

二维 Ising 模型临界相变的 Monte - Carlo 数值模拟

李晓寒¹, 王宗笠², 宁 旭¹

(1. 第三军医大学, 物理教研室, 重庆 400038; 2. 重庆大学 理论物理所, 重庆 400044)

摘 要:基于二维 Ising 模型, 讨论用 Monte - Carlo 方法数值模拟正则系综的临界行为. 计算结果表明此数值仿真能够显示二维自旋晶格的自发磁化. 该文确立的方法可以为三维 Ising 模型的仿真计算打下基础.

关键词:临界相变; Ising 模型; Monte - Carlo 模拟

中图分类号: O414.2 **文献标识码:** A **文章编号:** 1000 - 2162(2008)03 - 0056 - 04

在求解 Ising 模型这一问题上, 数值模拟方法是一种有效的途径, 不但可以求出模型更加精确的解, 同时还可以绘出相变前后物质状态的具体图像及其涨落. 下面介绍以多步 Markov 过程使系统逼近 Boltzmann 分布的 Monte - Carlo^[1] 模拟方法. 即, 系统的温度是其他变量的宗变量. 研究的目的, 是寻找系统平均磁化随温度的变化, 尤其是在临界温度附近的行为, 这实际上相当于构造了一个正则系综, 在正则系综中观察铁磁相变现象. 研究表明在正则系综条件下, 可以观察到平均磁化的临界变化, 随着系统温度的提高, 系统会出现对称破缺、有序变为无序, 序参量趋于零. 该文运用 Monte-Carlo 方法来模拟正则系综的以上行为, 讨论二维 Ising 模型在正则系综条件下的自发磁化行为. 这一方法可以适用于二维及三维 Ising 模型临界现象的研究.

1 计算模型

图 1 所示是二维方形自旋网格 $N \times N$ 中任意一个格点处的自旋, 其 Von Neumann 邻居^[2] 格点自旋为 $S_1 S_2 S_3 S_4$, 现在考虑单轴各向异性情形, 即所有的 S_i 只能取 ± 1 , 两最近邻自旋相互作用能为 $E = -J \sum S_i S_j$, 对铁磁物质 $J > 0$, 求和只对每个格点的 Von Neumann 邻居进行.

Monte-Carlo 方法的思想是: 模拟点阵系统从随机产生的一初始态到与特定温度 T 对应的平衡态的演化, 得到系统在平衡态下的各种微观态, 每个微观态给出了该温度下可以接受的各格点自旋指向的一种分布, 由指向分布情况可以求出磁化强度, 选取多个微观态样本求平均磁化强度, 比较不同温度下的平均磁化强度就可以确定平均磁化强度随温度的变化关系.

具体做法: 从初状态开始, 按一定的抽样方法决定每个格点的自旋是否反转, 设 $\Delta E = E_2 - E_1$ 表示反转前后自旋相互作用能的增量, 取 S_i 发生变化的几率满足

$$W = \begin{cases} 1, & \Delta E < 0 \\ \exp^{-\Delta E/kT}, & \Delta E > 0 \end{cases}$$

这里, T 为温度, k_B 为 Boltzmann 常数, 当使用适当的温度尺度时, 可指定 $k_B = 1$. 产生一个介于 $[0, 1]$ 均匀分布的随即数 η , 与得到的 W 值比较, 若 $W > \eta$ 则接受 S_i 的反转; 若 $W \leq \eta$ 则不接受 S_i 的反转; 当对所有的格点都进行了这样的处理后, 系统的状态就朝着某温度 T 对应的平衡态前进了一步, 称为一个蒙特卡罗步 (MCS)^[1], 经过足够多的 MCS, 系统就进入了平衡态, 因为平衡态的每一个微观态给出了该温度下可接受的各格点自旋指向的一种分布, 根据指向分布就可以求出磁化强度 $\langle M \rangle$ 以及 $\langle M \rangle$ 随

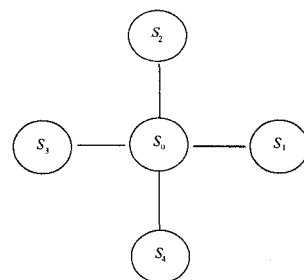


图 1 二维方形网格格点自旋

收稿日期: 2007 - 12 - 16

作者简介: 李晓寒 (1978 -), 男, 宁夏西吉人, 第三军医大学助教, 硕士.

J/kT 值的变化关系并确定出临界点. 以上做法实际上是在构造系统状态演化的马尔可夫 (Markov) 过程, 这样 S_i 的翻转概率满足了细致平衡条件的要求.

