

用 HTML5 演示二维铁磁相变模型

陈英炜，物理学系

摘要：相变是热力学与统计物理课程中的一个重点，具有广泛的研究价值与教学意义。本程序基于 HTML5 语言以及蒙特卡罗算法，对于二维铁磁相变的伊辛模型与海森堡模型进行了演示，更加直观地展示了蒙特卡罗算法以及相关热力学统计量随温度的变化，更便于理解二维铁磁相变的整体过程。

一、引言：

物理模型在物理学的发展过程中起到了至关重要的作用，它是对于物理问题的一种抽象与高度概括。因而，在物理教学的过程中，通过物理模型可以使该物理问题更加直观明了，从而更好地使学生理解这一物理现象及其本质。而 HTML5 语言就提供了这样一个平台。HTML5 是构建以及呈现互联网内容的一种语言描述方式。登录一个网页页面相比起下载并执行程序更为便捷。并且基于网页页面的按钮、对话框等设计，可以在无需自主编写 GUI 的情况下，较易地与用户进行人机互动，从而能够更为方便地呈现出物理模型。而在利用 HTML5 呈现物理模型方面也已经有了许多实践成果^{[1],[2]}。

相变是热力学与统计物理课程中的一个重点。作为铁磁相变模型的一个代表，伊辛模型更是重中之重。伊辛模型通过近邻格点自旋之间的简单相互作用描述了体系在临界温度处发生的铁磁相变，对于其有许多理论计算方法^[3]。但是这些算法及结果无法将体系铁磁相变的过程简洁、可视化地呈现出来。

本程序就基于 HTML5 语言的强大的可视化及人机互动能力，利用蒙特卡罗算法，对二维铁磁相变的伊辛模型与海森堡模型进行演示，同时揭示了相变过程中相关热力学统计量随温度的变化情况。

二、相关原理：

(1) 伊辛模型

伊辛模型假设对于一个总个数为 N 的自旋点阵，只有近邻的自旋之间有相互作用，系统的哈密顿量为：

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mu \mathcal{H} \sum_{i=1}^N s_i \quad (1)$$

其中 s_i 为格点 i 的自旋，取值为 ± 1 ，分别对应自旋方向向上或者向下。符号 $\langle ij \rangle$ 代

表格点 i 与 j 为近邻, $\sum_{\langle ij \rangle}$ 代表对一切近邻对格点进行求和。 J 为耦合常数, 在本演示程序之中取 $J/k_B = 1$, 其中 k_B 为玻尔兹曼常数。 \mathcal{H} 为外磁场, 而在本演示程序中不考虑外加磁场的存在。且本程序所呈现的伊辛模型为二维伊辛模型, 即取 $N = L \times L$ 。

伊辛模型的一个重要结果就是在热力学极限下所得到的热力学函数在临界点会呈现奇异性。在外磁场为 0 的情况下, 可以解得严格解, 其临界温度为 $T_c = 2.269J/k_B$ 。在临界温度点, 系统的热容对数发散, 且平均磁矩为 0。而在系统相变过程中, 其平均磁矩随温度的变化如图 1 所示。

(2) 海森堡模型

海森堡模型相较于伊辛模型, 进一步假定了自旋是具有任意方向性的。此时, 系统的哈密顿量变为:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \mu \vec{\mathcal{H}} \cdot \sum_{i=1}^N \vec{s}_i \quad (2)$$

其中 \vec{s}_i 为二维平面内模长为 1 的任意方向的矢量, 表征着该格点处的自旋。在本演示程序以及二维条件下, 仍然取 $J/k_B = 1$, $\mathcal{H} = 0$ 。海森堡模型与伊辛模型的热力学统计有着相似的行为, 其平均磁矩随温度的变化与图 1 相似。在外磁场为 0 的情况下, 可严格解得临界温度为 $T_c = 0.893J/k_B$ 。

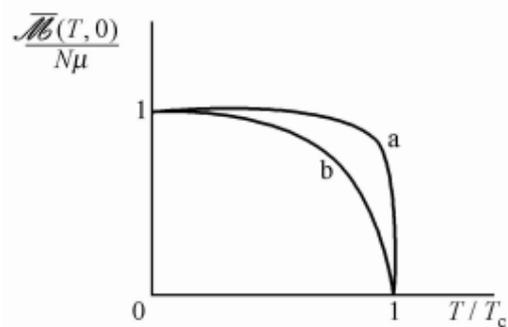


图 1 二维伊辛模型的正方点阵自发磁化随温度的变化 (a 为严格解, b 为平均场近似) [4]

