二维正方晶格伊辛模型的蒙特卡洛模拟

吴晋渊 18307110155

复旦大学物理学系

2021

伊辛模型

$$H[\sigma] = -J\sum_{\langle \boldsymbol{i},\boldsymbol{j}\rangle}\sigma_{\boldsymbol{i}}\sigma_{\boldsymbol{j}} - h\sum_{\boldsymbol{i}}\sigma_{\boldsymbol{i}}, \quad Z = \sum_{\sigma} \mathrm{e}^{-\beta H[\sigma]} \tag{1}$$

- 最为著名的磁学模型：简洁地重现了铁磁序、顺磁序、居里点
- 可能的自旋构型随着体系边长L增大，指数增大；最常出现的那些态无法一眼辨认出来
- 难以解析研究（二维正方晶格上的解析解在提出后30年才被找到）——实际上，一开始伊辛模型被认为没有相变
- 蒙特卡洛模拟

Metropolis方法更新自旋构型

Metropolis方法[1]

- 马尔可夫链蒙特卡洛（MCMC）：构建马尔可夫过程，使得收敛后的概率分布是我们需要的分布
- 只需要满足以下条件，平衡时$\mathcal{C}$出现的概率就是$p(\mathcal{C})$
  - 细致平衡条件

$$p(\mathcal{C})p(\mathcal{C} \to \mathcal{D}) = p(\mathcal{D})p(\mathcal{D} \to \mathcal{C}) \tag{2}$$

  - 各态历经
- 设$\mathcal{C}$和$\mathcal{D}$只差了一个自旋，$H[\mathcal{C}] > H[\mathcal{D}]$
  - 可以取$p(\mathcal{C} \to \mathcal{D}) = 1$,

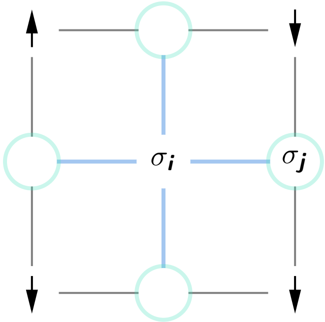
$$p(\mathcal{D} \to \mathcal{C}) = \mathrm{e}^{-\beta(H[\mathcal{C}]-H[\mathcal{D}])} =: \text{accept rate}, \tag{3}$$

    收敛时概率即为平衡态统计的概率。
  - 统一处理：若0到1之间的随机数小于accept rate就翻转

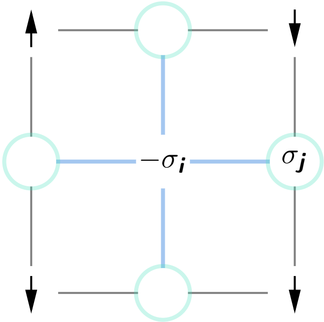
[1] Janke, W. 1996. Monte Carlo simulations of spin systems. In Computational Physics. Springer. among others

Metropolis方法更新自旋构型

显含格点i的那部分能量：$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j - h\sigma_i$



$$P_{\text{before}} = C\mathrm{e}^{J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j + h\sigma_i}$$



$$P_{\text{after}} = C\mathrm{e}^{-J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j - h\sigma_i}$$

于是翻转格点i的accept rate就是

$$\text{accept rate} = \frac{P_{\text{after}}}{P_{\text{before}}} = \mathrm{e}^{-2J\sum_{\langle i,j\rangle} \sigma_i\sigma_j - 2h\sigma_i}\,. \tag{4}$$

初始化自旋构型

```
class MPIsing {
    constructor(J, h, site_list, inverse_list, neighbor_list) {
        this.J = J;
        this.h = h;
        if (site_list.length != inverse_list.length ||
            site_list.length != neighbor_list.length ||
            inverse_list.length != neighbor_list.length) {
            throw SyntaxError("The length of site_list, inverse_list and neighbor_list must be all the same.");
        }
        this.site_list = site_list;
        this.inverse_list = inverse_list;
        this.neighbor_list = neighbor_list;

        // Estimate the initial state according to the direction of h
        if (h >= 0) {
            this.configuration = new Array(site_list.length).fill(-1);
        } else {
            this.configuration = new Array(site_list.length).fill(1);
        }
    }
```

