

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

二维正方晶格伊辛模型

伊辛模型

$$H[\sigma] = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H[\sigma]} \quad (1)$$

- 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较晚才得到）——实际上，一开始伊辛模型被认为没有相变
- 需要可视化自旋构型

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 C 出现的概率就是 $p(C)$
 - 细致平衡条件

$$p(C)p(C \rightarrow D) = p(D)p(D \rightarrow C) \quad (2)$$

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

$$p(D \rightarrow C) = e^{-\beta(H[C]-H[D])} \text{ --: accept rate,} \quad (3)$$

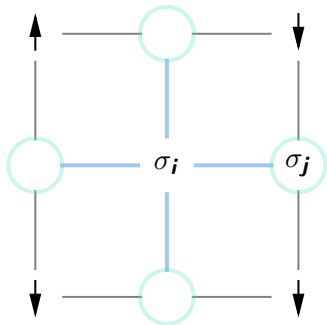
收敛时概率即为平衡态统计的概率。

- 统一处理: 若0到1之间的随机数小于accept rate就翻转

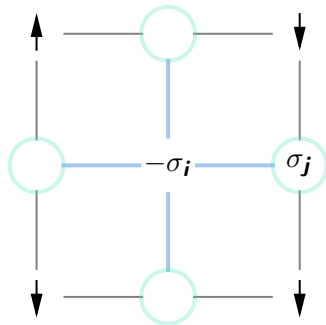
¹Janke, W. 1996. Monte Carlo simulations of spin systems. In Computational Physics. Springer. among others

Metropolis方法更新自旋构型

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



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



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

于是取

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

程序代码示例

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;
    }

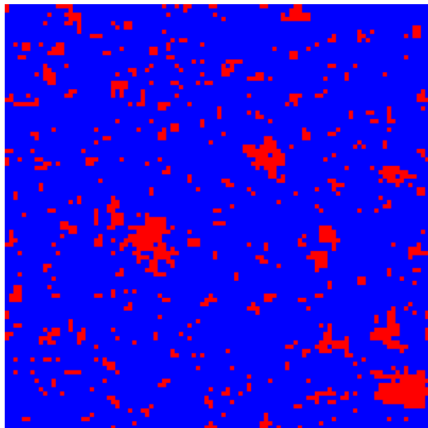
    const delta_F_h = 2 * h * sigma_i;
    const accept_rate = Math.exp(delta_F_J + delta_F_h);

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

演示1: 展示自旋构型

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

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

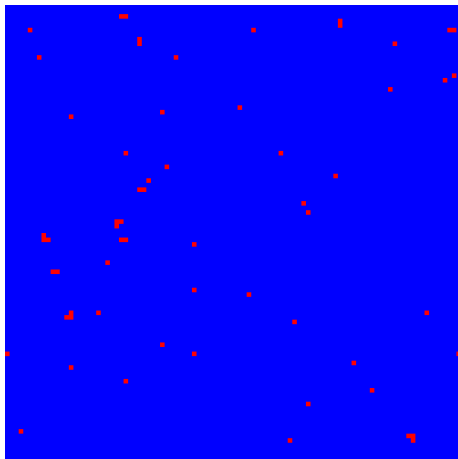
的磁场 h (我们固定 $J = 1$) 和系统温度 T , 以及系统大小 L , 观察自旋构型会发生什么变化。提示: $J = 1$ 时, $T_c = 2.2691853142$ 。观察接近临界点和远离临界点时的系统行为。 注意我们是从所有自旋方向和磁场一致开始模拟的, 在接近临界点时, 更新较慢, 需要一定时间才能够看到达到热平衡时的构型。

h	<input type="text" value="0.0"/>
T	<input type="text" value="2.2"/>
L	<input type="text" value="100"/>
<input type="button" value="开始模拟"/> <input type="button" value="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：

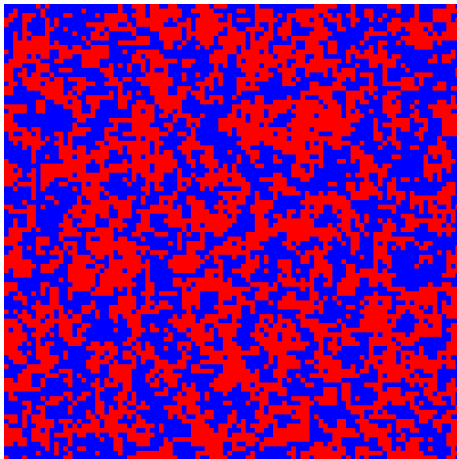
- $T = 1.5$ 是铁磁相，几乎所有自旋均向下，只有零星涨落



演示1：展示自旋构型

$L = 100$ ，观察不同温度下的构型：

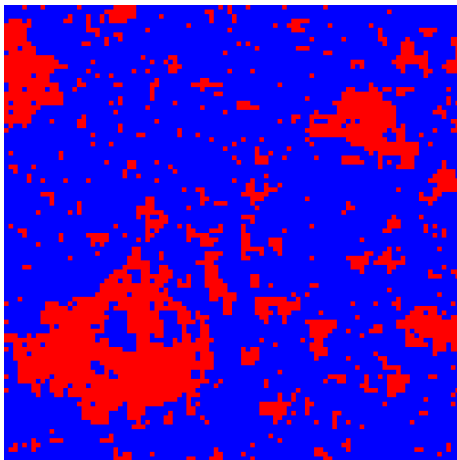
- $T = 3.5$ 是顺磁相，向上和向下的自旋散乱分布（虽然由于铁磁性相互作用，方向相同的自旋还是聚集在一起）