(3) 蒙特卡罗方法

在数值模拟伊辛模型及其他二维铁磁相变模型的方法之中, 蒙特卡罗方法是其中较为基础, 也是颇有成效的一种方法。其核心思想为用一个随机数来表征一个随机发生的过程。对于一个物理量 A 的期望值 $\langle A \rangle_p$, 我们可以通过遍历相空间中的权重 $p(x)$ 及对应位置处的物理量 $A(x)$ 的值得到, 即:

$$\langle A \rangle_p = \frac{1}{Z} \int dx A(x) p(x) \quad (3)$$

其中 $Z = \int dx p(x)$ 为配分函数, 在二维铁磁相变模型中一般取权重满足玻尔兹曼分布, 即 $p(x) = \exp(-E(x)/(k_B T))$ 。同时本演示程序通过马尔科夫链的算法来遍历整个相空间, 具体步骤如图 2 所示, 这也呈现在程序的页面展示之中。

在本演示程序中, 只对平均磁矩进行了统计, 其理论变化如图 1 所示。在统计过程

中，使用了抽样调查统计，其前提是样本之间统计独立。一般对于间隔 3 步蒙特卡罗步的体系，可以认为之间是统计独立的。记 j 为一次抽样统计，从而可得平均磁矩为：

$$\langle M(T) \rangle = \left\langle \sum_i s_i / N \right\rangle_T = \frac{\sum_j (\sum_i s_i)_j}{\sum_j N} \quad (4)$$

同时，本演示程序中采用了循环边界条件，即认为最左侧格点与最右侧格点是紧密相连的，最上侧格点与最下侧格点也是紧密相连的。从而使得计算结果更具一般性。

三、部分程序主要功能设计简述：

程序页面展示可见图 3, 4。由于篇幅有限，故此处仅对一些主要功能的设计思路进行阐述：

(1) 菜单栏的收缩与展开：

通过按钮.onclick 方法，改变需要收缩菜单所属的 div 对应的 CSS 样式中 block 属性，即可实现菜单栏的收缩与展开。

(2) 格点可视化翻转的实现：

在程序中，每一个格点对应一个无序列表 ul 中的 li 元素。对于每一个 li 元素都赋予了一个 index（或者 angle）属性，来表征自旋的方向。当需要翻转（或旋转）该格点的自旋时，可以通过改变这一属性，从而改变格点所属的类（或其旋转的 CSS 样式），从

