# 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

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

- 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

- 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
  - 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

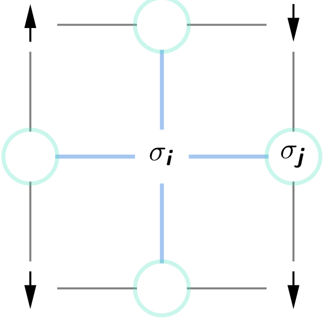
  平衡时$\mathcal{C}$出现的概率就是$p(\mathcal{C})$
- 设$\mathcal{C}$和$\mathcal{D}$只差了一个自旋，$H[\mathcal{C}] > H[\mathcal{D}]$
  - 可以取$p(\mathcal{C} \to \mathcal{D}) = 1$,

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

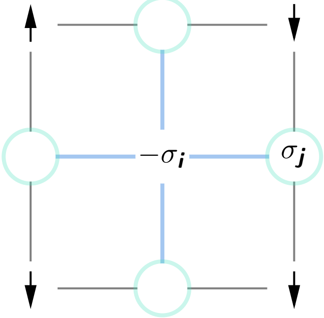
    收敛时概率即为平衡态统计的概率。
  - 统一处理：若0到1之间的随机数小于accept rate就翻转

# Metropolis方法更新自旋构型

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




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




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

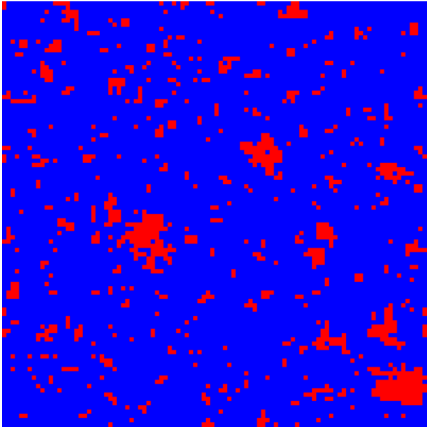
于是取

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

# 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。

$h$ 0.0

$T$ 2.2

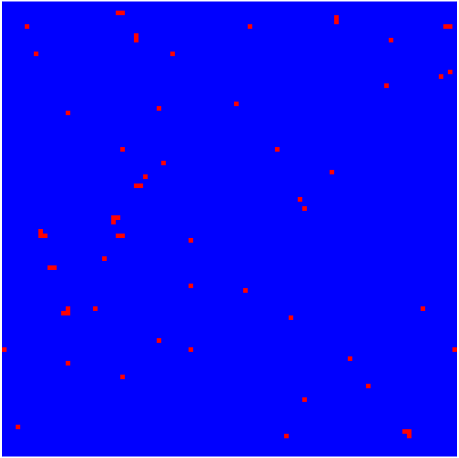
$L$ 100

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：

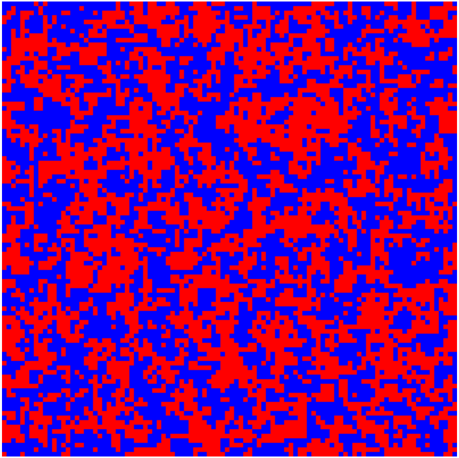
- $T = 1.5$是铁磁相，几乎所有自旋均向下，只有零星涨落



# 演示1：展示自旋构型

$L = 100$，观察不同温度下的构型：

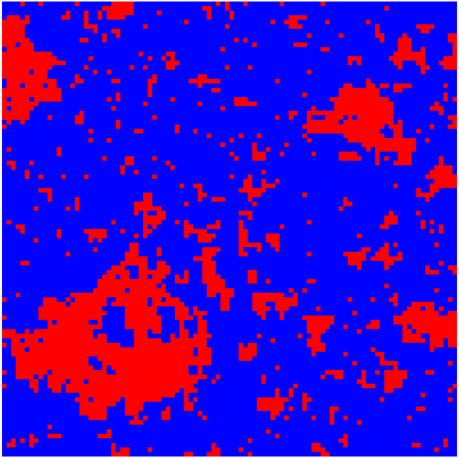
- $T = 3.5$是顺磁相，向上和向下的自旋散乱分布（虽然由于铁磁性相互作用，还是形成一定团簇）



