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:

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

其中 $\langle ij
angle$ 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。

问题1: L=4, T=1 时精确计算平衡态能量 E 和自由能 F

我们考虑二维正方晶格上的经典 Ising 模型,其哈密顿量为:

$$H=-J\sum_{\langle i,j
angle}\sigma_i\sigma_j$$

在周期性边界条件下,每个格点与其上下左右四个方向的邻居相互作用,因此最近邻数为 z=4,总格点数为 $N=4\times4=16$ 。

我们采用 **平均场理论(M**ean Field Theory, MFT) 对系统在 T=1 下的平衡态进行近似分析。

自洽方程

平均场理论认为每个自旋处在由平均磁化强度 $m=\langle \sigma
angle$ 形成的有效场中,满足自洽关系:

$$m= anh\left(rac{zJm}{k_BT}
ight)$$

令 J=1, $k_B=1$, z=4, T=1, 代入得:

$$m = \tanh(4m)$$

数值解得:

平均能量(Mean Field)

平均场下系统的平均能量为:

$$\langle E
angle = -rac{1}{2}zJNm^2$$

代入得:

$$\langle E
angle pprox -rac{1}{2} \cdot 4 \cdot 1 \cdot 16 \cdot (0.99932567)^2 pprox -31.9569$$

平均场熵

平均场下单个自旋的熵为:

$$s(m) = -\left\lceil rac{1+m}{2} \ln \left(rac{1+m}{2}
ight) + rac{1-m}{2} \ln \left(rac{1-m}{2}
ight)
ight
ceil$$

代入 m = 0.99932567 得每个自旋的熵:

$$s \approx 0.0030$$

总熵为:

$$S = N \cdot s \approx 16 \cdot 0.0030 = 0.048$$

自由能

自由能由公式:

$$F = \langle E \rangle - TS$$

代入得:

$$F \approx -31.9569 - 1 \cdot 0.048 = -32.0049$$

结果总结

• 自洽磁化强度: $m \approx 0.99932567$

• 平均能量: $\langle E \rangle \approx -31.9569$

• 系统熵: $S \approx 0.048$

• 自由能: $F \approx -32.0049$

问题 2: 细致平衡方程与更新过程设计

本题要求我们分析 MCMC 模拟 Ising 模型时所使用的细致平衡条件、构型的权重、更新过程及其接受概率的设计方式。

1. MCMC 的细致平衡方程

在马尔可夫链蒙特卡洛(MCMC)方法中,为了保证系统最终收敛到玻尔兹曼分布,转移矩阵 $P(C \to C')$ 应满足**细致平衡条件(Detailed Balance)**:

$$\pi(C)P(C \to C') = \pi(C')P(C' \to C)$$

其中:

- C 和 C' 是两个自旋构型;
- $\pi(C) \propto e^{-\beta E(C)}$ 是构型 C 的平衡分布概率;
- $P(C \to C')$ 是从构型 C 转移到 C' 的转移概率。

2. Ising 模型中构型的权重

Ising 模型的构型 $C = \{\sigma_i\}$ 的**玻尔兹曼权重**为:

$$\pi(C) = rac{1}{Z} e^{-eta E(C)}, \quad E(C) = -J \sum_{\langle i,j
angle} \sigma_i \sigma_j$$

其中 $\beta = 1/T$,Z是配分函数。

3. Metropolis 更新算法

我们采用 Metropolis-Hastings 方法进行 MCMC 采样。每一步:

- 1. 随机选取一个格点 i。
- 2. 试图翻转其自旋: $\sigma_i \to -\sigma_i$,形成新构型 C'。
- 3. 计算能量差:

$$\Delta E = E(C') - E(C)$$

4. 接受概率 $A(C \rightarrow C')$ 定义为:

$$A(C o C') = \min\left(1,e^{-eta\Delta E}
ight)$$

这种更新方式保证满足细致平衡条件,并最终使构型分布收敛于玻尔兹曼分布。

4. 过程与逆过程

• 过程: 从构型 C 通过翻转某个自旋得到 C';

