

# 计算物理寒假大作业

基于 Wolff 方法对二维正方形网格上的 XY 模型 +1 维 Ising 模型的研究

姓名: 姚星宇 学号: PB21000188 班级: 2021 级少年班学院四班

2023 年 2 月 14 日

## 1 概述

### 1.1 Ising 模型

将铁磁性物质的原子假想成规则排列的箭头, 每个箭头拥有上、下两个方向, 对应自旋方向. 相邻箭头之间存在相互作用且受外界环境的影响, 能够发生转变. 此即为 Ising 模型在正方形网格上, 无外磁场时, 基于平均场近似下的 1 维 Ising 模型的哈密顿量如下:

$$H = -E_1 \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j (\sigma_i = \pm 1, i, j \text{ 相邻}) \quad (1)$$

由上述条件容易知道: 温度低时, 该系统倾向于自旋处处相同, 具有长程的有序性, 表现为铁磁相; 高温时, 该系统倾向于随机的自旋分布, 表现为顺磁相. 两相之间的相变为二级相变<sup>[1]</sup>.

### 1.2 XY 模型

二维正方形网格上的 XY 模型的哈密顿量如下:

$$H = -E_2 \sum_{i,j} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j = -E_2 \sum_{i,j} \cos(\theta_i - \theta_j) (\theta_i \in (0, 2\pi], i, j \text{ 相邻}) \quad (2)$$

在高温下, 不同的自旋倾向于指向不同的方向, 长程、短程均无序, 为顺磁相; 在低温下, 与 Ising 模型不同的是, xy 模型会出现涡旋-反涡旋对, 而不去选择能量更低但是自由度少得多的同一取向排列, 即为玻璃态. 随着温度升高, 长程有序逐渐向短程有序变化, 直到超过某一温度  $T_{kt}$  时发生 KT 相变, 短程有序消失, 涡旋-反涡旋对解除耦合. 此即为二维 XY 模型的相变

### 1.3 Wolff 方法

对于相变点附近的系统, 每次只有概率改变转一处的 Metropolis 方法随着关联长度的增加而效率迅速降低. 为了高效地研究相变点附近的系统特性, 在此次研究中需采用团簇翻转算法-Wolff 方法进行计算与抽样. 其原理如下:

以二维 Ising 模型为例, 流程如下<sup>[3]</sup>:

- (1) 随机选定种子点, 并将其放入队列与团簇中
- (2) 对队列中的点  $i$ , 检查其四周的点: 若该点在团簇中或自旋方向与  $i$  点不同, 则不做操作;
- (3) 若该点自旋方向与  $i$  点相同, 则以  $P_{add} = 1 - \exp(-\frac{2J}{kT})$  的概率将其加入团簇与队列中;
- (4) 当  $i$  四周的点全部检查完毕后, 移除队列中的  $i$  点, 返回第二步;
- (5) 当队列中所有点均被移除后, 将团簇中所有点翻转, 视作执行一次 Wolff 方法.

对于某一状态  $S_1$ , 若执行此次 Wolff 方法后团簇  $Clu = (i_1, i_2, i_3, \dots, i_n)$  被翻转为  $Clu^* = (i_1, i_2, i_3, \dots, i_n)$

从而达到  $S_2$ ，则  $S_1$  变为  $S_2$  的概率为：

$$P(S_1 \rightarrow S_2) = \prod_{i,j \in Edge_1} 1 \prod_{i \in Edge_2} \exp(-\frac{2J}{kT}) \sum_{i \in Clu} P_{seed}(i; Clu) \quad (3)$$

式中，边缘上键的集合  $E_1, E_2$  意义如下： $(i, j) \in Edge_1$  意义为  $Clu$  内的点  $i$  与  $Clu$  外的点  $j$  在翻转前自旋方向不同， $(i, j) \in Edge_2$  意义为  $Clu$  内的点  $i$  与  $Clu$  外的点  $j$  在翻转前自旋方向相同。两者相乘即为团簇  $Clu$  不继续长大的概率。而  $P_{seed}(i; Clu)$  表示选择  $i$  为种子点生长为团簇  $Clu$  的概率（不包括边缘点与团簇外的点的选择概率）。

