Computational_Physics_8

A. Ising模型

使用Monte Carlo方法模拟 $L \times L$ 二维正方晶格上的经典Ising模型：

$$H = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}\sigma_i\sigma_j$$

其中 $\langle ij \rangle$ 取不重复的最近邻邻居，且固定 $J_{ij} = J = 1$。对晶格取周期边界条件。

1. 对 $L = 4$ 的情况，精确计算 $T = 1$ 的情况的平衡态能量 E 和自由能 F。（1分）
2. 写出一般情况markov chain monte carlo(MCMC)的细致平衡方程。对于Ising模型，构型的权重是什么？你选择的更新方法有哪些过程和逆过程？根据过程两侧的状态权重，设计一个选择概率，并计算接受概率。（1分）
3. 使用Monte-Carlo计算 $L = 4, T = 1$ 的平衡态能量 $\langle E \rangle$。验证你的算法是正确的。（1分）
4. 计算 $L = 8, 16, 32$ 的物理量随着温度变化的关系。温度区间取 $T = 1.5 - 3$，间距为 0.1。要计算的物理量包括：

- 磁化强度平方 $\langle m^2 \rangle = \langle M^2 \rangle / N^2$
- 比热 $c = \beta^2(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)/N$
- 磁化率 $\chi = \beta(\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)/N$

对每个物理量，将不同 L 的结果画在同一张图。你发现了什么？（2分）

B. 弛豫动力学

仍然考虑（A）中的模型，固定更新算法为：

- 每次更新在晶格上随机选取一个格点，尝试进行标准的Metropolis更新。
- 每随机尝试更新 L^2 次定义为一个蒙卡步。
  初始化无穷高温的系统，并取临界温度

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

进行演化。计算系统的平均能量 $\langle E(t) \rangle$。其中 t 是蒙卡时间步。

1. 对 $L = 16$ 的系统，画出能量随着时间的变化关系。粗略探究需要多长时间，系统能量弛豫到稳态 $\langle E(\infty)\rangle$。（2分）
2. 改变系统的尺寸，观察系统能量相对稳态的差距 $\Delta(t) \equiv \langle E(t)\rangle - \langle E(\infty)\rangle$ 的长时间行为。你发现了什么规律？系统尺寸对这个规律有怎样的影响？临界温度在这个问题中可能有什么意义（3分） hint: 谨慎地确定 $\langle E(\infty)\rangle$.