

统计物理与复杂系统暑期学校2015

郭文安

北京师范大学物理系

2015 年兰州大学

参考文献:

- H.W.J. Blöte, Lecture notes: Nonlocal Monte carlo Methods
- A. Sandvik, Computational Studies of Quantum Spin Systems, AIP Conf. Proc. 1297, 135 (2010);

提纲

多体系统与统计物理基础知识

1. 相互作用多体系统
2. 相变与临界现象的初步
3. Ising 模型描述相变

Ising Model 的Monte Carlo 模拟

1. 简单抽样
2. 重要性抽样
3. 模拟结果与分析

Quantum Monte Carlo simulations

1. Path integral representation
2. SSE QMC method

提纲

多体系统与统计物理基础知识

1. 相互作用多体系统
2. 相变与临界现象的初步
3. Ising 模型描述相变

Ising Model 的Monte Carlo 模拟

1. 简单抽样
2. 重要性抽样
3. 模拟结果与分析

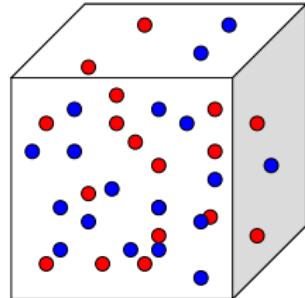
Quantum Monte Carlo simulations

1. Path integral representation
2. SSE QMC method

多粒子系统

▶ 微观状态

- 经典系统，可认为任意力学量与 H 对易，每个微观状态 Γ 有确定能量 $E(\Gamma) = H(\Gamma)$
- 平衡态配分函数(**partition function**)



$$Z = \sum_{\Gamma} e^{-E(\Gamma)/k_B T} = \sum_{\Gamma} W(\Gamma)$$

每个微观状态出现的几率由该状态的能量决定，

$$p_{\text{eq}}(\Gamma) = W(\Gamma)/Z$$

物理量的统计期望值

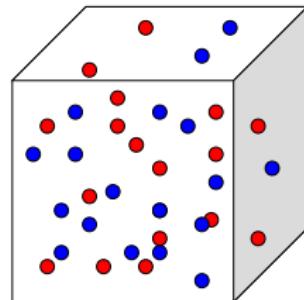
$$\langle A \rangle = \sum_{\Gamma} A(\Gamma) \frac{W(\Gamma)}{Z}$$



多粒子系统

▶ 微观状态

- 量子系统，哈密顿量的本征态不容易知道
- 平衡态配分函数



$|\alpha\rangle$ 是任意正交完备基矢
物理量的统计期望值



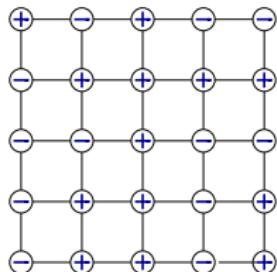
$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}\{A e^{-\beta H}\}$$

通常动能部分容易直接积分处理，关键是势能部分

多数统计物理问题关心与速度无关的物理量

Ising model (经典)

描写单轴铁磁体（可以在任意晶格上，以二维正方晶格为例）



$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_k s_k; \quad s_k = \pm 1$$

微观状态 $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_N)$.

总磁矩 $M(\Gamma) = \sum_k s_k$

- $J > 0$, 铁磁(ferromagnetic)
- $J < 0$, 反铁磁(antiferromagnetic), 本课程不考虑

当系统处于热平衡

$$\langle M \rangle = \sum_{\Gamma} M(\Gamma) p_{eq}(\Gamma)$$

- ▶ 磁性和相变理论中非常重要
- ▶ 也是其它统计物理问题的有效模型：格气(lattice gas)，合金，原子在表面的吸附问题等

相变与临界现象的初步

- 相 (Phase) :

热力学系统（或它的一部分）如果具有均匀的物理性质，称为处于某相。比如水可以处于固相，液相，气相。

- 相变(Phase Transition):

从一种相转变成另一种相。比如冰融化就是水的固液相变。

- 丰富多彩的相变与临界现象

- ▶ 气液固三态之间的转变

- ▶ 铁磁, 顺磁, 反铁磁之间的转变

- ▶ 超导体与正常导体的转变

- ▶ 超流与正常流体的转变

- ▶ 几何相变: 渗流

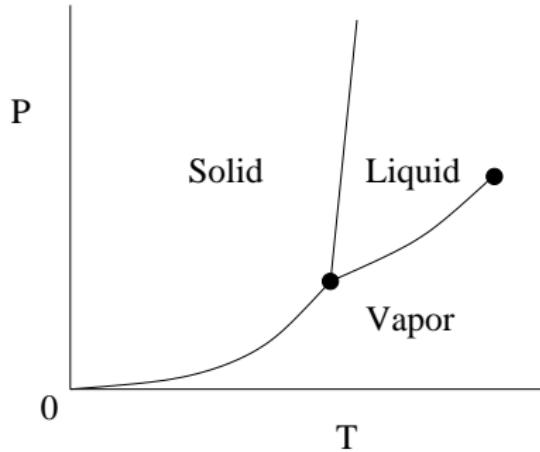
- ▶ 量子相变:

- ▶ 各类复杂系统

相变与临界现象总伴随着热力学量的奇异性：不连续或发散！

现代物理学把相变分成两类

一级相变(**First Order Phase Transition**): 自由能的一级导数
不连续, 两相(或多相)共存。

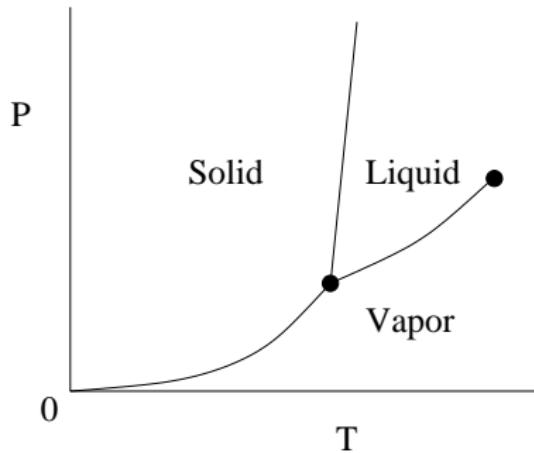


现代物理学把相变分成两类

连续相变(**continuous phase transition**), 或二级相变(**Second order phase transition**):