反之， $S_2$  变为  $S_1$  的概率为：

$$P(S_2 \rightarrow S_1) = \prod_{i,j \in Edge_{*1}} 1 \prod_{i \in Edge_{*2}} \exp(-\frac{2J}{kT}) \sum_{i \in Clu^*} P_{seed}(i; Clu^*) \quad (4)$$

由对称性可得： $P_{seed}(i; Clu^*) = P_{seed}(i; Clu)$  (团簇内部条件相同)， $Edge_{*1} = Edge_2, Edge_{*2} = Edge_1$  ( $S_1, S_2$  除了  $Clu$  外完全一致，而  $Clu, Clu^*$  内方向相反)，即有：

$$\frac{P(S_1 \rightarrow S_2)}{P(S_2 \rightarrow S_1)} = \prod_{i \in Edge_2} \exp(-\frac{2J}{kT}) \prod_{i \in Edge_1} \exp(\frac{2J}{kT}) = \exp(-\frac{2J(n_1 - n_2)}{kT}) \quad (5)$$

若从  $S_1$  变为  $S_2$ ，由于内部均为相同方向，故仅需考虑边缘点上能量变化，值为为：

$$E(S_1 \rightarrow S_2) = 2J(n_1 - n_2) \quad (6)$$

即有：

$$\frac{P(S_1 \rightarrow S_2)}{P(S_2 \rightarrow S_1)} = \exp(-\frac{E(S_1 \rightarrow S_2)}{kT}) \quad (7)$$

满足细致平衡原理。

XY 模型的 Wolff 算法实现是类似的，仅需将能量函数替换为 XY 模型的函数即可。

## 2 结论

图 1、2 分别为  $L = 100/50, E_1 = E_2 = E$  状态下，以  $0.05 \frac{kT}{E}$  步长进行模拟的图像，相关准确数据附在文档 res.txt 中。其中  $U$  为平均内能，以  $E$  为单位； $S$  为平均熵，以  $k$  为单位； $M1, M2$  为 Ising 模型与 XY 模型的磁化强度。显然的，图中存在两个相变点。由磁化强度图像可得： $T \approx 0.8$  为 XY 模型的相变， $T \approx 2.2$  为 Ising 模型的相变。

对于 Ising 模型，经过拟合得到的相变点为  $T_{Ising} = 2.164$ ；XY 模型的相变点则为  $T_{XY} = 0.843$ 。

可知，在  $(E_{Ising}/kT > 1/2.164, E_{XY}/kT > 1/0.843)$  的情况下为铁磁-玻璃态； $(E_{Ising}/kT < 1/2.164, E_{XY}/kT > 1/0.843)$  为顺磁-玻璃态； $(E_{Ising}/kT > 1/2.164, E_{XY}/kT < 1/0.843)$  为铁磁-顺磁态； $(E_{Ising}/kT < 1/2.164, E_{XY}/kT < 1/0.843)$  为顺磁-顺磁态。四种相的示意图图如下：需要注意的是，由于算力限制，这里只使用简单的直线拟合而非经过较为精确的方法（如数据跌落<sup>[4]</sup>法）进行的计算，故与标准值存在一定误差（如 XY 模型的标准值为 0.893<sup>[4]</sup>，Ising 模型的标准值为 2.269）。但在定性上是正确的。若在更大的规模上计算可获得更好的结果。