演示1：展示自旋构型

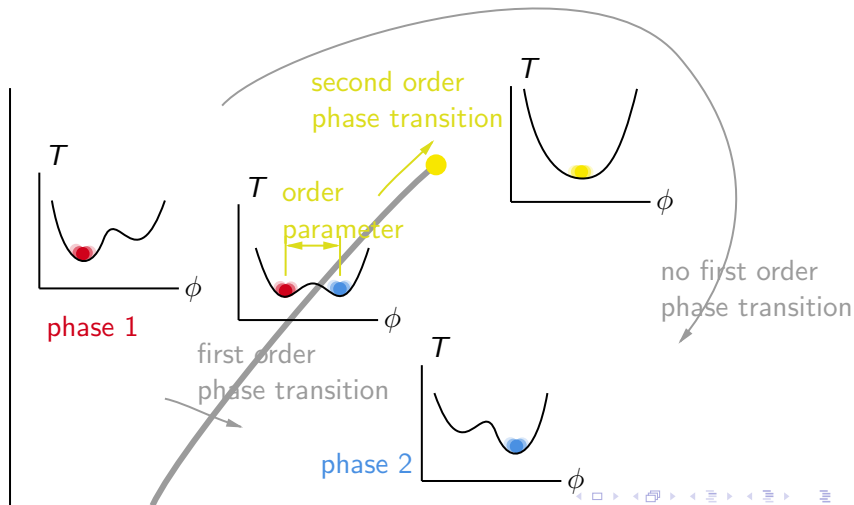
$L = 100$ ，观察不同温度下的构型：

- $T = 2.26 \approx T_c$ ，出现从小到大一系列团簇，大团簇套小团簇
- 标度不变性：FM和PM偶然地也有，AFM就没有；二级相变必有



演示2：相图

常见的二级相变范式



演示2：相图

访问 [ising-phase-diagram-both-side.html](#)，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

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

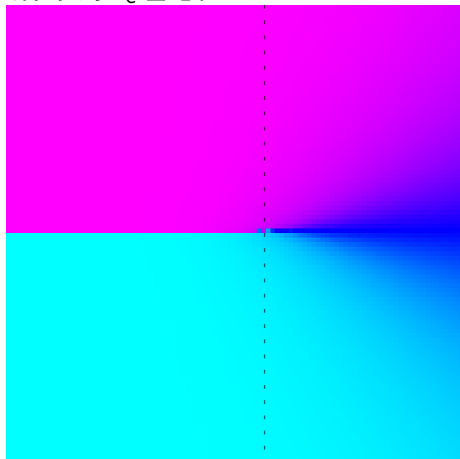
关于 h (我们固定 $J = 1$) 和系统温度 T 的相图; T 为横坐标, h 为纵坐标。伊辛模型的相图 and 水的液、气相变的相图类似: 有两个被一级相变隔开的相, 沿着一级相变点有一个二级相变, 过了二级相变点之后, 两相融合。二级相变点的理论值为: $J = 1$ 时, $T_c = 2.2691853142$ 。扫描完成后, 理论 T_c 会被用虚线标记出来。可以调节系统边长 L , 观察实际上看到的二级相变点和 $L \rightarrow \infty$ 时的理论结果之间的关系。

L

演示2：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？



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（ $L \rightarrow \infty$ 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 $Q \sim \int d^d \mathbf{r} \phi^n (\nabla \phi)^m$ 也具有关于 L 的标度不变性：

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

- $L \rightarrow \infty$ 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

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

²See 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
- 单次蒙特卡洛模拟时固定 L 扫描 t : $Q(t, L)$ 在

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

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

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

- 因此可以将固定 L 时 $Q(t = (T - T_c)/T_c, L)$ 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 ξ 的。拟合

$$T = T_c + \alpha L^{-1/\nu} \quad (8)$$

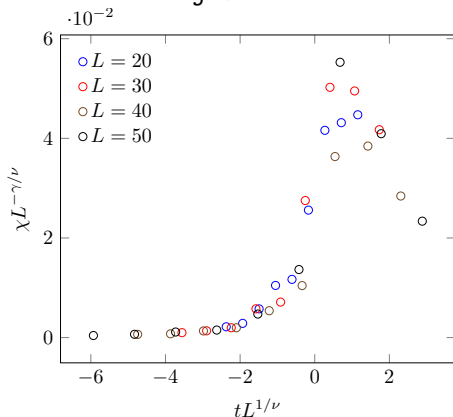
可以得到 T_c 和 ν 两个参数。

Finite size scaling and data collapsing

暂无交互式功能

(见 `ising-data-collapsing/ising-monte-carlo.jl`)

- 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？）