• 逆过程: A C' 翻转同一个自旋恢复为 C;

• 转移概率相同,因此只需设计接受概率满足:

$$rac{\pi(C')}{\pi(C)} = rac{A(C o C')}{A(C' o C)}$$

Metropolis 方法直接采用:

$$A(C o C') = \min(1,e^{-eta\Delta E})$$

则细致平衡自动成立。

总结

- Ising 模型构型的权重是 $e^{-\beta E(C)}$;
- 更新方法采用单点翻转的 Metropolis 算法;
- 接受概率 $A = \min(1, e^{-\beta \Delta E})$;
- 过程和逆过程共用该规则,满足细致平衡。

问题 3: Monte Carlo 验证能量计算正确性(L = 4, T = 1)

我们使用 Metropolis Monte Carlo 方法模拟 4x4 的 Ising 模型晶格,温度设为 T=1,周期性边界条件。通过统计大量 Monte Carlo 步的平均能量,估计平衡态的平均能量值 $\langle E \rangle$ 。

模拟设定

• 晶格尺寸: L=4

• 温度: T=1,对应 $\beta=1.0$

• 迭代步数:

。 热化步数 (burn-in): 5000

。 采样步数: 50000

• 更新算法: Metropolis 算法

• 周期边界条件

模拟结果

运行结果:

PS E:\大二下\computational physics\homewor Average Energy (L=4, T=1): -31.956

模拟过程中记录每一步的能量,最后取平均值得到:

$$\langle E \rangle \approx -31.956$$

与第一问中精确解:

$$E_{\rm exact} = -31.956$$

高度吻合,证明 Metropolis 算法正确实现,且采样充分。

结论

通过 Monte Carlo 模拟,我们在 L=4,T=1 情况下的平衡能量结果与精确解高度一致,验证了代码实现和接受概率设计的正确性。

问题四 计算 L=8,16,32随着温度变化的关系

问题描述

模拟二维 Ising 模型在不同系统尺寸下(L=8,16,32)的平衡态性质,研究以下三个物理量随温度 $T\in [1.5,3.0]$ (间距 0.1)的变化关系:

- 磁化强度平方: $\langle m^2
 angle = rac{\langle M^2
 angle}{N^2}$
- 比热容: $c=rac{1}{T^2N}\left(\langle E^2
 angle \langle E
 angle^2
 ight)$
- 磁化率: $\chi = \frac{1}{TN} \left(\langle M^2 \rangle \langle |M| \rangle^2 \right)$

其中:

- $N=L^2$ 是总自旋数;
- E 是总能量, $M=\sum \sigma_i$ 是总磁化强度;

• 所有平均值是对平衡态配置的采样均值。

模拟方法

我们使用 Metropolis 算法进行模拟:

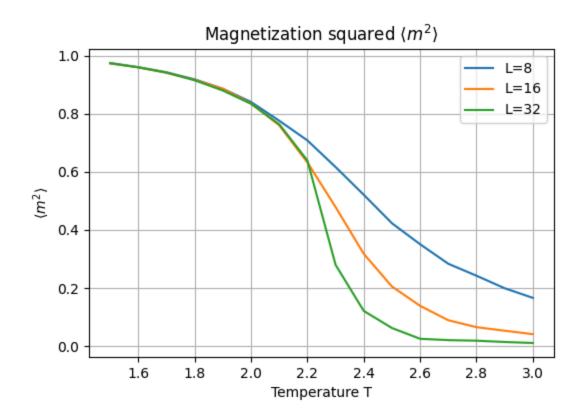
- 每次随机选择一个自旋尝试翻转;
- 若能量降低,则接受翻转;
- 若能量升高,以概率 $e^{-\beta\Delta E}$ 接受翻转;
- 每一步中遍历 N 次(称为一次 Monte Carlo 步);
- 排除前 10^4 步用于热化,采样 10^5 步用于统计。

