# 计算物理期末实验报告——Ising 模型算法

王子昂 2013301020062
物理学院 13 级弘毅

Ising 模型描述自旋$s=\pm 1$ 的个格点系统，两个邻近的自旋倾向于平行来处于较低能态。

$$E = -J\sum_{\{i,j\}} s_i\, s_j$$

求和针对所有的临近对，不妨将上式无量纲化并取$J=1$

系统宏观表现出磁性，由所有的微观自旋决定

$$M = \sum_i s_i$$

这里，从遍历所有可能状态中存在的问题开始，我们主要讨论两种算法：其中 Local Metropolis Algorithm (Local Monte-Carlo Algorithm) 直接在空间中用马尔可夫链进行抽样。但是注意到该算法在临界条件下进展缓慢，我们同样使用改进的 Global Cluster Algotithm。

如果可以遍历所有状态，那么，我们可以计算出如比热容，磁化强度等物理量。

配分函数： $Z(\beta) = \sum_i e^{-\beta E_i} = \sum_{E_i} n(E_i) e^{-\beta E_i}$

这里$n(E_i)$指的是能量$E_i$对应的状态数（态密度）。

平均能量，能量平方的平均都可以通过配分函数得出

$$\langle E\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log(Z) = \frac{1}{Z}\sum_{E_i} E_i\; n(E_i)\; e^{-\beta E_i}$$

$$\langle E^2\rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log(Z) = \frac{1}{Z}\sum_{E_i} E_i^{\,2}\; n(E_i)\; e^{-\beta E_i}$$

比热容也可以得出：

$$C_V = \frac{\partial}{\partial T}\langle E\rangle = -\beta^2\frac{\partial}{\partial\beta}\langle E\rangle = \frac{\beta^2}{N}(\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2)$$

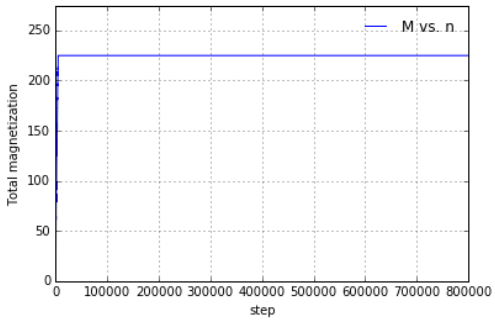
像这样遍历所有的状态对于较大的模拟尺度大小 n 来说太慢了，算法的时间复杂度是超指数级的$T(n)=O(2^{n^2})$，所以，希望通过简单的穷举统计较大系统的性质不切实际，而抽样的方法则更可行。所以，采用 Monte-Carlo 算法抽样。

具体来说，使用 Local Metropolis Algorithm，通过构造满足精细平衡条件的马尔可夫链在全空间抽样，并统计出以上性质。

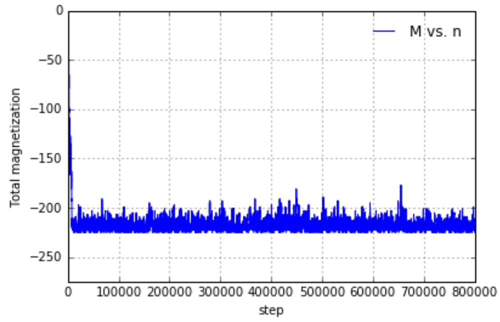
在 Local Metropolis Algorithm 中，我们随机选取一个座点，并尝试翻转它的自旋，使得系统的状态从 a 变到 b。为了让状态之间的转换满足精细平衡条件