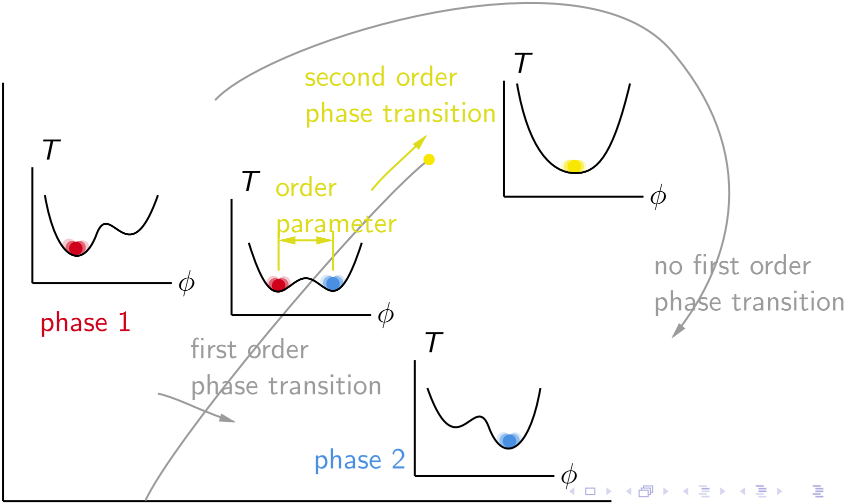
# 演示1：展示自旋构型

$L = 100$，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



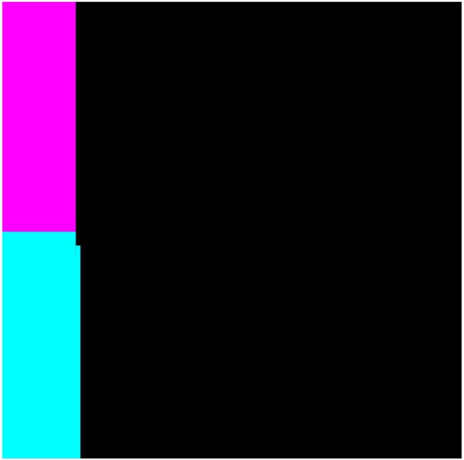
常见的二级相变范式


second order
phase transition
T
order
parameter
T
$\phi$
T
$\phi$
phase 1
$\phi$
no first order
phase transition
first order
phase transition
T
phase 2
$\phi$

# 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

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

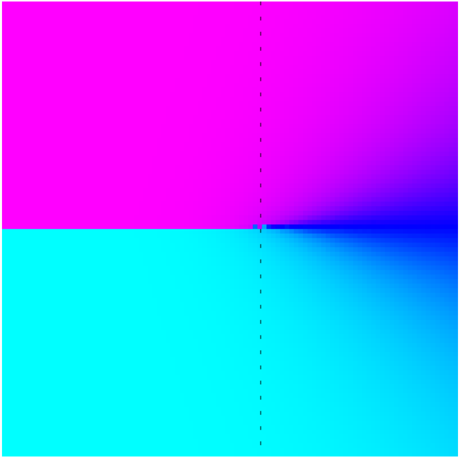
关于$h$（我们固定$J=1$）和系统温度$T$的相图；$T$为横坐标，$h$为纵坐标。伊辛模型的相图和水的液、气相变的相图类似：有两个被一级相变隔开的相，沿着一级相变点有一个二级相变，过了二级相变点之后，两相融合。 二级相变点的理论值为：$J=1$时，$T_c = 2.2691853142$。扫描完成后，理论$T_c$会被用虚线标记出来。 可以调节系统边长$L$，观察实际上看到的二级相变点和$L\to\infty$时的理论结果之间的关系。

$L$ 60

开始扫描相图

# 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

- 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

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

# 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

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

  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

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

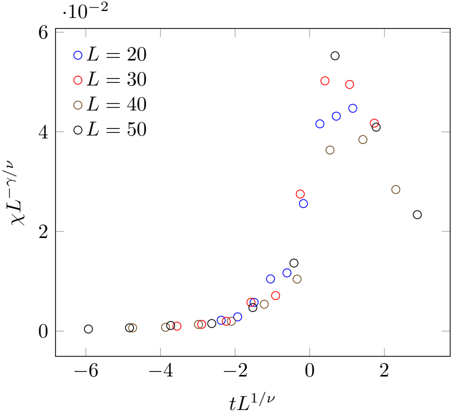
- 因此可以将固定$L$时$Q(t=(T-T_c)/T_c, L)$取最大值的$T$当成“伪临界点”，其上的scaling关系是关于$L$而不是关于$\xi$的。拟合

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

  可以得到$T_c$和$\nu$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`）




- 数据点大体上确实在一条曲线上
- 伪装临界点附近涨落非常大