两相(或两相以上的相)区别消失成为新的相。

比热, 压缩率, 磁化率等自由能二级导数发散。



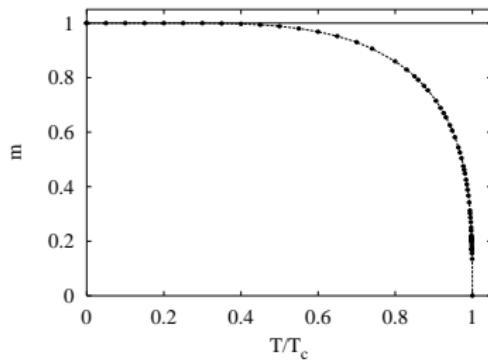
二级相变点称为临界点(**Critical Point**). 在这点附近系统表现出非常特殊的性质称为临界现象(**Critical Phenomena**)

临界现象更有趣！

热力学量的发散可以用**临界指数(critical exponent)**来描述。
单轴各向异性铁磁体, Ising 模型

► 磁化强度(magnetization)

3D Ising model MC 模拟结果(J.Phys.A 29,5727(1996))



$$m \propto t^\beta,$$

- 定义约化温度 $t = (T_c - T)/T_c$, T_c : 居里点, 临界点
- $2D : \beta = 1/8$; $3D : \beta = 1/3$: 临界指数

► 磁化率(**susceptibility**)与状态方程(**state equation**)

- 靠近 T_c ,

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial B} \propto t^{-\gamma},$$

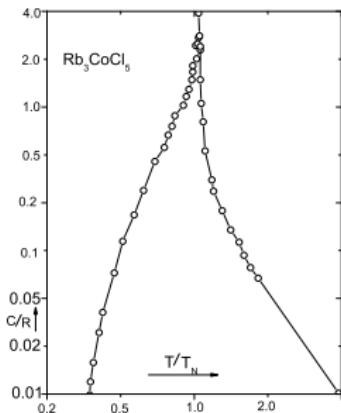
$$2D : \gamma = 7/4; 3D : 4/3$$

- 在 T_c ,

$$B \propto m^\delta,$$

$$2D : \delta = 15; 3D : 5$$

► 比热(specific heat)



- 图中圆圈表示实验数据，曲线是3D Ising model 理论结果

$$c \propto |t|^\alpha, \quad \alpha \approx 0.1096 \pm 0.0005$$

- 2D特殊, 对数发散

$$c \propto -\ln(t). \quad \alpha = 0$$

上面的现象在所有临界点都类似，但临界指数可以不同。然而
很多完全不一样的相变，却有完全相同的临界指数—**普适类**

Ising model 描述相变

$$Z = \sum_{\Gamma} e^{-\beta H} = \sum_E \Omega(E) e^{-\beta E} = \sum_E e^{-\beta(E - TS(E))},$$

能量 E 上自由能

$$F(E) \equiv E - TS(E)$$

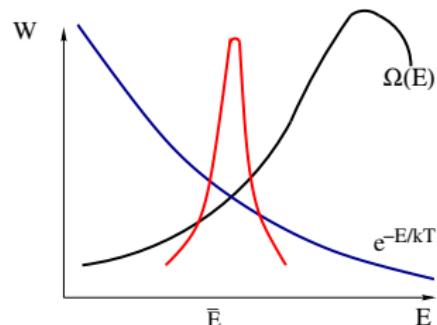
权重 $e^{-\beta(E - TS(E))}$ 的峰值就是 $F(E)$ 的极小值

$$\frac{\partial F(E)}{\partial E} = 0 \rightarrow \frac{\partial S(E)}{\partial E} = \frac{1}{T}$$

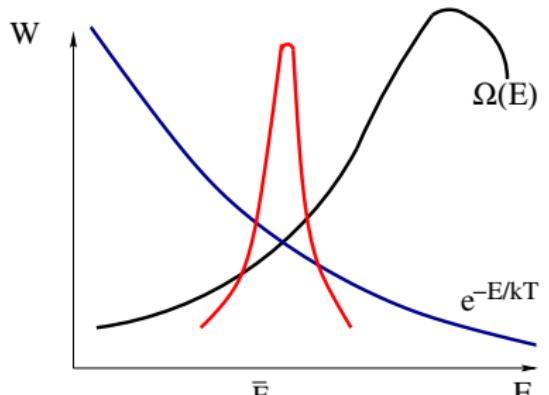
对应的能量称 \bar{E} : 最可几能量, 近似为内能 U

自由能密度

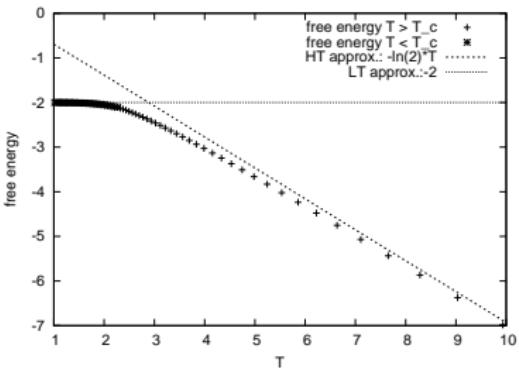
$$f = -\frac{k_B T}{N} \ln Z \approx \frac{\bar{E}}{N} - k_B T \frac{\ln \Omega(\bar{E})}{N}$$