$$p = \min\left(1, e^{-\beta(E_b - E_a)}\right)$$

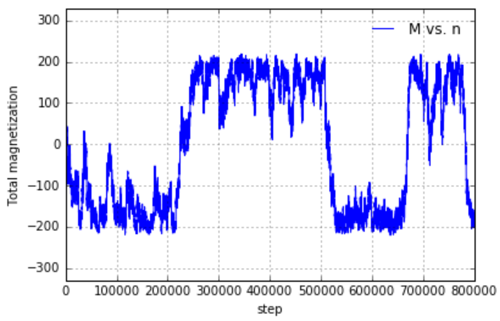
转换只能有概率 p 被接受。



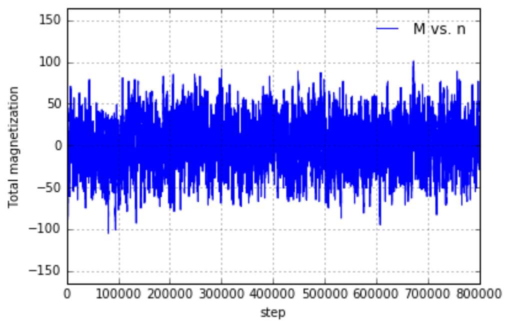

T = 0.2




T = 1.7




T = 2.3




T = 5.0

当设温度取不同的值（无量纲化的温度）时，某条马尔可夫抽样链中状态对应的总磁化强度轨迹如上图所示；模拟尺度 $L = 15$ ，即为 $15 \times 15$ 二维点阵。可以看出，随着温度的升高，系统从有序的，所有自旋几乎全部同向的状态逐渐过渡到无序的，宏观几乎不表现磁性的状态。

上面的 Local Metropolis Algorithm 存在一个主要的问题在于，当温度接近临界温度 Tc 时，算法收敛的比较缓慢。为了更快速的抽样，我们希望一次恰当地修改多个自旋。可是，如果只是简单地试图一次翻转多个自旋并不能达到目的，因为这样做同样增加了拒绝的概率。

Global Cluster Algotithm 一次翻转附近具有相同取向的大量自旋，使得临界温度附近可以快速收敛，通过恰当地选取概率，依然可以满足精细平衡。

Global Cluster Algotithm 从随机的一个自旋开始，通过以概率 $p$ 逐渐增加相同取向的自旋选择出一个 cluster，而且，新加入的成员是活跃的，他们同样有

概率 $p$ 使得集合之外的同取向成员加入 cluster. 当 cluster 构造完毕后，所有 cluster 内部的成员全部翻转。这使得系统从 a 状态变到 b 状态。我们的目的是恰当的选择 $p$，使得状态之间的转换依然满足精细平衡条件。

记系统在状态 $a$ 的概率 $p(a)$，在状态 $b$ 的概率 $p(b)$；从状态 $a$ 到 $b$ 的接受概率 $P(a \to b)$，从状态 $b$ 到 $a$ 的接受概率 $P(b \to a)$ ；

由精细平衡条件：$p(a)\, P(a \to b) = p(b)\, P(b \to a)$

注意到 $P(a \to b)$ 等价于首先构造出这样一个 cluster，然后接受这个构造的概率：

$$p(a)\ p_{con}(a \to b) p_{ac}(a \to b) = p(b)\ p_{con}(b \to a) p_{ac}(b \to a)$$

当 cluster 内所有自旋反向时，影响能量的实际上是边界项。具体来说，是边界上自旋同向的个数 $n_1$ 和边界上自旋反向的个数 $n_2$ 的差值。所以状态 a 的边界能量正比于 $n_1 - n_2$ ，翻转后得正比于 $n_2 - n_1$。

另外，注意到新自旋的加入是概率独立的，$p_{ac}(a \to b) \propto (1-p)^n$，我们有

$$e^{-\beta(n_1 - n_2)}(1-p)^{n_2}\, p_{ac}(a \to b) = e^{-\beta(n_2 - n_1)}(1-p)^{n_1}\, p_{ac}(b \to a)$$

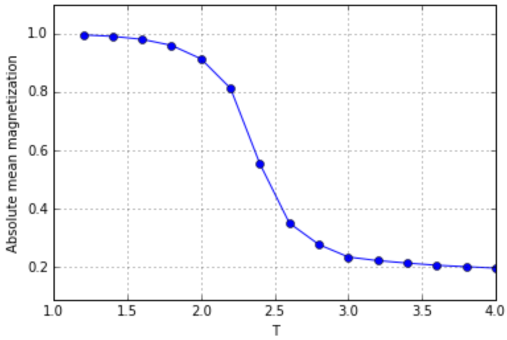
接受概率

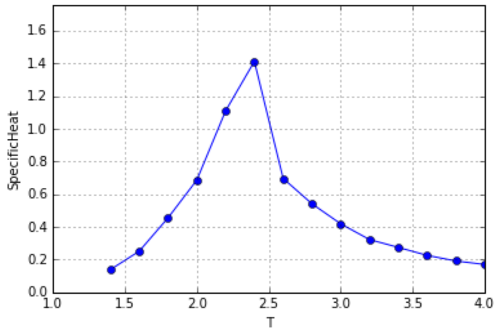
$$p_{ac}(a \to b) = \min\left(1, \frac{e^{-\beta(n_2 - n_1)}(1-p)^{n_1}}{e^{-\beta(n_1 - n_2)}(1-p)^{n_2}}\right) = \min\left(1, \left(\frac{e^{-2\beta}}{1-p}\right)^{n_2} \left(\frac{1-p}{e^{-2\beta}}\right)^{n_1}\right)$$