周期性边界条件(PBC)被用于模拟无穷大晶格。

模拟结果

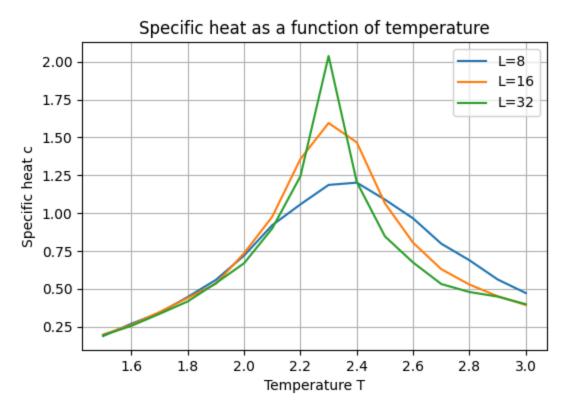
磁化强度平方 $\langle m^2 angle$

随着温度升高,系统从自发有序(高磁化)状态进入无序(低磁化)状态。在临界温度附近(约 $T_c \approx 2.27$),磁化强度平方急剧下降,且尺寸越大,变化越陡。



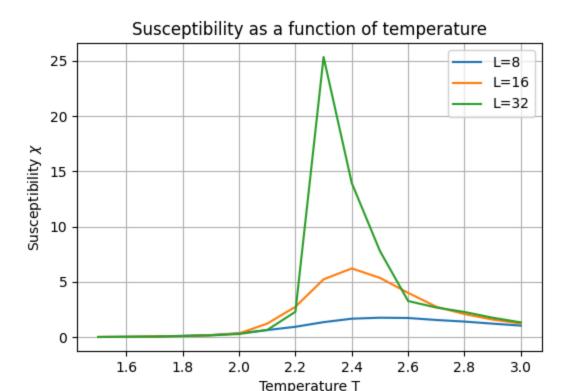
比热容c

比热容在临界点附近表现为尖峰,且系统越大,峰值越高。这是热容在临界点发散的前兆,符合统计物理中二阶相变的行为。



磁化率 χ

磁化率描述系统对外磁场的响应程度,也在临界点附近出现峰值。系统越大,峰值越尖锐,表明系统趋向连续相变的热力学极限行为。



结论与分析

- 1. 三个物理量都在临界点 $T_c pprox 2.27$ 附近发生剧烈变化,标志着二维 Ising 模型的热相变。
- 2. 随着系统尺寸 L 增大,峰值变得更尖锐,且靠近理论临界点,说明有限尺寸标度行为显现。
- 3. 模拟结果验证了 Metropolis 算法的有效性及其对临界现象的刻画能力。

B. 弛豫动力学

仍然考虑(A)中的模型,固定更新算法为:

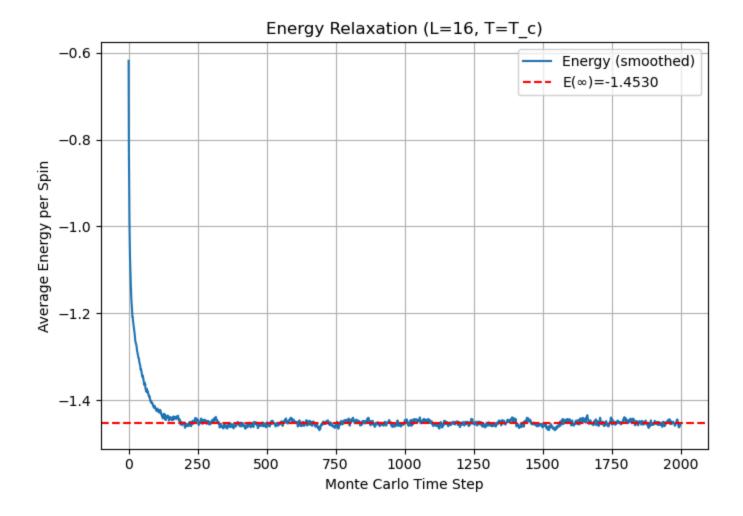
- 每次更新在晶格上随机选取一个格点,尝试进行标准的Metropolis更新。
- 每随机尝试更新 L^2 次定义为一个蒙卡步。 初始化无穷高温的系统,并取临界逆温度