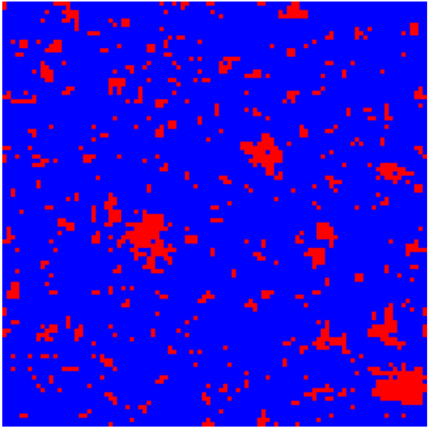
程序代码示例

更新一次；所谓“一次”指的是将所有的格点都尝试翻转一遍

```
update() {
    const J = this.J;
    const h = this.h;
    for (let current_site = 0; current_site < this.site_list.length; current_site++) {
        const sigma_i = this.configuration[current_site];

        let delta_F_J = 0.0;
        for (const neighbor_site of this.neighbor_list[current_site]) {
            const sigma_j = this.configuration[neighbor_site];
            delta_F_J += 2 * J * sigma_i * sigma_j;
        }

        const delta_F_h = 2 * h * sigma_i;
        const accept_rate = Math.exp(delta_F_J + delta_F_h);

        if (Math.random() < accept_rate) {
            this.configuration[current_site] *= -1;
        }
    }
}
```

访问`ising-phase-plot-configuration/index.html`

展示二维正方晶格伊辛模型的自旋构型



在这个页面上，你可以设置二维正方晶格上的伊辛模型

$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i \sigma_i$$

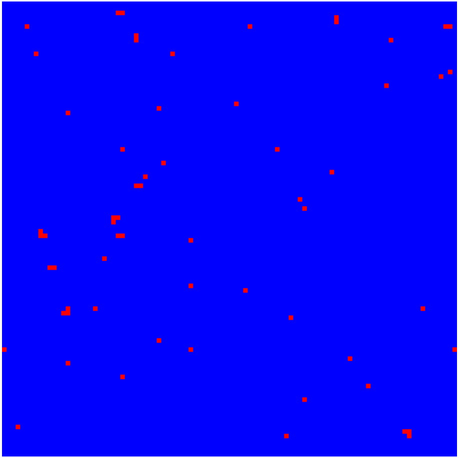
的磁场h（我们固定$J=1$）和系统温度T，以及系统大小L，观察自旋构型会发生什么变化。提示：$J=1$时，$T_c = 2.2691853142$。观察接近临界点和远离临界点时的系统行为。 注意我们是从所有自旋方向和磁场一致开始模拟的，在接近临界点时，更新较慢，需要一定时间才能够看到达到热平衡时的构型。

h 0.0
T 2.2
L 100
开始模拟 停止模拟

演示1：展示自旋构型

$L = 100$，观察不同温度下的构型：

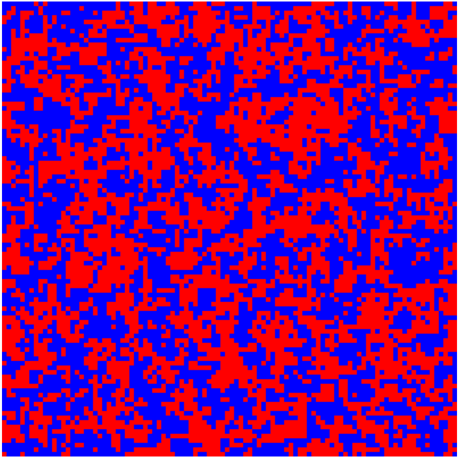
- $T = 1.5, h = -0.1$是铁磁相，几乎所有自旋均向下，只有零星涨落



演示1：展示自旋构型

$L = 100$，观察不同温度下的构型：

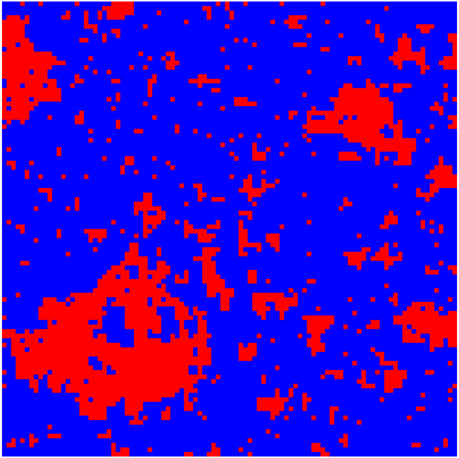
- $T = 3.5, h = 0.0$是顺磁相，向上和向下的自旋散乱分布（虽然由于铁磁性相互作用，方向相同的自旋还是聚集在一起）