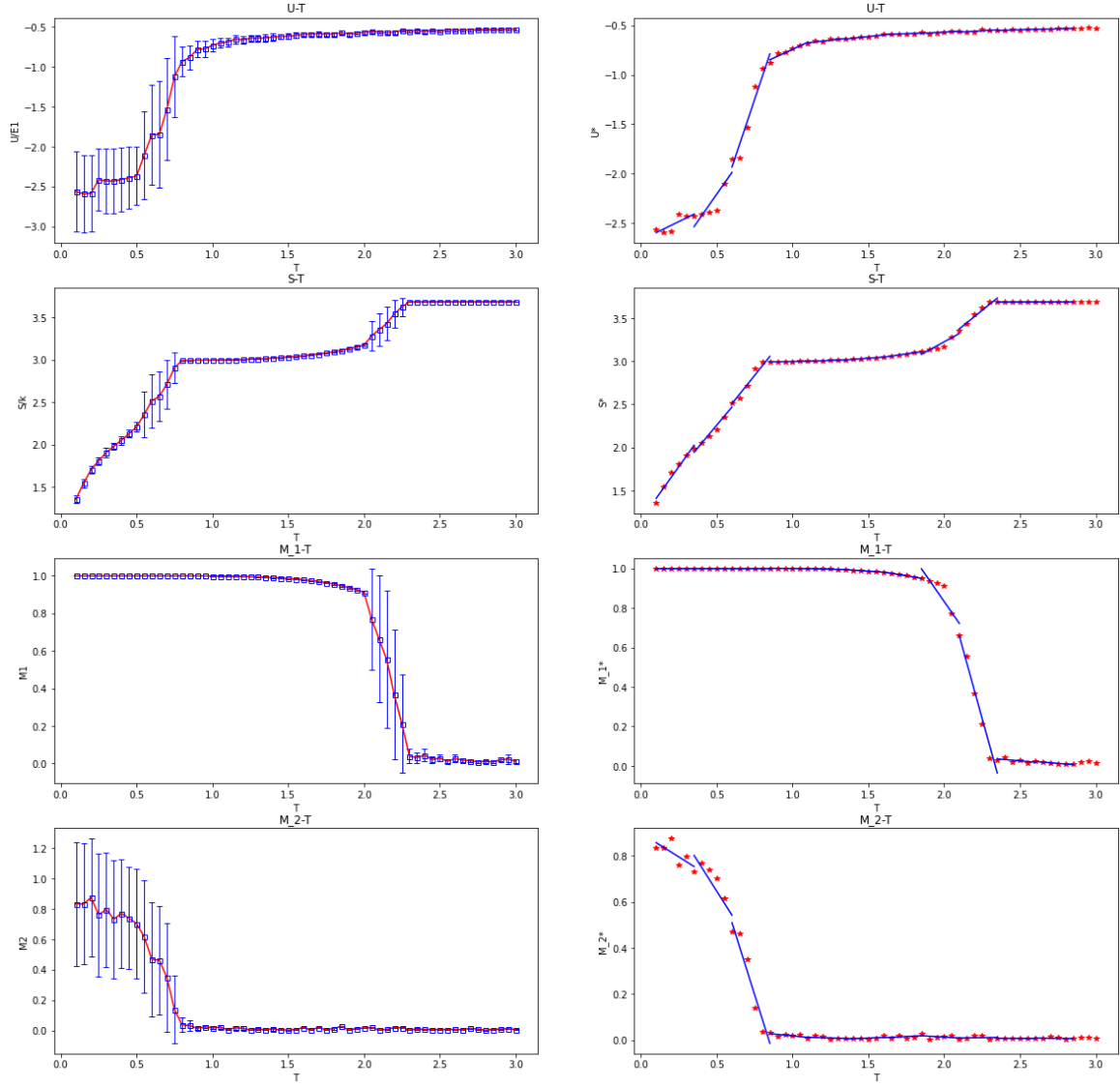


图 1: 程序运行结果,  $L = 100$

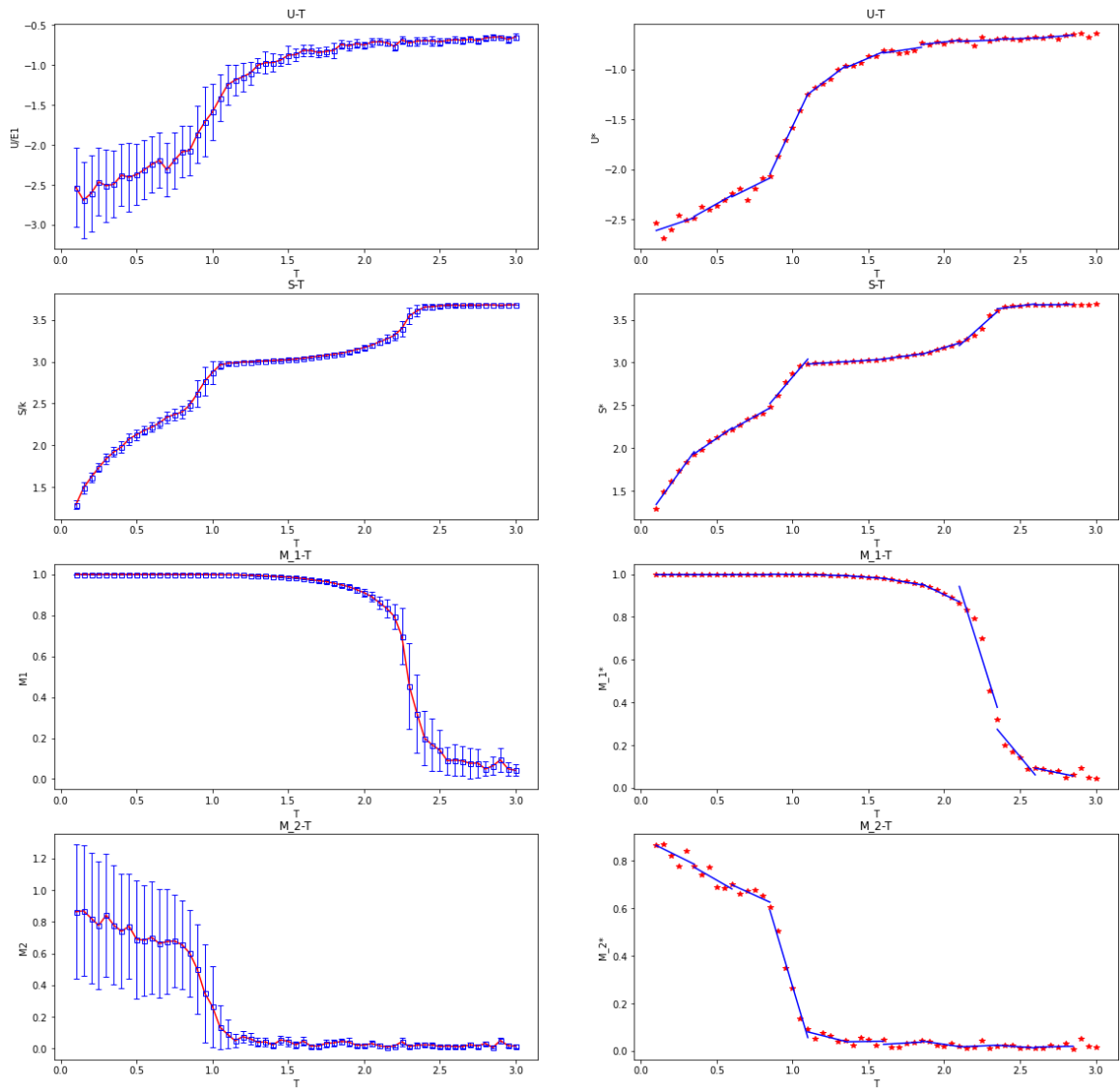


图 2: 程序运行结果,  $L = 50$

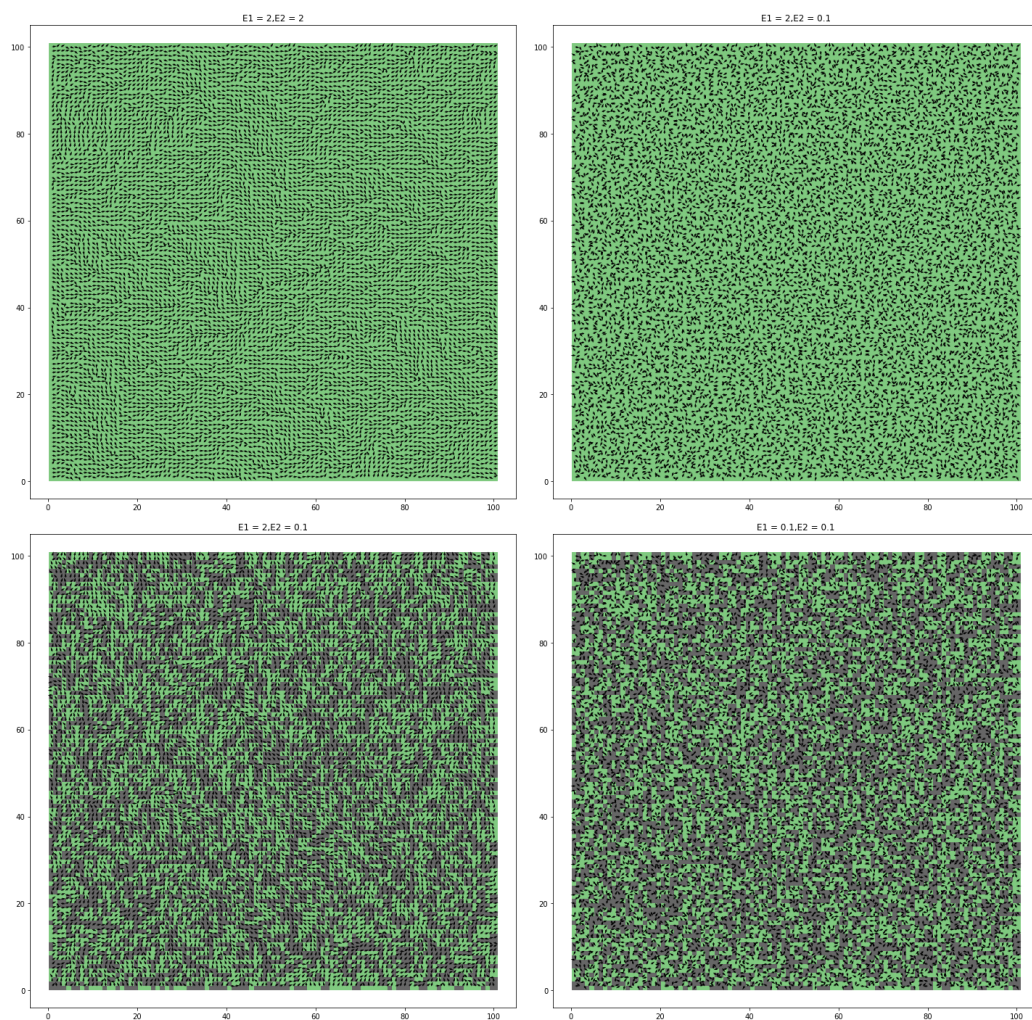


图 3: 依次为铁磁-玻璃态，铁磁-顺磁态，顺磁-玻璃态，顺磁-顺磁态

### 3 其他一些话……

大作业完成的有些仓促，主要是在调试代码的过程中犯了大量由于经验不足导致的错误。