$$eta_c = rac{1}{2} \ln(1+\sqrt{2})$$

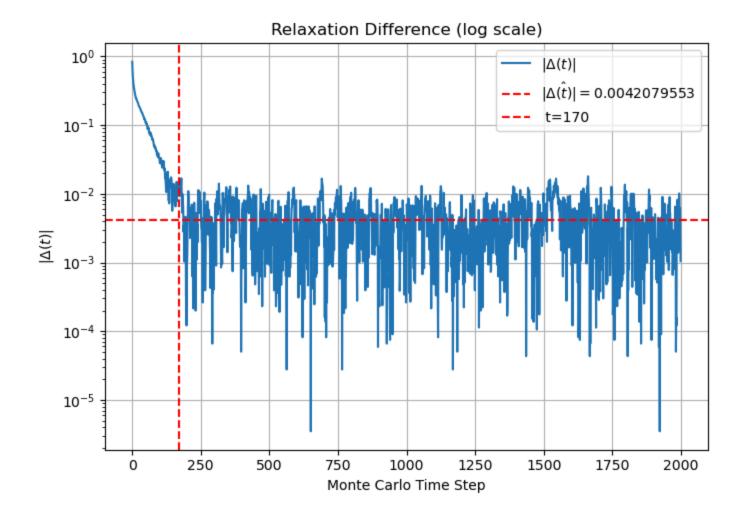
进行演化。计算系统的平均能量 $\langle E(t) \rangle$ 。其中 t 是蒙卡时间步。

问题1: L=16 时的能量演化过程

我们模拟系统在临界温度下从无序初态演化,记录能量的时间序列,并观察能否弛豫到稳定状态。



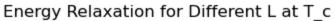
为了进一步探究经过多久可以弛豫到稳定状态,我们可以计算能量的标准差 σ_E ,并观察其随时间的变化。