$e^{-\beta F(E)}$ 宽度为 $\sqrt{k_B T^2 N c}$, 在非相变区域近似为高斯分布, 相对与 $\bar{E} \propto N$, 非常尖锐, 因此 $F \approx F(\bar{E})$



自由能密度



$$f = -\frac{k_B T}{N} \ln Z \approx \frac{\bar{E}}{N} - k_B T \frac{\ln \Omega(\bar{E})}{N}$$

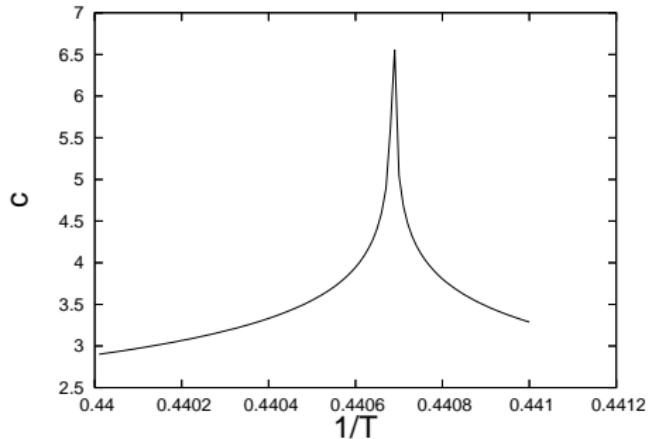
能量与熵的竞争:

- ▶ 高温无序: $\bar{E} \rightarrow \Omega(E)$ 取极大值的能量, 熵极大
- ▶ 低温有序: $\bar{E} \rightarrow E$ 最低

Onsager 的里程碑

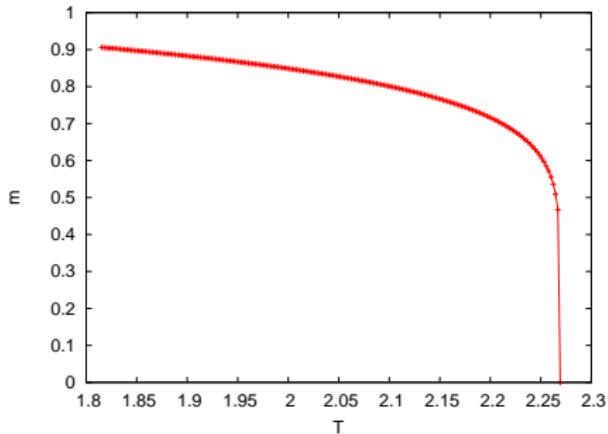
看似简单的Ising模型，在二维以上求解异常困难。

对二维Ising模型的求解是统计物理理解相变问题的里程碑！



$$c \propto k_B \ln |(T - T_c)/T_c|$$

杨振宁的磁化强度



$$m = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4 2/T}\right)^{1/8} \propto \left(\frac{|(T - T_c)|}{T_c}\right)^{1/8}, \quad T < T_c$$

序参量

- 如果外场为零，严格按配分函数计算 m , 对称性要求 m 永远为零，因为

$$m = \frac{1}{N} \sum_{\Gamma} M(\Gamma) p(\Gamma)$$

对任意一个 $\Gamma = (s_1, \dots, s_N)$,
都有唯一一个 $\Gamma' = (-s_1, \dots, -s_N)$,
满足 $M(\Gamma) = -M(\Gamma')$, $p(\Gamma) = p(\Gamma')$.
这称为翻转对称性(Z_2).

- 在热力学极限下
 - 相变破坏了这种对称性，这称为对称性的自发破缺(spontaneous symmetry breaking)。
 - 这种破缺用 m 来度量，称为序参量(order parameter)。

关联函数

- $T \rightarrow 0$

$$\langle s(r)s(0) \rangle \approx \langle s(r) \rangle^2 \approx 1^2$$

- $T \gg T_c$ 热涨落

$$\langle s(r)s(0) \rangle \propto e^{-r/\xi}, \quad \langle s(r) \rangle = 0$$

定义涨落关联函数 $G(r) \equiv \langle s(r)s(0) \rangle - \langle s \rangle^2$

- T_c 附近($T > T_c$, 或 $T < T_c$)

$$G(r) \propto \frac{e^{-r/\xi}}{r^{d-2+\eta}}$$

- $T \rightarrow T_c, \xi \propto t^{-\nu} \rightarrow \infty$

ν, η 是两个新的临界指数

磁化率和序参量的涨落关联

$$\chi \propto \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \propto \int G(r) dr \propto \xi^{2-\eta} \propto |t|^{-\nu(2-\eta)}$$

$G(r)$ 的代数衰减, 或者说, ξ 的发散, 导致 χ 在 T_c 发散!

提纲

多体系统与统计物理基础知识

1. 相互作用多体系统
2. 相变与临界现象的初步
3. Ising 模型描述相变

Ising Model 的Monte Carlo 模拟

1. 简单抽样
2. 重要性抽样
3. 模拟结果与分析

Quantum Monte Carlo simulations

1. Path integral representation
2. SSE QMC method

为什么要利用蒙特卡洛方法?