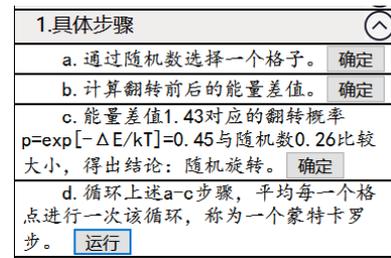


图 2 二维伊辛模型中，蒙特卡罗方法的具体步骤

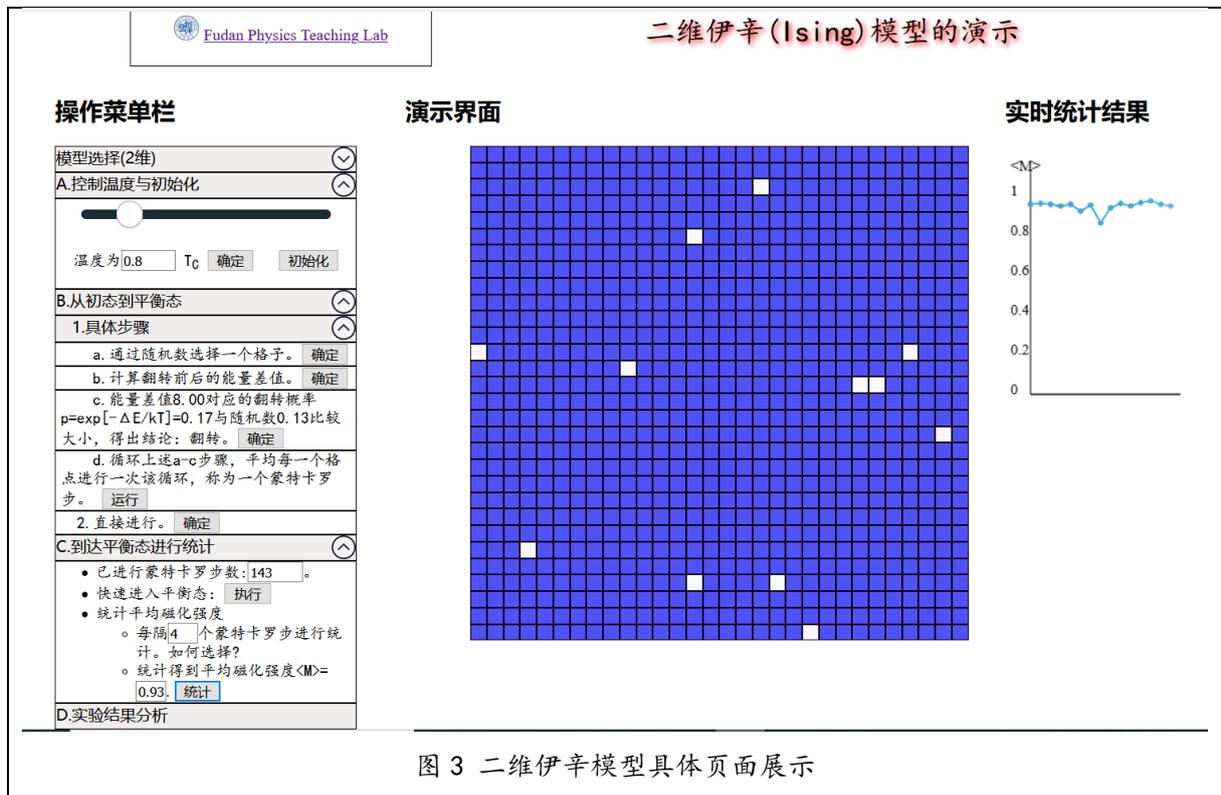


图 3 二维伊辛模型具体页面展示

而实现格点翻转（或自旋箭头旋转）的效果。

(3) 演示界面的实时更新：

利用定时器 `setInterval(function, time)` 函数，即每隔时间 `time` 执行函数 `function`，从而实现每隔 0.1 秒，运行一步蒙特卡罗步，再将结果显示在演示界面之中。从而实现演示界面的实时更新以及无限循环运行。

