

HTML5 平台上的二维伊辛模型蒙特卡洛模拟与可视化

夏子安 物理学系 17307110060

摘要：本实验将蒙特卡洛方法和 HTML5 平台结合，从定性和定量两方面研究二维正方晶格下的伊辛模型，可视化地展现了二级相变过程，并求得临界温度的数值解，与精确解相差 3%。

一、引言：

相变是一类重要的宏观物理现象，相变过程中，物理量会出现一定程度的不连续性；二级相变指的是自由能的一阶导数连续，但二阶导数不连续，铁磁相变是典型的二级相变。在热力学中，朗道在 1937 年提出了他的连续相变理论^{[2]P102}，引入序参量的概念，在唯像层面很好地解释了二级相变。在统计物理中，二级相变常使用建立模型的方法进行研究；人们发现的第一个具有相变现象的物理模型是伊辛模型，在 1924 年由 Ernst Ising 提出，这是一种描述铁磁相变的半量子模型，在维数大于等于 2 时，表现出二级相变的特征。

相变的统计模型是多体系统，一般无法精确求解，即使进行数值计算也往往需要耗费大量算力。蒙特卡洛方法（Monte Carlo Method）是一种有效的解决方案，这种方法通过随机抽样把求解数理方程的问题转化为概率问题，可以极大简化计算的复杂度，使得数值求解可以进行，因而在包括计算物理在内的很多领域有应用。

本实验将在 HTML5 搭建的网页平台利用蒙特卡洛方法研究二维伊辛模型，并可视化地展现蒙特卡洛模拟的过程。

二、实验原理：

1. Ising model

晶格中每一个原子的自旋可取两个分立的值 $\sigma = \pm 1$ ，相邻自旋间存在相互作用 $E_{ij} = -J\sigma_i\sigma_j$ ，每一个自旋还与外加磁场有作用 $V_i = h\sigma_i$ ；当晶体结构确定后，体系的哈密顿量可写作：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i$$

期中， $\langle ij \rangle$ 表示对晶格中的相邻原子求和， $i, j = 1, 2, \dots, N$ ，即共有 N 个原子；体系的配分函数为：

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{-\beta H} = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp \left[-\beta \left(-J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \right) \right]$$

$\{\sigma_i\}$ 表示对所有的态（共 2^N 个）求和。

现已知伊辛模型在维度大于 2 时具有出二级相变现象。^{[2]P285}

2. 蒙特卡洛方法与细致平衡原理

MCMC，即马尔科夫链蒙特卡洛方法（Markov Chain Monte Carlo Method）是蒙特卡洛方法在统计力学中的一种应用。其基本思想是将时间轴离散化，连续变化的态转化为一列分立的状态（即马尔可夫链）；同时，将状态随时间变化所满足的动力学方程替换为一个概率过程，用转移矩阵 $P(\tau_m \rightarrow \tau_n)$ 描述；用这种“伪动力学”过程来模拟出体系的平衡态，进而计算各类热力学量。

为了模拟出符合物理的平衡态，在设计蒙特卡洛过程时有一定的约束^[4]。表现为如下两条：

- (a) 各态历经：任意两个状态 m, n （ m, n 是标记态的量子数）之间都是联通的，即总存在一条途径 $m \rightarrow m+1 \rightarrow m+2 \rightarrow \dots \rightarrow n$ ，其概率不为零；
- (b) 全局平衡原理：系统达到平衡的标志是状态的概率分布保持不变。用 $\Pi(\tau_n)$ 表示概率分布函数，用 $P(\tau_n \rightarrow \tau_m)$ 表示态 τ_n 转化为 τ_m 的概率；概率分布保持不变时，某一个态由其他态产生的概率等于该态转化为其他态的概率，因此可以写出：

$$\sum_m \Pi(\tau_m) P(\tau_m \rightarrow \tau_n) = \sum_m \Pi(\tau_n) P(\tau_n \rightarrow \tau_m)$$