但在不断的优化与使用并行计算相关库的情况下， $L=100$  的计算最终可在半小时左右完成。（在源代码中，也实现了相应模型的 Metropolis 方法，但在相变点附近其效率实在太低，故又写了 Wolff 以加快速度。Wolff 方法本身也经过数次编程上的优化，如将 XY 模型的旋转同一角度改为按同一轴进行旋转，由于一些未知的原因这样做可以加快在铁磁相的计算效率）。更大的尺度上的计算对于笔记本与家用机来说是难以进行的，故只能得出一个极为不精确、只在定性上有意义的结论（早知道就用重整化群了）。计划按 [3] 加上的机器学习也由于时间关系没加（不过感觉加上了就不太“计算物理”了）但本作业使用的方法是具有普适性的。希望助教与老师手下留情，别让孩子挂了 ()

### 参考文献

- [1] 丁泽军. 计算物理讲义 [M]
- [2] 徐琳等. Monte-Carlo 法模拟二维 Ising 模型——Metropolis、Swendsen-Wang 与 Wolff 算法的对比 [J] 大学物理 2022,41(01),79-83
- [3] 刘嘉钰. 机器学习方法研究渗流和 XY 模型相变 [D]
- [4] 曾辉. 二维正方晶格上含空位 O (2) 自旋模型相变的蒙特卡罗研究 [D]