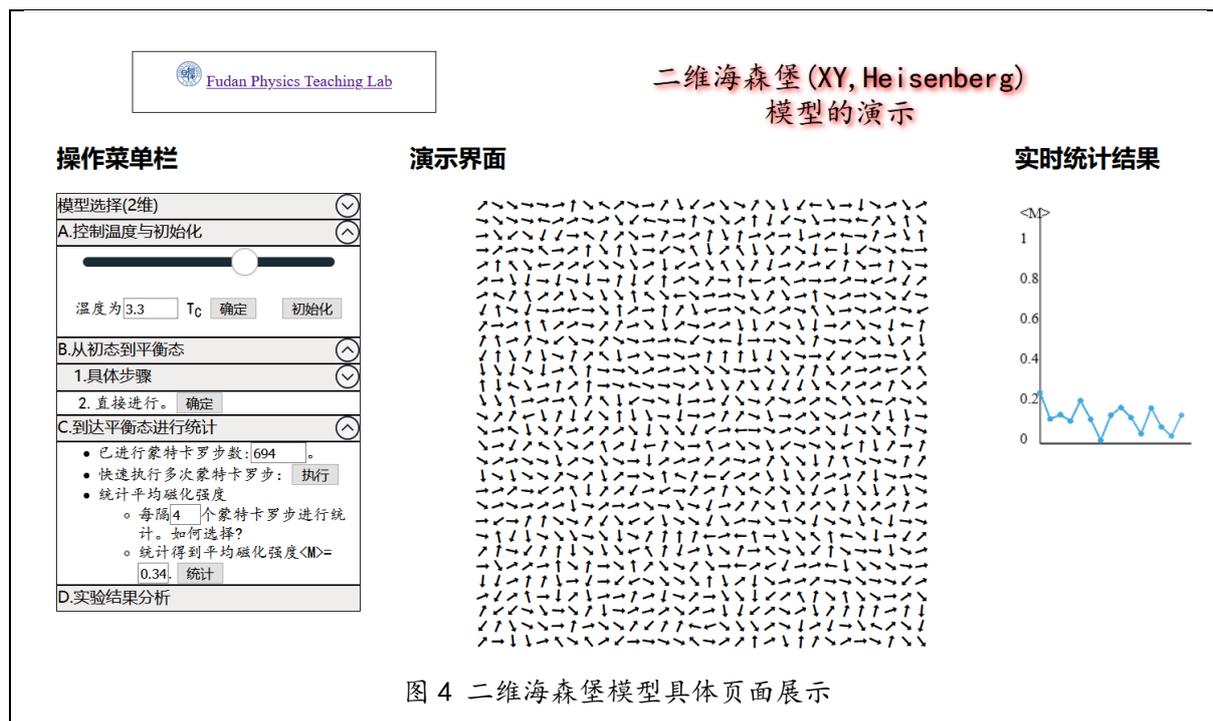
(4) 实时统计结果的演示：

该部分由 Canvas 构成，将对应搜集到的数据按照一定的比例即可转换成坐标，利用 Canvas 绘图的相关函数，即可绘出函数图像。同时利用定时器 `setInterval(function, time)` 函数，即可进行实时的界面更新。

四、程序运行结果与分析：

(1) 程序页面展示

页面主要分为三个部分操作菜单栏，演示界面以及实时统计结果，如图 3,4 所示。



其中操作菜单栏提供了一些基本操作，演示界面是对于模型结点的可视化，实时统计结果是对体系平均磁化强度的实时统计结果的展现。

操作菜单栏主要包含“模型选择”、“控制温度与初始化”、“从初态到平衡态”、“到达平衡态进行统计”、“实验结果分析”五个板块。“模型选择”版块可供在二维伊辛模型与二维海森堡模型之间进行切换。“控制温度与初始化”版块可设定温度并且对程序进

行停止运算停止与初始化操作。“从初态到平衡态”版块分为具体步骤与直接进行两个部分。具体步骤部分通过对演示界面上具体格点的改变，一步步地详细地介绍了蒙特卡罗方法在此体系之中运用时的步骤，如图 2 所示。而直接进行部分可以直接进行无限次的蒙特卡罗步，直到收到停止（初始化）信号。“到达平衡态进行统计”版块，统计了已进行的蒙特卡罗步数，同时设计了一键进行 1000 步蒙特卡罗步的按钮，此外还具有对体系的平均磁矩进行统计的功能。并且在统计时可以设置统计间隔。最后“实验结果分析”版块大致给出了整个模型对应的一些理论结果与分析，如图 5, 6 所示。

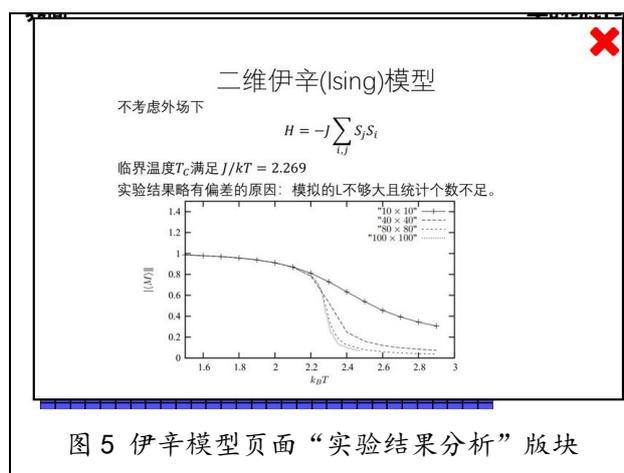


图 5 伊辛模型页面“实验结果分析”版块

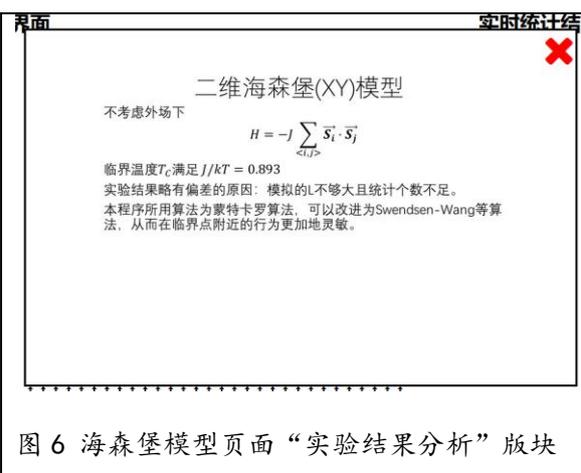


图 6 海森堡模型页面“实验结果分析”版块

对于二维伊辛模型，演示界面部分用蓝白方块分别表示该格点自旋向上或向下；而对于二维海森堡模型，演示界面则通过箭头的朝向来表示该格点的自旋方向。

实时统计结果所呈现的是当下及之前几个蒙特卡罗步时，体系的平均磁矩。该结果并不具备统计意义。函数图形中一个圆点代表某一蒙特卡罗步时体系的平均磁矩，其中，每 2 个点之间的蒙特卡罗步数间隔是根据菜单栏中设置的统计间隔给出的。