Monte Carlo simulation: 直接求和或积分不可能或不容易时的办法

以Ising model 为例, 考虑任意物理量 A , 计算它的统计平均

$$\langle A \rangle = \sum_{\Gamma} A(\Gamma) p(\Gamma)$$

直接求和不现实: 2^N 个微观状态 (位形)

1. 简单抽样(simple sampling)

简单想法：任意从 2^N 个位形中等概率任意选 M 个位形来近似

$$\langle A \rangle \approx A_M = \sum_l^M A(\Gamma_l) \frac{e^{-E(\Gamma_l)/k_B T}}{\sum_l e^{-E(\Gamma_l)/k_B T}}$$

称为简单抽样。但是

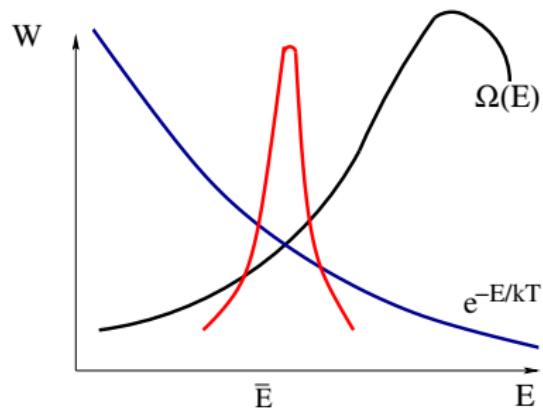
一般情况下，如果系统够大，温度不是非常高，这种抽样过程效率非常低

- 以计算内能为例

$$U \equiv \langle H \rangle = \sum_{\Gamma} H(\Gamma) p(\Gamma) = \sum_E E \frac{\Omega(E) e^{-E/k_B T}}{Z} = \sum_E E \frac{W(E)}{Z}$$

$$Z = \sum_E \Omega(E) e^{-E/k_B T} = \sum_E W(E),$$

$\Omega(E)$ 为能量为 E 的态的数目, $W(E) = \Omega(E) e^{-E/k_B T}$ 是权重, $p(E) = W(E)/Z$ 是系统能量为 E 的概率



- $W(E)$ 在 \bar{E} 处形成非常尖锐的峰值
- 任意选取的 Γ 形成 Ω 曲线, 峰随系统的增大也变得尖锐, 但峰值不在 \bar{E} , 因此对内能贡献不大.
- 除非抽取非常大量 ($\approx 2^N$) 的样本, 否则误差巨大
- 极端情况: $T \rightarrow 0$. 只有两个位形对内能有贡献, 但是产生出这两个位形的几率是 $2/2^N$

2. 重要性抽样(Importance sampling)

[Metropolis, Rusenbluth, Rosenbluth, Teller, and Teller, Phys.Rev.1953]

- 构造一个随机过程，得到一系列微观状态 $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_M$.

Γ_{t+1} 由 Γ_t 按照一定的跃迁几率(transition prob.) $T(\Gamma_{t+1}, \Gamma_t)$ 得到

当 $M \rightarrow \infty$, 任一给定位形 Γ 出现的频率 $\frac{N(\Gamma)}{M} = \frac{e^{-E(\Gamma)/k_B T}}{Z}$.

- 实现按位形的正则分布概率来抽取位形，而不是在相空间等概率地抽取位形

$$\langle A \rangle \approx A_M = \sum_{\Gamma} \frac{N(\Gamma)}{M} A(\Gamma) = \frac{1}{M} \sum_l^M A(\Gamma_l)$$

怎样实现这样的序列?

要实现这种序列，关键是选取 $T(\Gamma', \Gamma)$: 更新 Γ 得到 Γ' 的几率

- 满足归一化条件 $\sum_{\Gamma'} T(\Gamma', \Gamma) = 1$

定义 $P_t(\Gamma)$ 为第 t 个微观状态为 Γ 的几率，我们有

$$P_{t+1}(\Gamma') = \sum_{\Gamma} T(\Gamma', \Gamma) P_t(\Gamma)$$

此为主方程。这样的过程称为**Markov过程**.

写成矢量形式

$$\vec{P}_t = \mathbf{T} \cdot \vec{P}_{t-1} = \mathbf{T}^t \cdot \vec{P}_0$$

可以预期

$$t \rightarrow \infty, \quad P_t(\Gamma) \rightarrow P_{eq}(\Gamma)$$

我们的目标

$$P_{eq}(\Gamma) = \frac{e^{-E(\Gamma)/k_B T}}{Z}, \quad \text{对于任意初始几率分布 } P_0(\Gamma)$$

意味着 \vec{P}_{eq} 是 \mathbf{T} 的本征矢:

$$\vec{P}_{eq} = \mathbf{T} \cdot \vec{P}_{eq}$$

可以证明满足两个条件即可实现

- ▶ 各态历经(ergodic): 任意一个微观状态可以通过一系列的跃迁来达到(矩阵不可约)
- ▶ 细致平衡(detailed balancing)

$$T(\Gamma', \Gamma)P_{eq}(\Gamma) = T(\Gamma, \Gamma')P_{eq}(\Gamma')$$

即从 Γ 流到 Γ' 的几率等于反过来从 Γ' 流到 Γ 的

- 由于**T非负, 不可约**, 其最大本征值 $|\lambda_1|$ 的右本征矢所有元素为正, 其余本征矢元素有正负(正交性)
- 利用细致平衡和归一性, \vec{P}_{eq} 就是最大本征矢, 本征值为1:

$$\sum_{\Gamma'} T(\Gamma', \Gamma) P_{eq}(\Gamma) = \sum_{\Gamma'} T(\Gamma, \Gamma') P_{eq}(\Gamma')$$

- 由于 \mathbf{T} 非负，不可约，其最大本征值 $|\lambda_1|$ 的右本征矢所有元素为正，其余本征矢元素有正负(正交性)
- 利用细致平衡和归一性， \vec{P}_{eq} 就是最大本征矢，本征值为1：

$$\sum_{\Gamma'} T(\Gamma', \Gamma) P_{eq}(\Gamma) = \sum_{\Gamma'} T(\Gamma, \Gamma') P_{eq}(\Gamma')$$

$$P_{eq}(\Gamma) = \sum_{\Gamma'} T(\Gamma, \Gamma') P_{eq}(\Gamma')$$

需要多长时间实现正则分布?