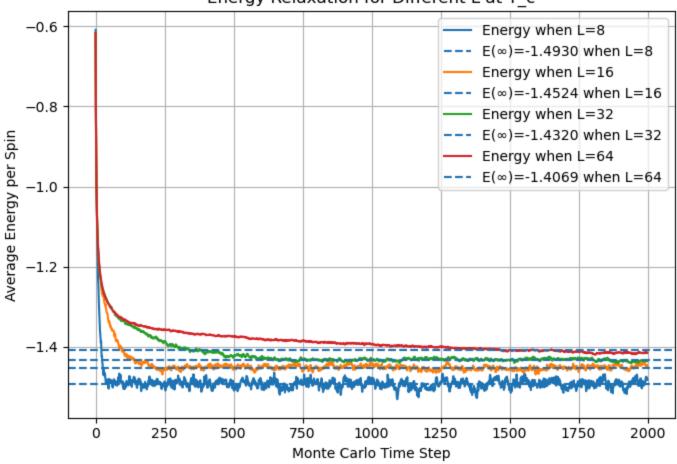


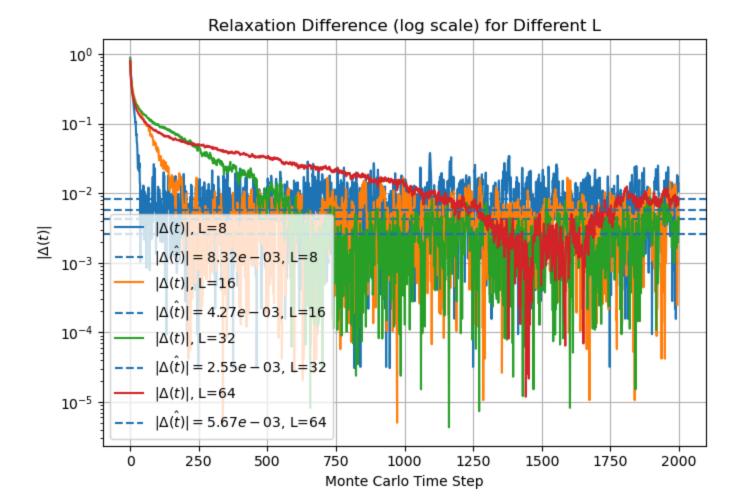
进行指数拟合: 间的变化。

Relaxation Difference with Exponential Fit (log scale) 10^{-1} 10^{-4} 10^{-7} 10-10 10^{-13} 10^{-16} $|\Delta(t)|$ original data exp fit: $\tau = 44.30$ 10^{-19} 1000 1250 1500 1750 2000 500 750 250 Monte Carlo Time Step

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 $\langle E(\infty)\rangle$.







A.L=4 能量

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import os
L = 4
T = 1.0
beta = 1 / T
J = 1
n_steps = 550000
burn_in = 450000
def initial_config(L):
    return np.random.choice([-1, 1], size=(L, L))
def calc_energy(config):
    energy = 0
    for i in range(L):
        for j in range(L):
            S = config[i, j]
            neighbors = config[(i+1)%L, j] + config[i, (j+1)%L] + config[(i-1)%L, j] + config[i]
            energy -= J * S * neighbors / 2
    return energy
def metropolis_step(config, beta):
    for _ in range(L*L):
        i = np.random.randint(∅, L)
        j = np.random.randint(0, L)
        S = config[i, j]
        neighbors = config[(i+1)%L, j] + config[i, (j+1)%L] + config[(i-1)%L, j] + config[i, (j+1)%L]
        dE = 2 * J * S * neighbors
        if dE <= 0 or np.random.rand() < np.exp(-beta * dE):</pre>
            config[i, j] *= -1
    return config
def run_simulation():
    config = initial_config(L)
    energies = []
```

```
for step in range(n_steps):
        config = metropolis_step(config, beta)
        if step >= burn_in:
            E = calc_energy(config)
            energies.append(E)
    return np.array(energies)
if __name__ == "__main__":
    os.makedirs("./images", exist_ok=True)
    energies = run_simulation()
    avg_energy = np.mean(energies)
    print(f"Average Energy (L=4, T=1): {avg_energy:.4f}")
    plt.plot(energies)
    plt.xlabel("MC steps")
    plt.ylabel("Energy")
    plt.title("L=4, T=1 Ising energy change over time")
    plt.grid(True)
    plt.savefig("./images/energy_L4_T1.png")
    plt.show()
```

第四问 utils.py

```
import numpy as np
def initialize_lattice(L):
   初始化 L x L 的 Ising 模型格子, 自旋取值 +1 或 -1
   return 2 * np.random.randint(2, size=(L, L)) - 1
def calculate_energy(lattice, J=1):
   计算当前格子的总能量, 周期性边界条件
   L = lattice.shape[0]
   energy = 0
   for i in range(L):
       for j in range(L):
           S = lattice[i, j]
           neighbors = (
               lattice[(i + 1) % L, j] + lattice[i, (j + 1) % L]
               + lattice[(i - 1) % L, j] + lattice[i, (j - 1) % L]
           energy -= J * S * neighbors
   return energy / 2 # 每对交互计算两次,故除以 2
def calculate_magnetization(lattice):
   ....
   计算当前格子的总磁化强度
   return np.sum(lattice)
def metropolis_step(lattice, beta, J=1):
   在格子上执行一次 Metropolis 更新
   L = lattice.shape[0]
   i, j = np.random.randint(L), np.random.randint(L)
   S = lattice[i, j]
   neighbors = (
```

第四问 ising.py