只需取 $p = 1 - e^{-2\beta}$ 即可在满足精细平衡条件的同时，让接受概率为 1。

算法以此概率不断地通过加入邻近相同自旋构造 cluster 并直接翻转，而不需要考虑接受概率，不断构造，即可快速穿过临界情况，始终在状态空间中快速移动。

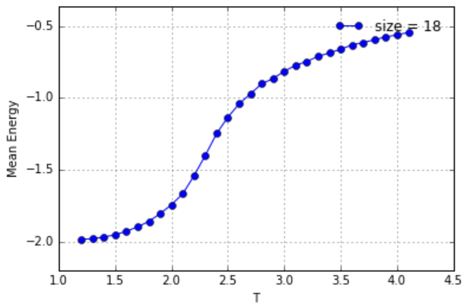
分别统计在不同温度下生成的马尔可夫抽样链，得到磁性及热学性质：（模拟尺度 $\mathrm{L} = 15$ ，即为 $15 \times 15$ 二维点阵）

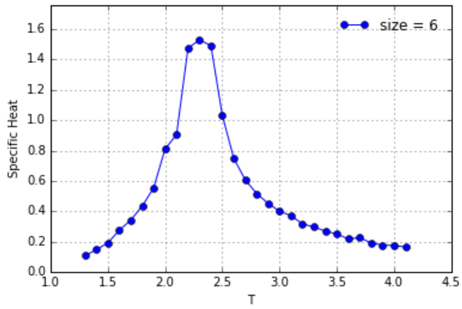


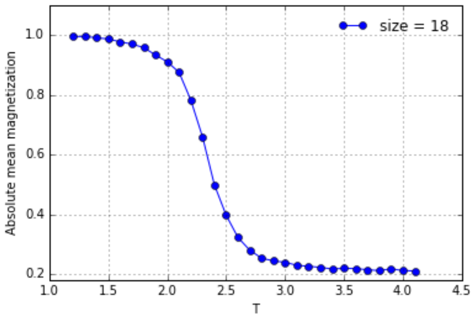

(a) Absolute mean magnetization (b) Specific Heat

分别统计在不同温度下生成的马尔可夫抽样链，得到磁性及热学性质：（模拟尺度 L = 18）



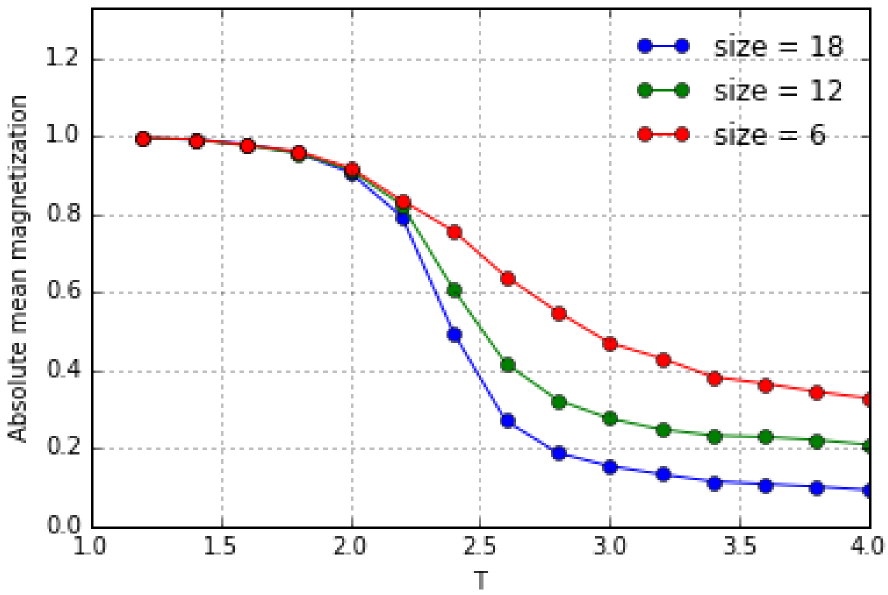