2 算法步骤

Monte - Carlo 模拟二维 Ising 自旋动力学模型的具体步骤如下:

- (1) 给出矩阵的规格 $N \times N$ 及温度 J/kT 的起始值.
- (2) 随机产生一个自旋点阵排列作为系统的起始状态, 计算系统的能量 E_1 .
- (3) 随机选一格点 S_i , 考察 S_i 及其 Von Neumann 邻居自旋分布情况, 并计算 S_i 反转后的系统能量 E_2 . 根据 $\Delta E = E_2 - E_1$ 计算出 Montropolis 转移几率函数 W ; 当 S_i 为点阵边缘格点时, 采用周期性边界条件^[4].
- (4) 产生一个介于 $[0,1]$ 均匀分布的随即数 η , 与得到的 W 值比较, 若 $W > \eta$, 则接受 S_i 的反转; 若 $W \leq \eta$, 则 S_i 不变; 这时虽然 S_i 不反转, 但仍然是个有效的新状态.
- (5) 重复步骤 (2) ~ (4) 足够多次 (N_1 次), 使系统达到平衡态.
- (6) 抽取一个状态样本, 计算样本的每个格点磁化强度 $M = \sum S_i/N^2$, 求和对所有的格点进行. 收集足够多的样本 (N_2 次), 求格点平均磁化强度 $\langle M \rangle$.
- (7) 将温度 J/kT 值加上一小增加量作为新的 J/kT 值, 重复 (2) ~ (6) 步骤, 即可得到 $\langle M \rangle$ 随温度 J/kT 的函数变化关系.

3 计算结果及分析

按上述算法步骤进行 MATLAB 编程模拟计算, 表 1 为 3 种规格的二维点阵 100×100 、 200×200 、 250×250 的模拟结果. 图 2 为模拟结果示意图, 其中横坐标是系统温度 $J/K_B T$, 纵坐标是格点平均磁化强度 $\langle M \rangle$.

表 1 3 种不同规格自旋点阵 Monte-Carlo 模拟结果

$J/K_B T$	0.600	0.595	0.590	0.585	0.580	0.575	0.570	0.565	0.560	0.555
100×100	0.938	0.939	0.938	0.937	0.937	0.933	0.932	0.930	0.926	0.928
200×200	0.959	0.961	0.960	0.958	0.956	0.958	0.957	0.954	0.953	0.951
250×250	0.941	0.940	0.942	0.942	0.943	0.943	0.943	0.943	0.943	0.941
$J/K_B T$	0.550	0.545	0.540	0.535	0.530	0.525	0.520	0.515	0.510	0.505
100×100	0.927	0.920	0.918	0.913	0.916	0.910	0.911	0.905	0.907	0.899
200×200	0.951	0.949	0.944	0.942	0.938	0.936	0.935	0.932	0.928	0.923
250×250	0.939	0.937	0.935	0.933	0.930	0.929	0.929	0.927	0.924	0.919
$J/K_B T$	0.500	0.495	0.490	0.485	0.480	0.475	0.470	0.465	0.460	0.455
100×100	0.893	0.882	0.884	0.884	0.885	0.872	0.867	0.865	0.861	0.850
200×200	0.919	0.914	0.907	0.901	0.893	0.888	0.886	0.879	0.871	0.861
250×250	0.917	0.913	0.910	0.907	0.903	0.897	0.894	0.888	0.883	0.879
$J/K_B T$	0.450	0.445	0.440	0.435	0.430	0.425	0.420	0.415	0.410	0.405
100×100	0.847	0.839	0.817	0.810	0.794	0.792	0.776	0.756	0.739	0.716
200×200	0.857	0.855	0.843	0.835	0.823	0.814	0.803	0.789	0.781	0.774
250×250	0.873	0.867	0.858	0.850	0.843	0.833	0.826	0.818	0.808	0.793

续表 1

$J/K_B T$	0.400	0.395	0.390	0.385	0.380	0.375	0.370	0.365	0.360	0.355
100×100	0.687	0.685	0.665	0.646	0.622	0.604	0.573	0.549	0.515	0.489
200×200	0.758	0.740	0.727	0.709	0.684	0.670	0.649	0.624	0.596	0.582
250×250	0.779	0.766	0.752	0.736	0.723	0.706	0.692	0.673	0.653	0.632
$J/K_B T$	0.350	0.345	0.340	0.335	0.330	0.325	0.3200	0.315	0.310	0.305
100×100	0.465	0.447	0.427	0.415	0.406	0.359	0.336	0.320	0.262	0.229
200×200	0.556	0.530	0.497	0.460	0.441	0.398	0.369	0.336	0.308	0.280
250×250	0.611	0.586	0.566	0.546	0.523	0.497	0.473	0.453	0.426	0.401
$J/K_B T$	0.300	0.295	0.290	0.285	0.280	0.275	0.270	0.265	0.260	0.255
100×100	0.210	0.183	0.159	0.138	0.1118	0.096	0.080	0.083	0.053	0.059
200×200	0.252	0.224	0.196	0.177	0.166	0.143	0.126	0.110	0.095	0.089
250×250	0.374	0.345	0.314	0.290	0.270	0.243	0.214	0.192	0.168	0.145
$J/K_B T$	0.250	0.245	0.240	0.235	0.230	0.225	0.220	0.215	0.210	0.205
100×100	0.047	0.045	0.029	0.039	0.016	0.011	0.004	0.014	0.021	0.010
200×200	0.076	0.067	0.059	0.048	0.041	0.040	0.037	0.034	0.031	0.036
250×250	0.123	0.104	0.089	0.083	0.069	0.058	0.047	0.040	0.032	0.028