上式左边表示由所有其他态转化为 τ_n 的总概率，上式右边表示由 τ_n 转化为其他态的概率。在平衡态下，分布 $\Pi(\tau_n)$ 可用玻尔兹曼分布代入；上述约束方程对所有 n 都成立，共可以写出 X 个（ X 为总状态数），这就是全局平衡原理的数学表达。显然，未知数 $P(\tau_n \rightarrow \tau_m)$ 有 X^2 个，少于方程数目，因此概率过程 $P(\tau_n \rightarrow \tau_m)$ 的选取有一定的任意性。

全局平衡原理要求的是所有状态之间的平衡，我们为了设计概率过程的方便，可以人为加强约束，要求任意两个状态之间都达到平衡，也就是细致平衡。当两

个态 τ_n, t_m 之间达到平衡时，由 τ_n 转化为 τ_m 的总概率等于 τ_m 转化为 τ_n 的总概率，即：

$$\Pi(\tau_n)P(\tau_n \rightarrow t_m) = \Pi(\tau_m)P(\tau_m \rightarrow t_n)$$

将玻尔兹曼分布 $\Pi(\tau_n) \propto e^{-\beta E(\tau_n)}$ 代入，得到：

$$\frac{P(\tau_n \rightarrow t_m)}{P(\tau_m \rightarrow t_n)} = e^{-\beta(E(\tau_n) - E(\tau_m))} = e^{-\beta \Delta E}$$

这就是细致平衡原理的数学表达。显然，细致平衡原理是全局平衡原理的充分不必要条件，因此满足细致平衡原理的概率过程必然满足全局平衡原理。

3. Metropolis 算法

这是一种根据细致平衡原理写出的最为简单的马尔科夫链蒙特卡洛算法，其过程分为如下两步：

- 伊辛模型的状态为 $\tau = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ ，任意选取一个 $i \in \{1, 2, \dots, N\}$
- 考虑自旋 σ_i 反转，而其他自旋不变的态 $\mathcal{D} = \{\sigma_1, \dots, -\sigma_i, \dots, \sigma_N\}$ ，其能量为 $E(\mathcal{D})$ ，

按如下规则判定是否接受 \mathcal{D} ：

若 $E(\mathcal{D}) < E(\tau)$ ，接受 \mathcal{D} ；

若 $E(\mathcal{D}) > E(\tau)$ ，以 $P = \exp[-\beta(E(\mathcal{D}) - E(\tau))]$ 的概率接受 \mathcal{D} ，反之则返回 τ ；

这样完成一个蒙特卡洛步骤。

重复上述步骤，直到体系达到热平衡态。

4. 热力学量的计算

在统计力学中，热力学量等于看作物理量的系综平均，相当于在蒙特卡洛过程中多次采样取平均值。

三、实验过程

1. 定性

实验平台的搭建：使用 JavaScript 编写蒙特卡洛模拟程序，使用 HTML5 的 canvas 元素显示晶格与自旋。

模拟对象是二维正方晶格中的无外场伊辛模型，自旋间的耦合常数 J 取为 1；哈密顿量为：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

正方晶格的大小选取为 16×16 ，用一个 16×16 的二维数组表示，数组中每一个元素的值为 ± 1 ，并采用周期性边界条件 $\sigma_{i+16,j} = \sigma_{ij} = \sigma_{i,j+16}$ ；在 canvas 元素中，晶格用一个 256×256 的矩形表示，上自旋表示为 16×16 的白色方格，下自旋表示为同样大小的黑色方格。

程序初始化时，随机生成一个晶格的状态，作为蒙特卡洛模拟的初始态，显示在 canvas 元素中。以 16^2 个蒙特卡洛循环为一组，每执行一组循环刷新一次 canvas 元素上的图样，并记录当前状态的总磁矩 $M = \sum \sigma_{ij}$ 。

温度为一可调节参量，在 HTML5 网页中，可通过一滑动条改变温度。

实验过程中，选定一个的温度，观察并记录晶格图样与序参量随蒙特卡洛步数的变化；改变温度，重复上述过程，观察不同温度下平衡态的图样和序参量，判断相变温度所处的大致区间。