对本征值排序 $\lambda_1 = 1 > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \dots$

记 λ_i 对应本征矢为 \vec{R}_i ; 展开 \vec{P}_0

$$\vec{P}_0 = \sum_i c_i \vec{R}_i$$

t 步之后

$$\vec{P}_t = \sum_i c_i \mathbf{T}^t \cdot \vec{R}_i = \sum_i c_i \lambda_i^t \vec{R}_i = c_1 \vec{R}_1 + \sum_{i=2} c_i \lambda_i^t \vec{R}_i$$

$$= c_1 \vec{R}_1 + c_2 e^{-t/\tau_2} \vec{R}_2 + \dots$$

- $1/\tau_2 = -\ln \lambda_2$: 平衡关联时间 (**equilibrium correlation time**)

$$\vec{P}_t \rightarrow \vec{P}_{eq}, \text{ 当 } t \gg \tau_2!$$

实现细致平衡

我们的目标是实现

$$P_{eq}(\Gamma) = \frac{e^{-E(\Gamma)/T}}{Z} = \frac{W(\Gamma)}{Z}$$

根据细致平衡

$$T(\Gamma', \Gamma)W(\Gamma) = T(\Gamma, \Gamma')W(\Gamma')$$

跃迁几率可以写成

$$T(\Gamma', \Gamma) = P_{\text{attempt}}(\Gamma', \Gamma)P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma)$$

- $P_{\text{attempt}}(\Gamma', \Gamma)$: 从各种可能的新位形里选择 Γ' 的几率
- $P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma)$: 接受新位形 Γ' 的几率

实现细致平衡：两种常见选择

保证细致平衡的两种常见方式

Metropolis:

$$P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \min\left[\frac{P_{\text{attempt}}(\Gamma, \Gamma')W(\Gamma')}{P_{\text{attempt}}(\Gamma', \Gamma)W(\Gamma)}, 1\right]$$

Heat bath:

$$P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \frac{P_{\text{attempt}}(\Gamma, \Gamma')W(\Gamma')}{P_{\text{attempt}}(\Gamma, \Gamma')W(\Gamma') + P_{\text{attempt}}(\Gamma', \Gamma)W(\Gamma)}$$

实现细致平衡：两种常见选择

保证细致平衡的两种常见方式

- local update Algorithm (局域更新算法):

从 N 个自旋中挑选一个自旋尝试翻转:

$$P_{\text{attempt}}(\Gamma', \Gamma) = P_{\text{attempt}}(\Gamma, \Gamma') = 1/N, \text{ 此时上式化简为}$$

- Metropolis:

$$P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \min\left[\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)}, 1\right]$$

- Heat bath:

$$P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma') + W(\Gamma)}$$

这就是通常所谓单自旋蒙特卡罗模拟算法

超越细致平衡

- 要实现重要性抽样，细致平衡是充分的，但并不是必要的

参考文献：

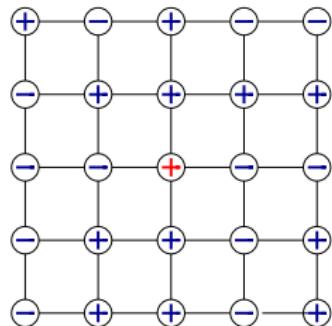
H. Suwa, and S. Todo, Phys. Rev. Lett. 105, 120603 (2010)

Markov Chain Monte Carlo Method without Detailed Balance

Metropolis algorithm: 以Ising model为例

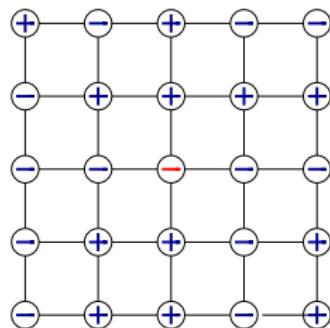
算法:

- 1 在位形 $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s_N)$ 中任选一个自旋, 比如 s_i .



Metropolis algorithm: 以Ising model为例

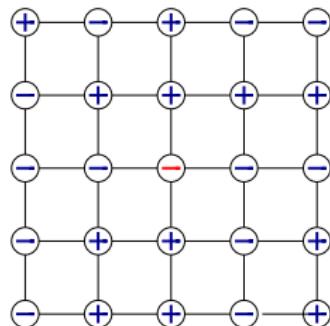
算法:



- 1 在位形 $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s_N)$ 中任选一个自旋, 比如 s_i .
- 2 翻转它, $\Gamma' = (s_1, s_2, \dots, -s_i, \dots, s_N)$. 这就是按 $p_{\text{attempt}} = \frac{1}{N}$ 的几率选择一个新位形

Metropolis algorithm: 以Ising model为例

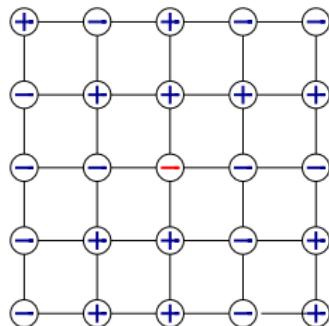
算法:



- 1 在位形 $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s_N)$ 中任选一个自旋, 比如 s_i .
- 2 翻转它, $\Gamma' = (s_1, s_2, \dots, -s_i, \dots, s_N)$. 这就是按 $p_{\text{attempt}} = \frac{1}{N}$ 的几率选择一个新位形
- 3 计算 $\Delta E = E(\Gamma') - E(\Gamma)$, 因为 $\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)} = e^{-\Delta E/k_B T}$

Metropolis algorithm: 以Ising model为例

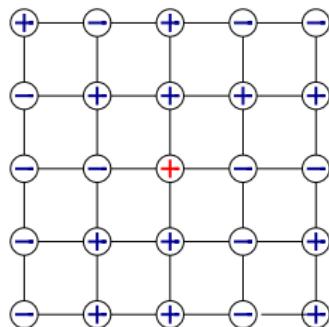
算法:



- 1 在位形 $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s_N)$ 中任选一个自旋, 比如 s_i .
- 2 翻转它, $\Gamma' = (s_1, s_2, \dots, -s_i, \dots, s_N)$. 这就是按 $p_{\text{attempt}} = \frac{1}{N}$ 的几率选择一个新位形
- 3 计算 $\Delta E = E(\Gamma') - E(\Gamma)$, 因为 $\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)} = e^{-\Delta E/k_B T}$
- 4 设定 $P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \min[\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)}, 1]$:
 - ▶ 如果 $\Delta E \leq 0$, 接受 Γ' ;
 - ▶ 如果 $\Delta E > 0$, 按几率 $e^{-\Delta E/k_B T}$ 接受 Γ' ; 否则拒绝 Γ' (或者说取 $\Gamma' = \Gamma$).

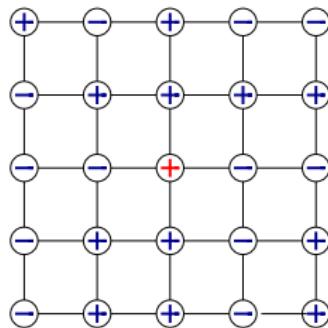
Metropolis algorithm: 以Ising model为例

算法:



- 1 在位形 $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s_N)$ 中任选一个自旋, 比如 s_i .
- 2 翻转它, $\Gamma' = (s_1, s_2, \dots, -s_i, \dots, s_N)$. 这就是按 $p_{\text{attempt}} = \frac{1}{N}$ 的几率选择一个新位形
- 3 计算 $\Delta E = E(\Gamma') - E(\Gamma)$, 因为 $\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)} = e^{-\Delta E/k_B T}$
- 4 设定 $P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \min[\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)}, 1]$:
 - ▶ 如果 $\Delta E \leq 0$, 接受 Γ' ;
 - ▶ 如果 $\Delta E > 0$, 按几率 $e^{-\Delta E/k_B T}$ 接受 Γ' ; 否则拒绝 Γ' (或者说取 $\Gamma' = \Gamma$).
- 5 回到1, 循环到足够的位形产生.

Metropolis algorithm: 以Ising model为例 算法:



- 1 在位形 $\Gamma = (s_1, s_2, \dots, s_i, \dots, s_N)$ 中任选一个自旋, 比如 s_i .
- 2 翻转它, $\Gamma' = (s_1, s_2, \dots, -s_i, \dots, s_N)$. 这就是按 $p_{\text{attempt}} = \frac{1}{N}$ 的几率选择一个新位形
- 3 计算 $\Delta E = E(\Gamma') - E(\Gamma)$, 因为 $\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)} = e^{-\Delta E/k_B T}$
- 4 设定 $P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \min[\frac{W(\Gamma')}{W(\Gamma)}, 1]$:
 - ▶ 如果 $\Delta E \leq 0$, 接受 Γ' ;
 - ▶ 如果 $\Delta E > 0$, 按几率 $e^{-\Delta E/k_B T}$ 接受 Γ' ; 否则拒绝 Γ' (或者说取 $\Gamma' = \Gamma$).
- 5 回到1, 循环到足够的位形产生.

- ▶ P_{accept} 也可以选为热浴(Heat Bath)法:

$$P_{\text{accept}}(\Gamma', \Gamma) = \frac{e^{-E(\Gamma')/k_B T}}{e^{-E(\Gamma')/k_B T} + e^{-E(\Gamma)/k_B T}} = \frac{1}{1 + e^{\Delta E/k_B T}}$$

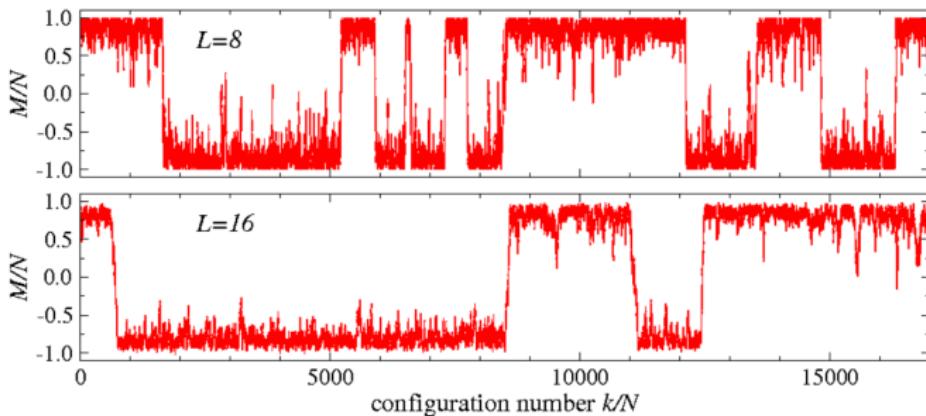
- MC 时间: 一个Monte Carlo 步(1 Monte Carlo step)指进行完 N 次自旋翻转尝试(平均每个自旋尝试一次翻转)
 - 在实现平衡后开始测量观测量(确保 $t > \tau_2$)
 - Bining: 把 M 步MC叫作一个bin, 最终计算bin平均和统计误差
-
- 程序流程
 - ▶ 生成任意的一个初始态
 - ▶ 执行一定的蒙特卡罗步
 - ▶ 运行一定数目的bins
 - ▶ 每个bin包含 M 步
 - ▶ 在每一MC步(或者很少几步)后测量物理量
 - ▶ 完成每一个bin后保存bin平均
 - ▶ 计算最后的平均和统计误差