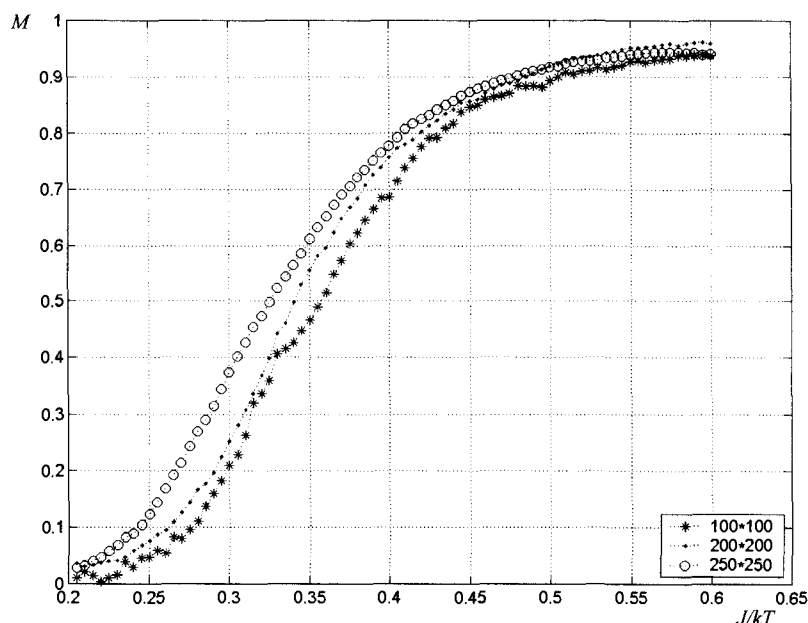


图 2 格点平均磁化率 $\langle M \rangle$ 随温度 J/kT 的变化

根据表 1 数据值,可以得出格点平均磁化率 $\langle M \rangle$ 随温度 $J/k_B T$ 变化的拟和方程为

$$M = 1.352 - 13.999 \tanh(x) + 48.493 \tanh^2(x) - 37.074 \tanh^3(x) - 13.822 \tanh^4(x)$$

其中, $x = J/k_B T$.

表 1、图 2 表明:不管是哪一种规格的点阵,当 $J/k_B T$ 值在 0.33 ~ 0.35 前格点平均磁化率 $\langle M \rangle$ 均接近于零,在 0.33 ~ 0.35 附近时 $\langle M \rangle$ 突然增大,以后明显趋于饱和,这说明临界点在 0.33 ~ 0.35 附近,与严格解结果 0.44 比较,误差不超过 21%,说明上述的算法是正确的, Monte - Carlo 模拟处理伊辛模型临界相变问题是有效的. 同时还可以看出在任何温度下, $\langle M \rangle$ 均不为零,这主要是模型的有限尺度效应

造成的,随着点阵规模的增大将会得到改善.

4 结 语

尽管三维 Ising 模型的严格解仍然是个世界难题,但仍可以采用 Monte-Carlo 模拟计算的方法求解,方法与二维情况所用基本相同,编程时只需要对周期性边界条件等做相应的扩展.

参考文献:

- [1] 季达人,张剑波. 三维随机点阵 Ising 模型的集团 Monte-Carlo 方法模拟[J]. 物理学报,1993, 42(11):1741 - 1746.
- [2] 林旭升. 二维伊辛模型相变临界点温度的模拟计算[J]. 大学物理,2000,19(5):13 - 15.
- [3] 张祥,陈冬保,陈武鸣. 二维伊辛模型蒙特卡罗模拟[J]. 南京大学学报:数学半年刊,1997,1:137 - 141.
- [4] 北京大学物理系. 量子统计物理学[M]. 北京大学出版社. 1987:380 - 460.
- [5] 于渌,郝柏林. 相变与临界现象[M]. 北京:科学出版社,1984:32 - 50.
- [6] 尼科里斯,曾得高津. 探索复杂性[M]. 成都:四川教育出版社. 1986:40 - 62.
- [7] Kaneyoshi M. Magnetism of a ferromagnetic or ferromagnetic system[J]. Physica A,1993(195):474 - 496
- [8] Frish U, Hasslacher B, Pomeau Y. Two dimension cellular automate[J]. Phy Rev Lett, 1986,56(1):505 - 506.

Simulation of Monte-Carlo based on 2D Ising model

LI Xiao-han¹, WANG Zong-li², NING Xu¹

(1. Department of Physics, The Third Military Medical University, Chongqing 400038, China;

2. Department of Theory Physics, Chongqing University, Chongqing 400044, China)

Abstract: Based on two-dimensional Ising model, we simulate the critical behavior of canonical ensemble by Monte-Carlo simulation. The results indicated that the computer numerical simulation can reflect the spontaneous magnetization of two-dimensional crystal lattice. The method built in the paper can provide a basis for the simulation of three-dimensional Ising model.

Key words: critical phase transition; Ising model; Monte-Carlo simulation

责任编辑:李镜平,于 敏