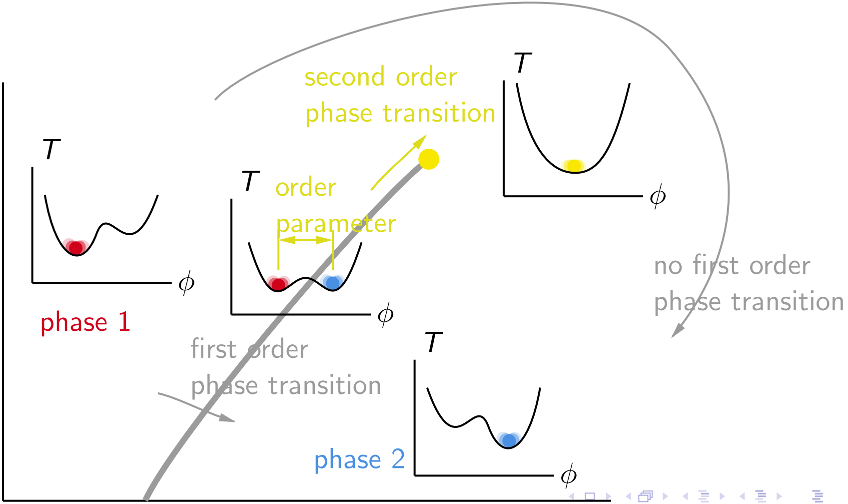
演示1：展示自旋构型

$L = 100$，观察不同温度下的构型：

- $T = 2.26 \approx T_c, h = 0.0$，出现一系列大小不同、嵌套的团簇
- 标度不变性：二级相变的特征



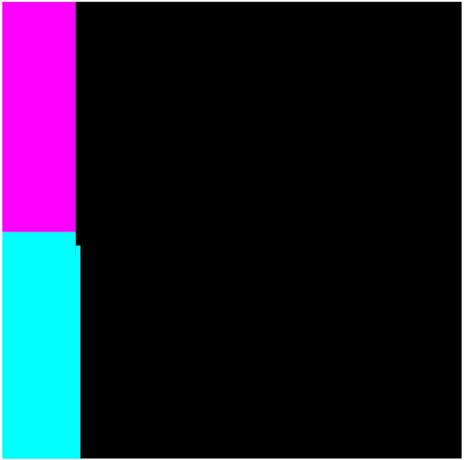
常见的二级相变范式


second order
phase transition
T
ϕ
T
phase 1
T
order
parameter
ϕ
first order
phase transition
no first order
phase transition
T
phase 2
ϕ

演示2：相图

访问ising-phase-diagram-both-sidehtml，观看逐个扫描相图上的点的过程

二维正方晶格伊辛模型的一级相变和二级相变



在这个页面上，你可以扫描

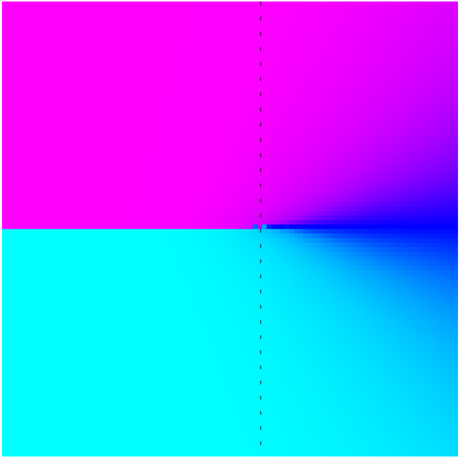
$$H = -J\sum_{\langle i,j\rangle}\sigma_i\sigma_j - h\sum_i \sigma_i$$