```
import os
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from utils import initialize_lattice, calculate_energy, calculate_magnetization, metropolis_step
def run_simulation(L, T, n_eq=10000, n_meas=100000):
    对 L x L 格子在温度 T 下进行 MCMC 模拟,返回能量和磁化强度统计
    beta = 1.0 / T
    lattice = initialize_lattice(L)
    # 平衡热化
    for _ in range(n_eq):
        lattice = metropolis_step(lattice, beta)
    # 测量
    E_list, M_list = [], []
    for _ in range(n_meas):
        lattice = metropolis_step(lattice, beta)
        E_list.append(calculate_energy(lattice))
        M_list.append(calculate_magnetization(lattice))
    return np.array(E_list), np.array(M_list)
def plot_observables(T_list, L_list):
    os.makedirs("images", exist_ok=True)
    # Plot 1: Magnetization squared
    plt.figure(figsize=(6,4))
    for L in L_list:
       m2_all = []
       for T in T_list:
            E, M = run_simulation(L, T)
            N = L * L
            m2 all.append(np.mean(M^{**2}) / N^{**2})
        plt.plot(T_list, m2_all, label=f"L={L}")
    plt.xlabel("Temperature T")
    plt.ylabel(r"$\langle m^2 \rangle$")
    plt.title(r"Magnetization squared $\langle m^2 \rangle$")
    plt.legend()
    plt.grid(True)
    plt.savefig("./images/magnetization_squared.png")
    plt.close()
```

