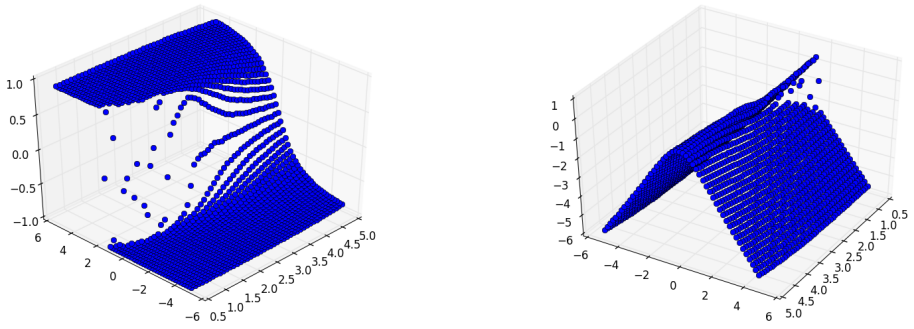
Figure 2: 体系稳态状态



(a) T=1.50,J=1,H=0 (b) T=2.25,J=1,H=0 (c) T=4,J=1,H=0

演化了1e8步后体系稳态状态

Figure 3: m关于(H,T)变化



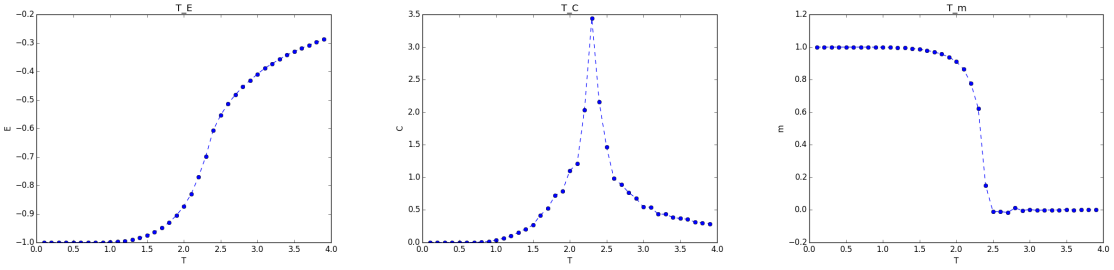
(a) H_T_m (b) H_T_E

而平均自旋m关于参数(H,T)的变化($Size = 64$) 可以看到,在T较小(<T_c)的部分,m随H的变化出现了断裂,也就是说存在一级相变,而在较大的T出,都是连续的,所以是存在二级相变.E页同样出项了断裂.

3.3.1 二级相变

随着温度的改变,观察平衡态统计量的变化(E:平均能量,C:比热,平均自旋),模拟的大小为128×128.