关于h（我们固定$J=1$）和系统温度T的相图；T为横坐标，h为纵坐标。伊辛模型的相图和水的液、气相变的相图类似：有两个被一级相变隔开的相，沿着一级相变点有一个二级相变，过了二级相变点之后，两相融合。二级相变点的理论值为：$J=1$时，$T_c=2.2691853142$。扫描完成后，理论T_c会被用虚线标记出来。可以调节系统边长L，观察实际上看到的二级相变点和$L\to\infty$时的理论结果之间的关系。

L 60

开始扫描相图

取$L = 100$得到的相图；虚线为无穷大体系的T_c理论值



- 杨红、青两色代表两个不同指向的相
- 在T_c附近（即居里点）两相区别消失
- 绕过T_c点，可以从一个方向的铁磁序平滑过渡到另一个方向
- 能否更加定量地观察临界点附近的行为？

Finite size scaling and data collapsing

有限大小的系统中可观测量的行为[2]

- 独立参数：体系边长L和归一化温度$t=(T-T_c)/T_c$；等价地说，L和（$L\to\infty$时的）关联长度$\xi\propto|t|^{-\nu}$
- L足够长，系统足够接近临界点：正比于“系统中各个自由度求和”的物理量$Q\sim\int \mathrm{d}^d\boldsymbol{r}\,\phi^n(\nabla\phi)^m$也具有关于$L$的标度不变性：

$$Q(t,L)=L^\sigma f(\xi/L)=L^\sigma f(|t|^{-\nu}/L)=L^\sigma g(\underbrace{tL^{1/\nu}}_{=(\xi/L)^{-1/\nu}:=x}).$$

- $L\to\infty$时$Q\sim|t|^{-\kappa}$，于是只能$g(tL^{1/\nu})\sim(tL^{1/\nu})^{-\kappa}$；由于$Q$此时没有依赖$L$，只能是$\sigma=\kappa/\nu$。于是

$$Q(t,L)=L^{\kappa/\nu}g(tL^{1/\nu}). \tag{5}$$

[2] See arXiv 1101.3281, among others

Finite size scaling and data collapsing

有限大小的系统的伪临界点

- L有限时Q在$t=0$时并不出现真正的不连续性
- 单次蒙卡模拟时固定L扫描t：$Q(t,L)$在

$$t=t_{\mathrm{max}},\quad t_{\mathrm{max}}L^{1/\nu}=x_{\mathrm{max}} \tag{6}$$

  时最大（或者取零，例如Q为磁化强度，不发散时），其中x_{max}让$g(x)$最大。
- L固定，$g(x)$最大则$Q(t,L)$最大，为

$$Q_{\mathrm{max}}(L)\sim L^{\kappa/\nu},\quad t_{\mathrm{max}}L^{1/\nu}\sim 1\Rightarrow t_{\mathrm{max}}\sim L^{-1/\nu}. \tag{7}$$

- 因此可以将固定L时$Q(t=(T-T_{\mathrm{c}})/T_{\mathrm{c}},L)$取最大值的$T$当成“伪临界点”，其上的scaling关系是关于$L$而不是关于$\xi$的。拟合

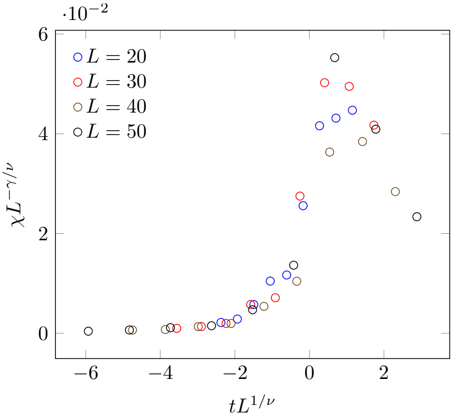
$$T=T_{\mathrm{c}}+\alpha L^{-1/\nu} \tag{8}$$

  可以得到T_{c}和ν两个参数。

Finite size scaling and data collapsing

暂无交互式功能
（见ising-data-collapsing/finite-size-scaling-data-generating.j

- 使用理论数据$T_c = 2.2691853, \gamma = 7/4, \nu = 1$
- 数据点大体上确实在一条曲线上
- 伪临界点附近涨落非常大



下一步做什么？

- 更好的data collapsing（临界点附近要用Wolff update）
- 横场伊辛模型的离散路径积分模拟（=各向异性经典伊辛模型）
- 不同种类的蒙特卡洛模拟（世界线蒙特卡洛模拟的可视化？）