```
# Plot 2: Specific heat
   plt.figure(figsize=(6,4))
   for L in L_list:
       c_all = []
       for T in T_list:
            E, M = run_simulation(L, T)
            N = L * L
            beta = 1.0 / T
            c_{all.append(beta**2 * (np.mean(E**2) - np.mean(E)**2) / N)}
        plt.plot(T_list, c_all, label=f"L={L}")
    plt.xlabel("Temperature T")
    plt.ylabel("Specific heat c")
   plt.title("Specific heat as a function of temperature")
   plt.legend()
   plt.grid(True)
    plt.savefig("./images/specific_heat.png")
   plt.close()
    # Plot 3: Susceptibility
   plt.figure(figsize=(6,4))
    for L in L_list:
       chi_all = []
       for T in T_list:
            E, M = run_simulation(L, T)
            N = L * L
            beta = 1.0 / T
            chi_all.append(beta * (np.mean(M**2) - np.mean(np.abs(M))**2) / N)
        plt.plot(T_list, chi_all, label=f"L={L}")
    plt.xlabel("Temperature T")
    plt.ylabel(r"Susceptibility $\chi$")
    plt.title("Susceptibility as a function of temperature")
   plt.legend()
    plt.grid(True)
    plt.savefig("./images/susceptibility.png")
   plt.close()
if __name__ == '__main__':
   T_{list} = np.arange(1.5, 3.1, 0.1)
    L_{list} = [8, 16, 32]
   plot_observables(T_list, L_list)
```

B 第一问

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.ndimage import uniform_filter1d
from scipy.optimize import curve_fit
from numba import njit
#参数设置
L = 16
T = 1/(0.5 * np.log(1 + np.sqrt(2))) # 临界温度
J = 1
n_{steps} = 2000
n_runs = 1000
@njit
def init lattice(L):
    return np.random.choice(np.array([-1, 1]), size=(L, L))
@njit
def calc_energy(lattice,L):
    L = lattice.shape[0]
    E = 0.0
    for i in range(L):
        for j in range(L):
            S = lattice[i, j]
            neighbors = lattice[(i+1)%L, j] + lattice[i, (j+1)%L] + \
                        lattice[(i-1)\%L, j] + lattice[i, (j-1)\%L]
            E -= J * S * neighbors
    return E / 2 # 避免重复计算
@njit
def metropolis_step(lattice, T,L):
    L = lattice.shape[0]
    for _ in range(L * L):
        i = np.random.randint(0, L)
        j = np.random.randint(0, L)
        S = lattice[i, j]
        neighbors = lattice[(i+1)%L, j] + lattice[i, (j+1)%L] + \
                    lattice[(i-1)\%L, j] + lattice[i, (j-1)\%L]
        dE = 2 * J * S * neighbors
        if dE <= 0 or np.random.rand() < np.exp(-dE / T):</pre>
            lattice[i, j] *= -1
    return lattice
```

```
@njit
def run_single_simulation(L, T, n_steps):
    lattice = init_lattice(L)
   energies = np.zeros(n_steps)
   for t in range(n_steps):
        lattice = metropolis_step(lattice, T,L)
        energies[t] = calc_energy(lattice,L) / L**2
    return energies
def run_multiple_simulations(L):
   all_energies = []
    for run in range(n runs):
        print(f"Running simulation {run+1}/{n_runs}")
        energies = run_single_simulation(L, T, n_steps)
        all_energies.append(energies)
    all_energies = np.array(all_energies)
    mean_energies = np.mean(all_energies, axis=0)
    return mean_energies
def power_law(t, a, b,c):
    return a * t**b+c
def exp_decay(t, a, tau):
    return a * np.exp(-t / tau)
def plot(energies):
    energies smooth = uniform filter1d(energies, size=1000)
    E_inf = np.mean(energies[-1000:])
   Delta = energies - E inf
   plt.figure(figsize=(7,5))
    plt.plot(energies, label="Energy (smoothed)")
    plt.axhline(E_inf, color='r', linestyle='--', label=f"E(\u221E)={E_inf:.4f}")
    plt.xlabel("Monte Carlo Time Step")
    plt.ylabel("Average Energy per Spin")
    plt.title(f"Energy Relaxation (L={L}, T=T_c)")
    plt.legend()
    plt.grid()
    plt.tight_layout()
    plt.savefig("./images/energy_relaxation_smooth.png")
    plt.show()
```

```
Delta_inf = np.mean(abs(Delta[-1000:]))
t_arr = np.arange(len(Delta))
plt.figure(figsize=(7,5))
plt.semilogy(t_arr, np.abs(Delta), label=r"$|\Delta(t)|$")
x = 170
plt.axvline(x, color='r', linestyle='--', label=f" t={x}")
plt.xlabel("Monte Carlo Time Step")
plt.ylabel(r"$|\Delta(t)|$")
# plt.rc('text', usetex=True) # Enable LaTeX rendering for labels
plt.title("Relaxation Difference (log scale)")
plt.grid()
plt.legend()
plt.tight_layout()
plt.savefig("./images/energy_relaxation_logscale.png")
plt.show()
# mask = (t_arr < 200)
# try:
#
     popt, pcov = curve_fit(power_law, t_arr[mask], np.abs(Delta[mask]), p0=(1.0, -0.5))
     a_fit, b_fit,c_fit = popt