(a) Absolute mean magnetization (b) Specific Heat



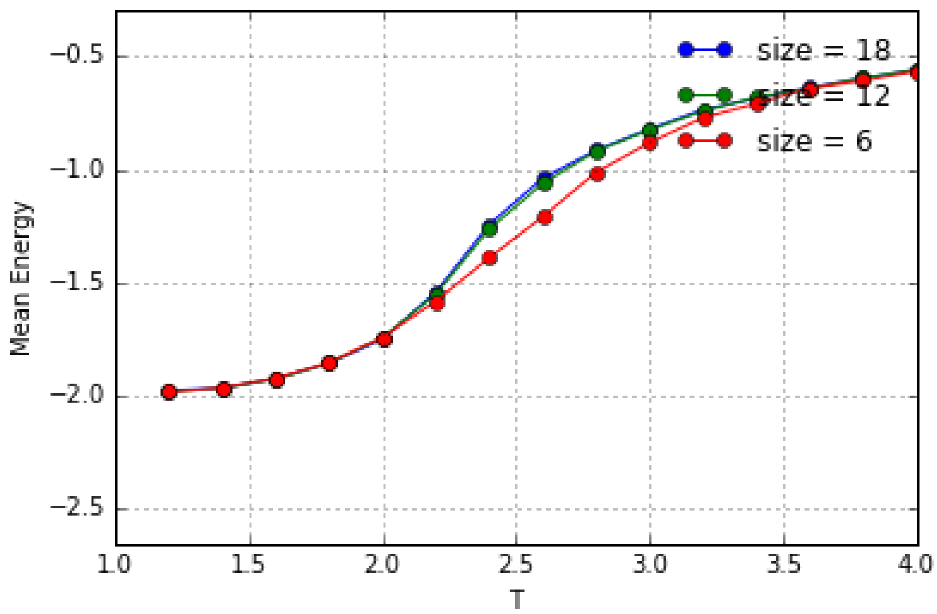

(c) Mean Energy per spin

对不同的模拟尺度，的到的平均磁化强度的绝对值随温度的变化，看以看出随着体系尺度的增大，相变逐渐变得明显。相变点与理论分析值接近

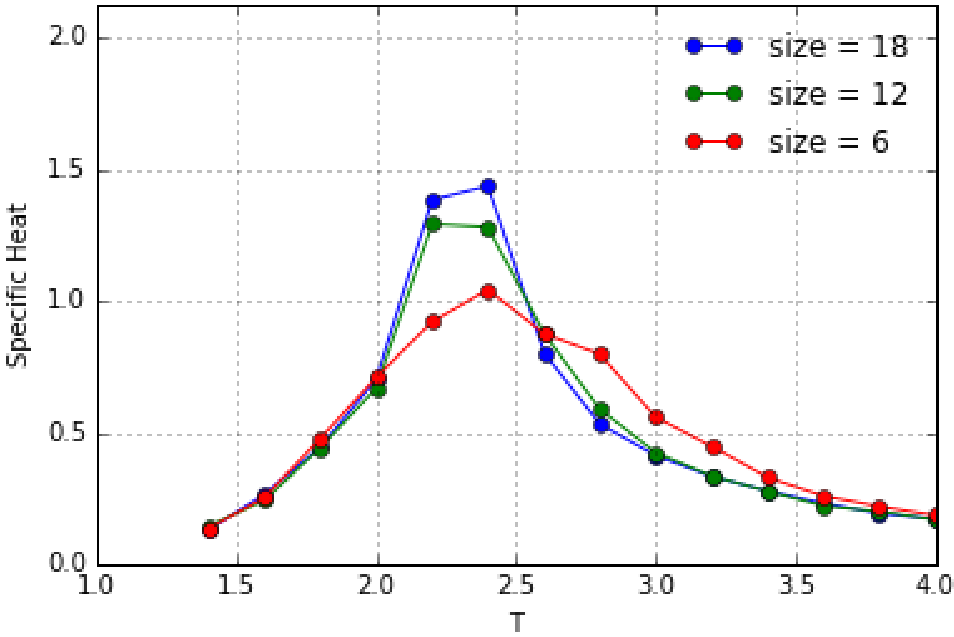
$$T_C = \frac{2}{\log(1+\sqrt{2})} \simeq 2.27$$




Absolute mean magnetization




Mean Energy per spin




Specific Heat

通过这两种算法的逐步改进，我们可以比较有效地分析该系统包括磁化强度，比热等等在内的统计性质。这两种抽样方法不仅可以用在 Ising 模型的系统中，在其他状态空间广阔的统计系统中也是非常有效的。