2. 定量

铁磁相变作为二级相变，在相变点处系统的热容量发散，因此，可通过热容与温度的关系找出。

将定性实验中确定的临界温度范围作为定量实验的温度范围。与定性实验不同，定量计算下，需要在蒙特卡洛过程中多次采样以保证平均值接近于系综平均（或时间平均）。

在温度 T 下：

- 1) 随机生成一个晶格
- 2) 热化，即进行足够多的蒙特卡洛步骤，使得体系进入平衡态分布，热化的步骤数目 $N_{ther} = 2^8 = 256$ 步；
- 3) 在平衡态下进行蒙特卡洛模拟，步数 $N_{eq} = 2^6 = 64$ ，步数足够多以保证前后两个态无统计关联；记录当前状态下的系统总能量 E_i 和总能量的平方 E_i^2 ；
- 4) 重复步骤 3)，重复次数 $N_{MCstep} = 2^8 = 256$ ，重复次数足够多以保证各态历经，使得平均值为系综平均；根据热容的统计力学计算公式，热容正比于能量的涨落(方差)：

$$C_v = \frac{(E - \langle E \rangle)^2}{T^2} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{T^2}$$

期中，系综平均 $\langle \dots \rangle = \frac{\Sigma \dots}{N_{MCstep}}$;

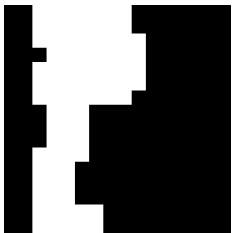
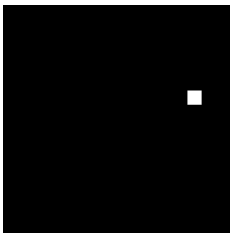
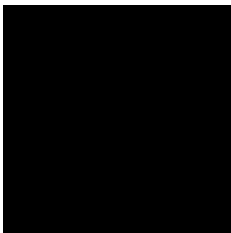
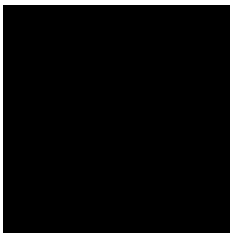

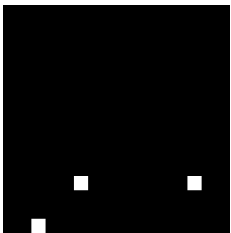
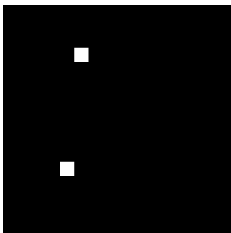
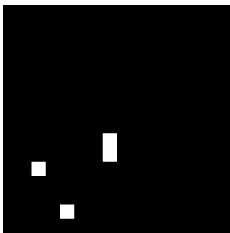




- 5) 改变温度 $T \rightarrow T + dT$ ，重复上述步骤，绘制温度-热容散点图，通过峰值找出临界温度。


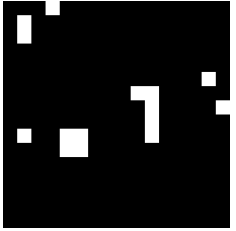
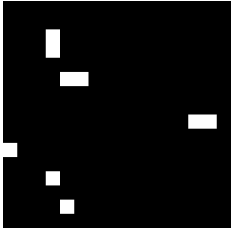
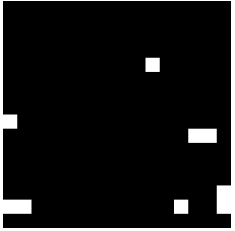


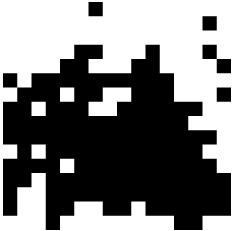
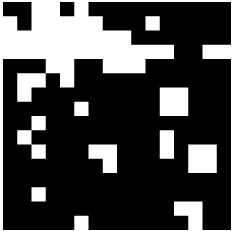
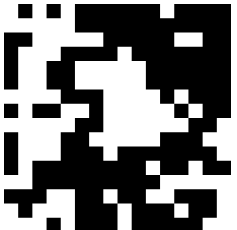

