

# Numerical Math HW12

段浩东 1500017705

## 上机习题7.4

### 题目

考察  $M \times M$  格点二维Ising模型中  $U_m, C_m$  随温度变化的相变现象，并数值确定相变的临界温度  $\beta_c$ 。这里  $J$  取为1, 边界条件取为周期。

### 解答

首先列出定义式：

$$U_M = \frac{1}{M} \sum_{\sigma} \frac{\exp(-\beta H(\sigma))}{Z_M} H(\sigma)$$

$$C_M = \frac{\beta^2}{M} \left\{ \sum_{\sigma} H^2(\sigma) \frac{\exp(-\beta H(\sigma))}{Z_M} - \left[ \sum_{\sigma} H(\sigma) \frac{\exp(-\beta H(\sigma))}{Z_M} \right]^2 \right\}$$

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle p_1 p_2 \rangle} \sigma_{p_1} \sigma_{p_2}$$

$$\beta = (k_B T)^{-1}$$

使用Metropolis算法求解本题：

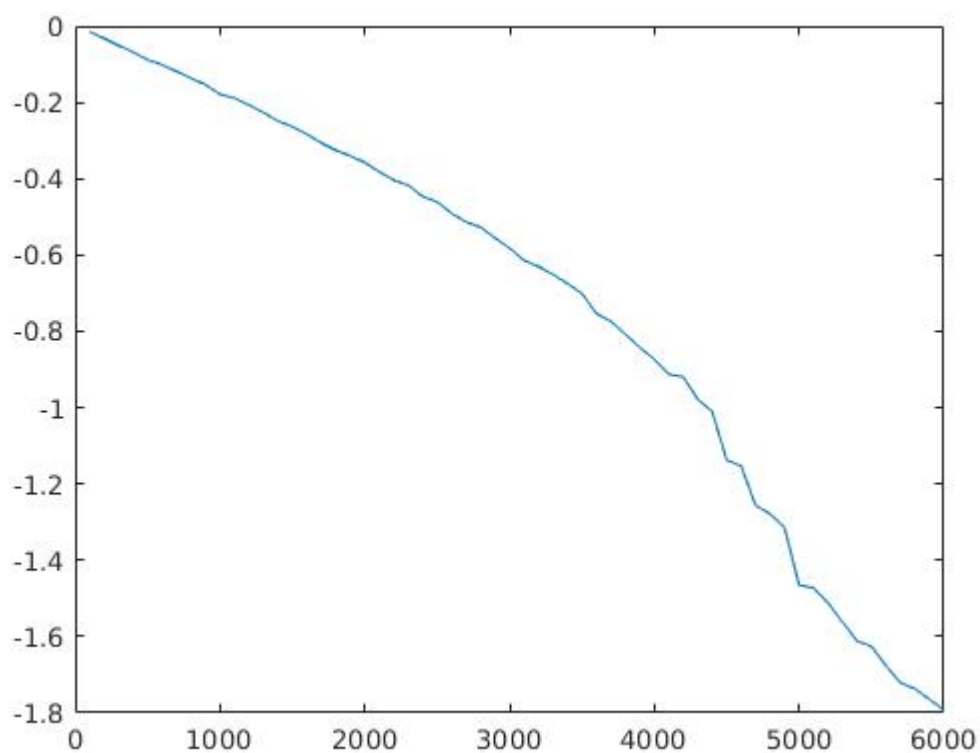
1. 随机生成预选状态  $\sigma^{(1)}$
2. 循环：
  1. 对状态  $\sigma^{(i)}$ ，随机改变其中一个格点，生成预选态  $\sigma'$
  2. 定义  $\Delta H(\sigma) = H(\sigma') - H(\sigma)$ ，令  $A = \min\{1, \exp\{-\beta \Delta H(\sigma)\}\}$
  3. 生成一均匀分布随机数  $r$ ，满足分布  $U[0, 1]$
  4. 若  $r \leq A$ ，则  $\sigma^{(i+1)} = \sigma'$ ，否则  $\sigma^{(i+1)} = \sigma^{(i)}$
3. 对这一  $\sigma$  序列求平均代替  $\sum_{\sigma}$

为节省计算资源，本题在  $10 \times 10$  网格上进行模拟，边界取为周期，每一次的求解使用200000个状态进行平均。

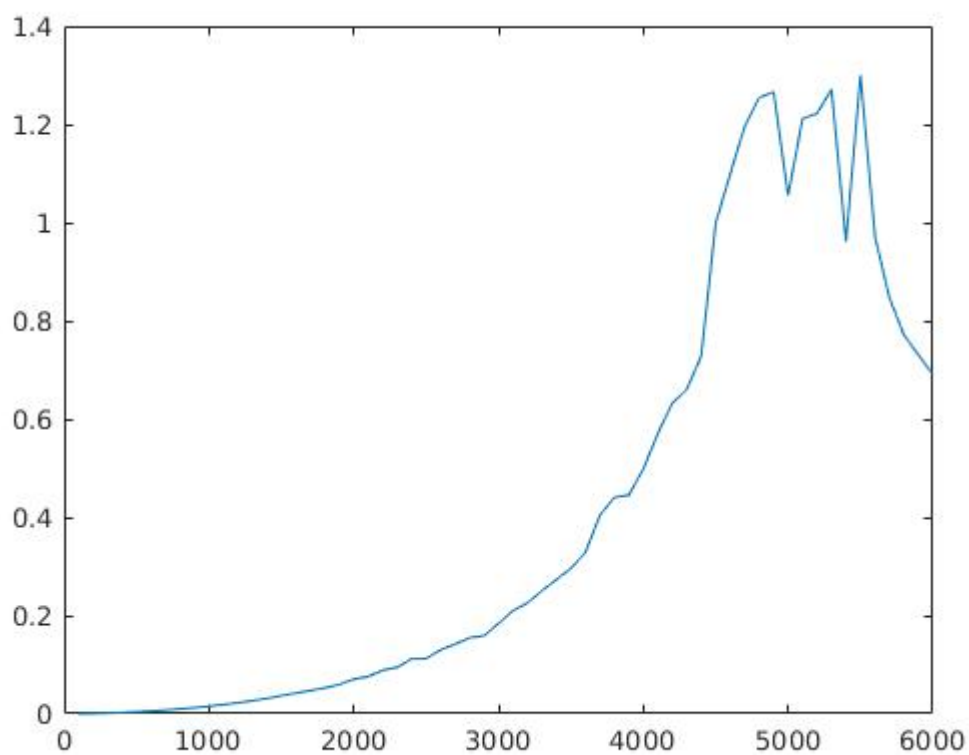
查表知常数： $kT=0.025852\text{eV}$  ( $T=300\text{K}$ 时) (课本对玻尔兹曼常数单位描述不清，应是这一个)

计算所得结果：

$U$ 与 $T$ 的函数：



C与T的函数：



可以看出，U的函数随T逐步下降，表示随着温度的升高，物质的内能逐渐增大，导致内部格点的自旋趋于混乱。因此U减小。而C随T的变化有一个很有趣的现象：在约4500K——5500K处存在一平台期，C值达到最大，在平台期以外，C先增大后减小。