(2) 模拟结果的分析

从结果的准确性角度来看，该演示模型只能展示二维铁磁相变体系随温度的大体变化，临界点会产生一定的漂移。这可能是由于以下的原因造成的：

首先，是体系大小的影响。javascript 是一个基于浏览器内核，轻量级的编程语言，较难运行非常复杂、计算量很大的程序，为了保证演示程序的快速迭代与进

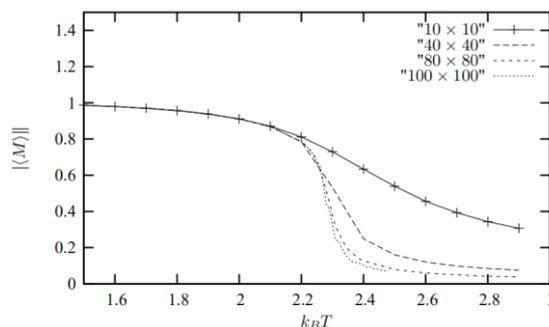


图 7 不同格点个数计算得到的体系平均磁矩随温度变化

行，这对于体系的总格点个数产生了一定的约束。并且为了保证模型的可视化，在有限的网页空间内，必须约束总格点的个数。而总格点个数较少则会导致临界温度的误差，图 7 展示了不同格点个数下对平均磁矩随温度变化的测量结果^[5]，可见，随体系格点个数的增加，临界温度逐渐趋于理论值。

其次，蒙特卡洛方法本身就具有临界慢化的缺点。临界慢化现象，指的是在临界温度附近，弛豫时间会发散，即在有限次数的蒙特卡罗步之后，前后体系仍然具有统计关联，从而抽样调查统计的结果无可信度。这是由于在临界点附近，蒙特卡罗方法会形成大量的磁畴结构，即在一定范围内，格点自旋的取向均是相同的。若根据蒙特卡罗方法，每一小步只翻转一个格点，而这些格点之中的任意一个自旋都较难翻转，从而导致磁畴结构不被破坏。进而导致前后体系统计关联。

(3) 程序可改进的方向：

在现有程序基础上，可以进行如下改进：对不同晶格，如六角晶格进行模拟；对不同模型进行模拟。比如考虑了施加外场，或者考虑了次近邻格点的作用等；由于蒙特卡罗方法的局限性，可以对算法进行改进，如采取 Wolff 集团算法、Swendsen-Wang 方法等；在本程序中，只对平均磁矩进行了统计，但也可以对更多的物理量进行统计，如总能量，热容等，从而能够更加直观地展示体系随温度的整体变化。

五、结论：

本程序利用了 HTML5 语言以及蒙特卡罗算法，展示了蒙特卡罗算法的具体步骤，并且对二维伊辛模型以及二维海森堡模型进行了可视化建模，并增加了人机互动部分，从而可以较为清晰、直观地看到二维铁磁相变时相关的热力学统计量随温度的大体变化，尤其是在临界点前后的急剧变化行为。虽然由于体系大小以及算法本身的局限性，存在着临界点误差较大以及临界慢化的弊端，但本演示程序依旧呈现了二维铁磁相变模型的主要性质。

六、参考文献：

- [1] 冉俊霞,代秀红,葛大勇,马明毅.基于 Html5 的跨平台光学积件库[J].物理通报,2018(11):16-18.
- [2] 闫慧仙,吴天刚,王祖源.基于 HTML5 Canvas 的跨平台物理模型构建[J].物理与工程,2014(S1):19-20+23.

- [3] 张志东.伊辛模型的研究进展简介[J].自然杂志,2008(02):94-98+101.
- [4] 林宗涵.热力学与统计物理学.北京:北京大学出版社, 2007, 465-477
- [5] Morten Hjorth-Jensen. Computational Physics. University of Oslo, 2007, 253