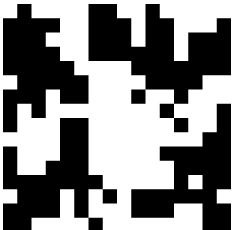
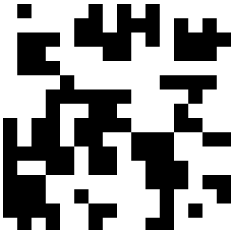
由于定量实验计算量较大，改由 Python 编写程序。

四、实验结果与分析

1. 定性实验结果

在搭建的网页模拟实验平台上，分别在温度 $T = 1.0, 1.5, 2.0, 2.5, 3.0$ 时进行蒙特卡洛模拟，观察并记录 16、32、48、64 步后的晶格图样

	16 步	32 步	48 步	64 步
T	$M = -128$	$M = -254$	$M = -256$	$M = -256$
$= 1.0$	黑块包围白块 	零星的白块 	全黑 	全黑 
T	$M = -192$	$M = -250$	$M = -252$	$M = -248$
$= 1.5$	多数黑块间杂少数白块 	零星的白块 	零星的白块 	零星的白块 
T	$M = -168$	$M = -226$	$M = -238$	$M = -240$
$= 2.0$	多数黑块间杂少数白块 	散布少数白块 	散布少数白块 	散布少数白块 

				
T	$M = 56$	$M = 82$	$M = -22$	$M = -128$
$= 2.5$	黑白混同，白块略多 	多数白块间杂少数黑块 	黑白混同，随机分布 	黑白混同，黑块略多 
T	$M = -38$	$M = -4$	$M = -6$	$M = 30$
$= 3.0$	黑白混同，随机分布 	黑白混同，随机分布 	黑白混同，随机分布 	黑白混同，随机分布 

表（一）不同温度下的晶格图样

分析：

$T = 1.0$ 时，在向平衡态过渡的过程中，黑块（下自旋）与白块（上自旋）倾向于形成集团出现，一种颜色逐渐增多，另一种颜色逐渐减少，足够多的步数后，全部晶格变为一种颜色；重复几次实验，最终状态为全黑和全白的情况都会出现。可见 $T = 1.0$ 是典型的铁磁态，全部自旋倾向于取同一个方向。

$T = 1.5$ 时，在向平衡态过渡的过程中，黑块与白块间杂出现，而非形成集团出现；达到平衡后，晶格几乎取同一种颜色，随着蒙特卡洛模拟的进行会偶然出现一到两个零星分布的另一种颜色的色块，但随即就会消失。可见 $T = 1.5$ 仍属于铁磁态，但因温度升高，热涨落有所加剧。