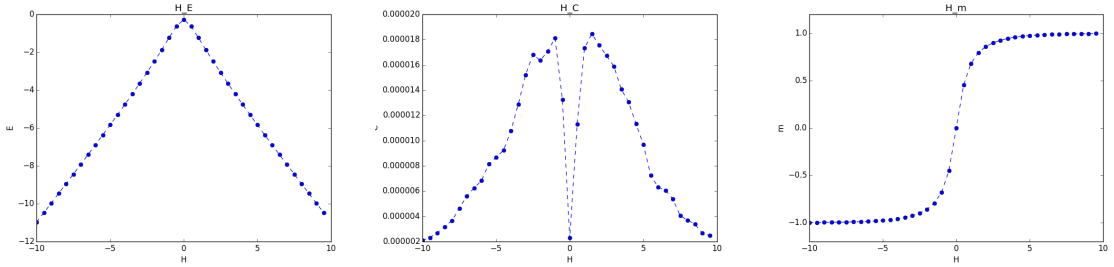
Figure 4: H=0,随温度变化



(a) T_E,J=1,H=0 (b) T_C,J=1,H=0 (c) T_m,J=1,H=0

H=0时,随温度的变化

Figure 5: $T > T_c$,随磁场变化



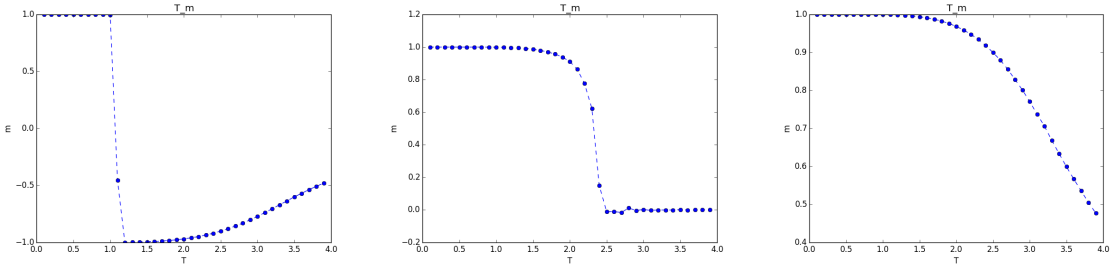
(a) H_E,T=4,J=1 (b) H_C,T=4,J=1 (c) H_m,T=4,J=1

$T > T_c$时,随磁场的变化

3.3.2 一级相变

随着温度的降低,以及磁场的改变,体系将出项一级相变:

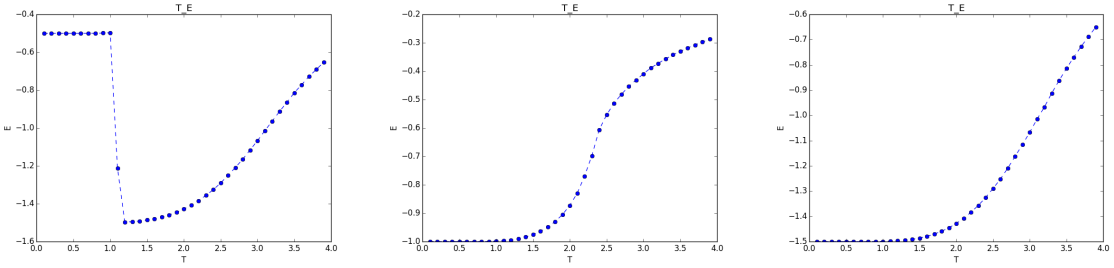
Figure 6: m_T趋势随磁场变化



(a) J=1,H=-0.5 (b) J=1,H=0 (c) J=1,H=0.5

改变磁场,m随T的变化趋势改变

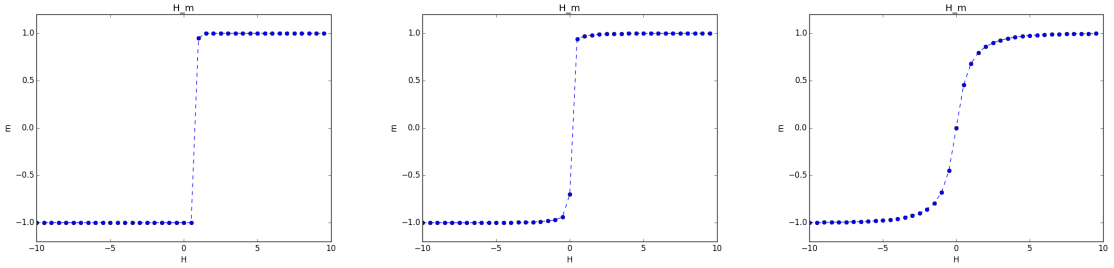
Figure 7: E_T趋势随磁场变化



(a) J=1,H=-0.5 (b) J=1,H=0 (c) J=1,H=0.5

改变磁场,E随T的变化趋势改变

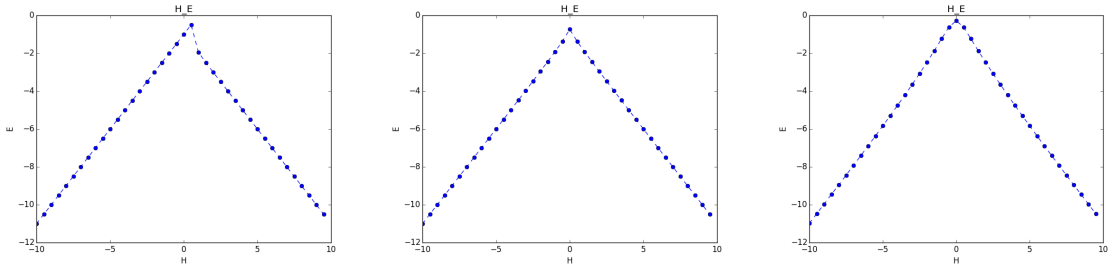
Figure 8: m_H趋势随温度变化



(a) T=1,J=1 (b) T=2.25,J=1 (c) T=4,J=1

改变温度,m随H的变化趋势改变

Figure 9: E_H趋势随磁场变化



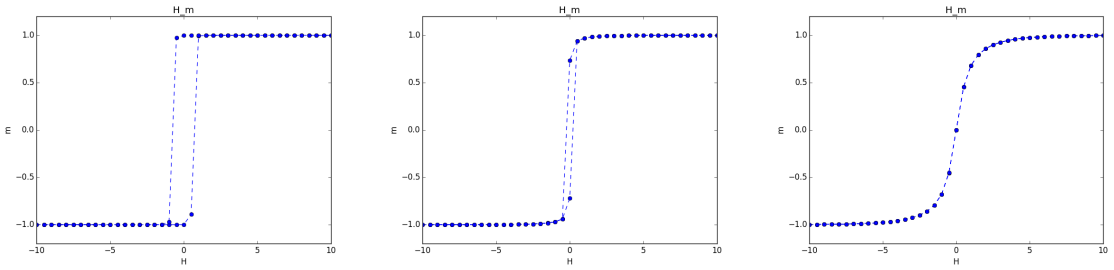
(a) T=1,J=1 (b) T=2.25,J=1 (c) T=4,J=1

改变温度,E随H的变化趋势改变

3.3.3 磁滞回线

当对磁场H为一级相变时,演增大和减小磁场的方向改变磁场: 不难发现,磁滞回线随着

Figure 10: 磁滞回线



(a) T=1,J=1 (b) T=2.25,J=1 (c) T=4,J=1

温度的增高逐渐消失,这是因为在模拟中自旋反转的机率正比于exp$(-\Delta E/k_BT)$,T越小,该机率越小,系统处于亚稳态的惯性越强,故更倾向于留在原来态.这样从正反方向演化,也就出现了相变点的不同,进而产生了磁滞回线.

4 总结

概要的介绍了Ising模型,并用Monte Carlo方法对二维Ising模型进行了模拟,讨论了稳态组态,一级相变,二级相变等若干问题. Ising模型是统计物理中同时具备了:表述简单,内涵丰富,应该广泛三种有点. 其扩展模型有:

1. XY模型: 自旋可以在平面中任意取向.
2. Heisenberg模型: 自旋在三维空间中任意去向.
3. Potts模型:自旋不再是± 1而是可以取q个离散状态.
4. 时钟模型: 二维中间中q个离散取向(XY模型+Potts模型)
5. Ising自旋玻璃: Ising模型中J_{ij}取满足Gauss分布的随机变量.

相关的应用也有很多,比如磁化模拟,投票模型,神经网络模型等.

参考文献

[1] https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model

[2] 汪志诚. 热力学·统计物理[M]// 高等教育出版社, 2008.第九章 9.5

[3] https:// en.wikipedia.org/ wiki/ Metropolis–Hastings_algorithm#cite_note-Metropolis-1

[4] Metropolis, N., Rosenbluth, A. W., Rosenbluth, M. N., Teller, A. H. & Teller, E. Equation of State Calculations by Fast Computing Machines. The Journal of Chemical Physics 21, 1087–1092 (1953).

[5] https://en.wikipedia.org/wiki/Master_equation

[6] Swendsen, R. H. & Wang, J.-S. Nonuniversal critical dynamics in Monte Carlo simulations. Phys. Rev. Lett. 58, 86–88 (1987).

[7] Percolation and cluster distribution. I. Cluster multiple labeling technique and critical concentration algorithm. (1976).

[8] Ulli Wolff. Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. 62, 361–364. 15 p (1989).

[9] Krauth, W. Cluster Monte Carlo algorithms. arXiv cond-mat.stat-mech, (2003).