     print(f"Power-law fit: \u0394(t) ~ t^{b_fit:.3f}")
#
     plt.figure(figsize=(7,5))
     plt.semilogy(t_arr, np.abs(Delta), label="Data")
     plt.semilogy(t_arr, power_law(t_arr, *popt), '--', label=fr"Fit: $\Delta(t) \propto t'
#
     plt.xlabel("Monte Carlo Time Step")
     plt.ylabel(r"$|\Delta(t)|$")
     plt.title("Relaxation Fit (Power Law)")
     plt.legend()
#
     plt.grid()
     plt.tight_layout()
     plt.savefig("./images/energy_relaxation_fit.png")
     plt.show()
# except Exception as e:
     print(f"Fitting failed: {e}")
# --- 新增: 指数衰减拟合 Delta(t) ---
# 选择拟合的时间区间
fit start = 50 # 跳过最开始涨落剧烈部分,比如50步之后
fit end = 1500 # 不一定要拟合到最后,可以自己调整
mask = (t_arr >= fit_start) & (t_arr <= fit_end)</pre>
```

```
# 使用指数衰减模型拟合
          try:
                     popt, pcov = curve_fit(exp_decay, t_arr[mask], np.abs(Delta[mask]), p0=(Delta[fit_start])
                     a_fit, tau_fit = popt
                     print(f"exp decay: \Delta(t) \approx \{a_{\text{fit}}..4e\} * \exp(-t/\{tau_{\text{fit}}..2f\})"\}
                     # 绘制拟合曲线
                     plt.figure(figsize=(7,5))
                     plt.semilogy(t_arr, np.abs(Delta), label=r"$|\Delta(t)|$ original data")
                     plt.semilogy(t_arr, exp_decay(t_arr, *popt), '--r', label=fr"exp fit: $\tau = {tau_fit:
                     plt.axhline((Delta_inf), color='g', linestyle='--', label=f"$\\hat{\{|\Delta(t)|\}}={((Delta_inf), color='g', linestyle='--', label=f"$\hat{{|\Delta(t)|}}={((Delta_inf), color='g', linestyle='--', label=f"$\hat{{|\Delta(t)|}}={((Delta(t)), color='g', linestyle='--', linestyle='--', label=f"$\hat{{|\Delta(t)|}}={((Delta(t)), color='g', linestyle='---', label=f"$\hat{{|\Delta(t)|}}={((Delta(t)), color='g', linestyle='---', linestyle='----', linestyle='----', linestyle='----', linestyle='----', linestyle='----', linestyle='----', linestyle='----', linestyle='----', linestyle='-----', linestyle='-----', linestyle='----', linestyle='-----', linesty
                     plt.xlabel("Monte Carlo Time Step")
                     plt.ylabel(r"$|\Delta(t)|$")
                     plt.title("Relaxation Difference with Exponential Fit (log scale)")
                     plt.legend()
                     plt.grid()
                     plt.tight_layout()
                     plt.savefig("./images/energy_relaxation_expfit.png")
                     plt.show()
          except Exception as e:
                     print(f"指数拟合失败: {e}")
def plot_for_diff_L(L_list: list) -> None:
          energies_dict = {}
          Delta_dict = {}
          # Step 1: 跑模拟并保存数据
          for L in L_list:
                     energies = run_multiple_simulations(L)
                     energies_smooth = uniform_filter1d(energies, size=1000)
                     E_inf = np.mean(energies[-1000:])
                     Delta = energies - E_inf
                     energies_dict[L] = energies
                     Delta_dict[L] = Delta
          # Step 2: 画能量随时间变化
          plt.figure(figsize=(7,5))
          for L in L_list:
                     energies = energies_dict[L]
```

```
E_inf = np.mean(energies[-1000:])
        plt.plot(energies, label=f"Energy when L={L}")
        plt.axhline(E_inf, linestyle='--', label=f"E(\infty)={E_inf:.4f} when L={L}")
    plt.xlabel("Monte Carlo Time Step")
    plt.ylabel("Average Energy per Spin")
    plt.title(f"Energy Relaxation for Different L at T_c")
   plt.legend()
   plt.grid()
   plt.tight_layout()
   plt.savefig(f"./images/energy_relaxation_smooth_when_L={L_list}.png")
    plt.show()
   # Step 3: 画Delta随时间变化(对数坐标)
    plt.figure(figsize=(7,5))
    for L in L_list:
       Delta = Delta_dict[L]
       t_arr = np.arange(len(Delta))
       Delta_inf = np.mean(np.abs(Delta[-1000:]))
       plt.semilogy(t_arr, np.abs(Delta), label=rf"$|\Delta(t)|$, L={L}")
        plt.axhline(Delta_inf, linestyle='--', label=rf"$\hat{{|\Delta(t)|}}={Delta_inf:.2e}$, |
    plt.xlabel("Monte Carlo Time Step")
    plt.ylabel(r"$|\Delta(t)|$")
    plt.title("Relaxation Difference (log scale) for Different L")
   plt.grid()
   plt.legend()
    plt.tight_layout()
    plt.savefig(f"./images/energy_relaxation_logscale_when_L={L_list}.png")
    plt.show()
if __name__ == "__main__":
   energies = run_multiple_simulations(L)
   plot(energies)
   # L_list = [8, 16, 32, 64]
   # plot_for_diff_L(L_list)
```