$T = 2.0$ 时，基本情况与上一个温度一样，但达到平衡的步数更长，且达到平

衡后，零星分布的异色色块数目更多，这一点也可从上表的总磁矩变化中看出。 $T = 2.0$ 仍属于铁磁态，热涨落进一步加剧。

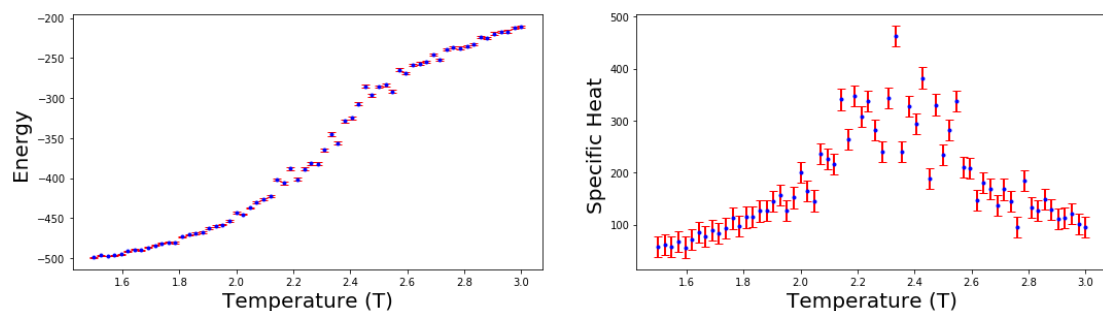
$T = 2.5$ 时，黑白两种色块间杂出现，随着蒙特卡洛模拟的进行，不会出现一种色块始终占多数的情况， $M > 0$ 和 $M < 0$ 的情况交替出现，但每一种情况会持续较长时间。这说明，此时系统已经进入顺磁态。

$T = 3.0$ 时，黑白色块几乎随机分布， $M > 0$ 和 $M < 0$ 的情况交替出现，仍何一种情况都会不持续多久，且 M 的绝对值始终保持在一个较小的数目内(小于 60)。这说明系统处在无序状态，是典型的顺磁态。

由上述分析可知，系统在 $T = 2.0$ 至 $T = 2.5$ 之间发生了相变，相变点极有可能在 $T = 2.5$ 附近。

2. 定量实验结果

为较好得体现热容和能量的变化趋势，适当放宽温度区间，在 $T = 1.5$ 至 $T = 3.0$ 的范围内进行蒙特卡洛模拟，得到能量及热容与温度的关系如下：



图（一）能量及热容与温度的关系

分析：

由图（一）可见，在温度 $T = 2.34$ 处，热容量出现一个峰值，能量则在同一位置出现拐点，这是二级相变的特征；以 $\pm dT$ 作为误差，正方晶格伊辛模型的临界温度 $T_c = 2.34 \pm 0.02$ ，将之前省去的常数代入，得 $T_c = 2.34 \pm 0.02 \frac{J}{k_B}$ （ J 为自旋之间的耦合常数， k_B 为玻尔兹曼常数）。

与昂萨格的严格解 $T_c = 2.269 \frac{J}{k_B}$ 比较，相对误差 $\omega = \frac{2.34 - 2.269}{2.269} = 3\%$

可能的误差来源：

1) 当温度趋于临界温度时，热容量出现了较为显著的不规则分布，这是因为，

体系趋于临界点时，关联时间区域无穷大，多次测量很难保证统计无关，因而计算出的平均值无法准确反映系统平均，影响实验结论，这在蒙特卡洛模拟中被成为临界慢化现象；可能通过在临界点附近加大取样间隔，增多取样数目能够部分解决这一问题，但因算力所限没有实施；

- 2) 昂萨格的精确解是对无穷大的体系计算的出的，蒙特卡洛模拟只能对有点大体系进行（本实验中，体系大小为 16×16 ），故会产生系统误差；设想通过逐渐增大体系规模，找出临界温度与体系规模 N 的关系，再利用外推法找出 $N \rightarrow +\infty$ 时，临界温度的极限，或可使结果更精确，但因算力问题同样没能实施。
- 3)

五、实验结论：

本实验通过对 16×16 的二维正方晶格伊辛模型进行蒙特卡洛模拟，分别通过定性和定量实验研究了该体系的二级相变；得出临界温度 $T_c = 2.34 \pm 0.02 \frac{J}{k_B}$ ，与精确解的相对误差为3%。

六、参考文献：

- [1] 汪洪．重整化群方法的发展及对 t-J 模型的应用 [EB/OL]
<http://www.docin.com/p-902480156.html>
- [2] 汪志诚. 热力学·统计物理[M]. 北京: 高等教育出版社, 2008
- [3] anshuai_aw1. MCMC(一): 蒙特卡罗方法和马尔科夫链 [EB/OL].
http://blog.csdn.net/anshuai_aw1/article/details/84792383
- [4] R. K. Pathria. Statistical Mechanics[M]. UK: Butterworth-Heinemann, 2011