show

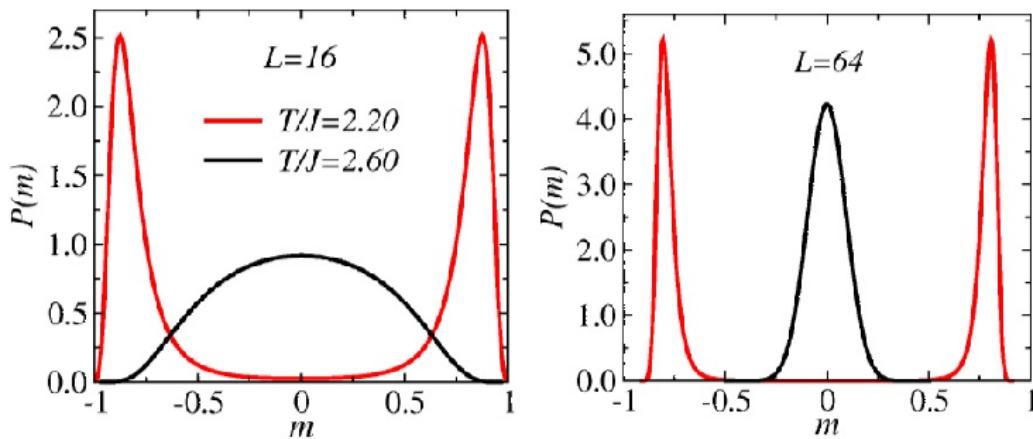
磁化强度的时间演化

$$T/k_B T = 2.2 < T_c$$

- $\langle m \rangle = 0$, 但是 m 反转所需时间随尺寸增加
- 对于足够大的系统, 上下对称发生**破缺**!



- 磁化强度及其分布依赖于温度和尺寸（有限尺寸效应）
 - ▶ $T > T_c$ 在 $m = 0$ 附近形成单峰
 - ▶ $T < T_d$ 在 $\pm \bar{m}$ 形成对称双峰
 - ▶ m 分布



- **对称破缺:** 模拟中大尺寸系统只能测到一个峰，非常小的几率在两峰间跃迁

测量物理观测量

- 磁化强度为序参量(order parameter)

$$m = \frac{M}{N} = \frac{\sum_i^N s_i}{N}$$

但是它的统计平均（期望值）在有限系统里等于零，因为对称性只在热力学极限下真正破缺

模拟中我们计算 $\langle|m|\rangle$, 或者 $\langle m^2 \rangle$

测量物理观测量

- 磁化率

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_k s_k; \quad s_k = \pm 1$$

$$\begin{aligned}\chi &= \frac{\partial m}{\partial B} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial B} \sum_{\Gamma} \frac{M e^{-\beta H}}{Z} \\ &= \frac{\beta}{N} \left(\frac{\sum_{\Gamma} M^2 e^{-\beta H}}{Z} - \left(\frac{\sum_{\Gamma} M e^{-\beta H}}{Z} \right)^2 \right) \\ &= \frac{1}{k_B T N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)\end{aligned}$$

即正比于磁矩的涨落

考慮到有限尺寸下 $\langle M \rangle = N \langle m \rangle = 0$, 模拟中我们计算

$$\chi = \frac{N}{k_B T} \langle m^2 \rangle$$

这就是MC中磁化率的estimator

测量物理观测量

- 比热

$$c = \frac{1}{N} \frac{dU}{dT} = \frac{1}{N} \frac{d}{dT} \frac{\sum_{\Gamma} E(\Gamma) e^{-E(\Gamma)/T}}{Z} = \frac{1}{NT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

表示成能量密度的函数

$$c = \frac{N}{T^2} (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2)$$

这就是MC中比热的estimator

计算统计平均和误差

具体计算：考虑 M 个“bins”，每个包含 n 个测量位形。
由于测量位形出现几率（频率）正比于正则分布，有

$$A_i = \frac{1}{n} \sum_l^n A(\Gamma_l) \approx \langle A \rangle.$$

计算统计平均和误差

我们有统计独立的平均 $A_i, i = 1, \dots, M$

$$\bar{A} = \frac{1}{M} \sum_i^M A_i$$

A_i 的标准偏差

$$\sigma' = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_i^M (A_i - \bar{A})^2} = \sqrt{(\bar{A}^2 - \bar{A}^2)}$$

我们关心的是 \bar{A} 的标准偏差

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{(M-1)} (\bar{A}^2 - \bar{A}^2)}$$

要保证 A_i 统计独立，每个bin需要足够长。

什么叫足够长？我们要考虑‘自关联时间(auto-correlation length)’。

程序实现

- Main program

```
open(1,file='ising.in',status='old')
read(1,*)L,temp, initsteps, bins, binsteps
close(1)
call initialize(temp)
do i=1,initsteps
    call mcstep
enddo
do j=1,bins
    call cleandata
    do i=1,binsteps
        call mcstep
        call measure
    enddo
    call writebindata(n,binsteps)
enddo
```

系统变量可以用Module 描述

Module systemvariables

integer :: L ! 尺寸

integer :: n ! 自旋数 $n = L * L$

real(8) :: pflip(-4:4) ! 事先计算
的接受几率

integer, allocatable :: spin(:) ! 自
旋数组, 可调

end module systemvariables

程序实现

- Initialization tasks

```
subroutine initialize(temp)
```

```
use systemvariables
```

```
 $n = L * L$ 
```

```
do i = -4, 4, 2
```

```
 $pflip(i) = \exp(-i * 2./temp)$ 
```

```
enddo
```

```
call init_random(seed)
```

```
allocate(spin(0:n-1))
```

```
do i=0,n-1
```

```
call random_number(r)
```

```
 $spin(i) = 2 * \text{int}(2.*r) - 1$ 
```

```
enddo
```

! 计算接受概率数组:

4个紧邻自旋的状态有: 4

正, 3正1负, 2正2负, 1正3负, 4负.

$s_1 + s_2 + s_3 + s_4 = 4, 2, 0, -2, -4$

如果被选中自旋为 s , 那么

令 $i = s(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)$,

$\Delta E = 2 * i$

程序实现

- Performs one Monte Carlo step

```
subroutine mcstep()
```

```
do i=1,n
```

```
call random_number(r)
```

```
s=int(r*n) ! 随机挑选一个自旋s
```

```
x=mod(s,L); y=s/L !计算横纵坐标
```

```
s1=spin(mod(x+1,L)+y*L) ! 计算4个最近邻
```

```
s2=spin(mod(x-1+L,L)+y*L)
```

```
s3=spin(x+mod(y+1,L)*L)
```

```
s4=spin(x+mod(y-1+L,L)*L)
```

```
call random_number(r)
```

根据随机数 r 和跃迁几率 $p\text{flip}(i = \Delta E/2)$ 决定是否接受 $s \rightarrow -s$

```
if (r<=pflip(spin(s)*(s1+s2+s3+s4))) spin(s)=-spin(s)
```

```
enddo
```

! spins are labeled $s = 0, \dots, n - 1$, $\text{spin}(s)$ 是 s 的状态 $= \pm 1$

程序实现

- Measures observables (energy, magnetization, and their squares)

subroutine measure

```
real(8) :: enrg1,enrg2,magn1,magn2
common/measurments/enrg1,enrg2,magn1,magn2
e=0; m=0
do s=0,n-1
x=mod(s,L); y=s/L
e=e-spin(s)*(spin(mod(x+1,L)+y*L))
e=e-spin(s)*(spin(x+mod(y+1,L)*L))
enddo
m=sum(spin)
enrg1=enrg1+dble(e) !累计能量
enrg2=enrg2+dble(e)**2 ! 累计能量平方
magn1=magn1+abs(m) ! 累计磁化强度
magn2=magn2+dble(m)**2 ! 累计磁化强度平方
```

程序实现

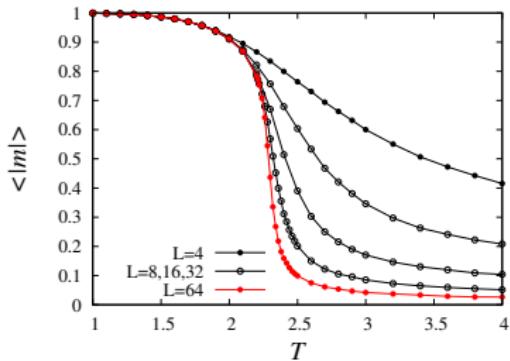
- Writes bin averages to a file

```
subroutine writebindata(n,steps)
real(8) :: enrg1,enrg2,magn1,magn2
common/measurments/enrg1,enrg2,magn1,magn2
open(1,file='bindata.dat',position='append')
以下计算统计平均
enrg1=enrg1/(dble(steps)*dble(n))
enrg2=enrg2/(dble(steps)*dble(n)**2)
magn1=magn1/(dble(steps)*dble(n))
magn2=magn2/(dble(steps)*dble(n)**2)
write(1,1)enrg1,enrg2,magn1,magn2
1 format(4f18.12)
close(1)
```

- These bin data should be processed (giving final averages and statistical errors) with a separate program.

自发磁化，有限尺寸行为

- Ising model的自发磁化

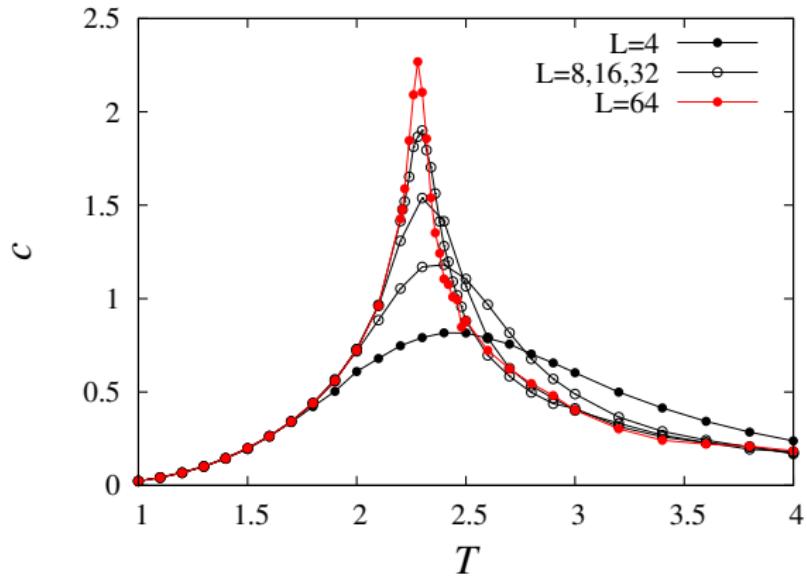


热力学极限下理论公式($T_c = 2.269..$)

$$m = \left(1 - \frac{1}{\sinh^4(2/T)}\right)^{1/8}, \quad T \leq T_c$$

$$m = 0, \quad T > T_c$$

比热



$$c \propto |T - T_c|^\alpha$$

临界指数的计算

- 临界指数 β

热力学极限下

$$m \propto (T_c - T)^\beta \propto \xi^{-\beta/\nu}, \quad \beta = \frac{1}{8} \quad T < T_c$$

有限系统, 在 $T = T_c$, 可以理解为用 L 替代 ξ

$$\langle |m| \rangle \propto L^{-\beta/\nu} + \dots$$

利用这一关系, 在 T_c 模拟一系列尺寸系统, 我们可以定出 β
(作对数图: $\ln |m|$ vs. $\ln L$)

