

二维伊辛模型自旋状态图样的蒙特卡罗模拟*

刘策军¹ 郑有因²

(1 华南农业大学基础部; 2 华南农业大学计算中心, 广州, 510642)

摘要 以 Metropolis 蒙特卡罗模拟方法考察了在 20×20 正方格子上的二维伊辛自旋模型, 得到了该模型不同温度下自旋状态的图样, 符合统计力学分析。

关键词 二维伊辛模型; 自旋状态; Metropolis 蒙特卡罗模拟

中图分类号 O414.13

伊辛自旋模型是一个十分重要的统计模型。理论上, 它是最先被严格求解并表明有相变存在的模型; 实验上, 它可用来描述铁磁体相变、格气、二元合金以及生物体中 DNA 的融化等 (Baxter, 1982; 北京大学物理系, 1987)。

蒙特卡罗模拟技术, 又叫计算机随机模拟, 近年来随着计算机的计算技术的发展在科学的不同领域得到广泛的应用 (裴鹿成等, 1980; 王式安等, 1992; 陆大经, 1986; 刘智华等, 1992; 陈联诚等, 1994)。而采用 Metropolis 抽样技术的蒙特卡罗方法则在统计物理研究中得到了广泛的应用 (Binder, 1986; 马文淦等, 1992; 杨清建, 1988)。

本文应用 Metropolis 蒙特卡罗模拟方法考察二维的伊辛模型, 得到该模型不同温度下自旋状态的模拟图样。图象符合统计理论的描述。

1 二维伊辛自旋模型

以正方格子为例说明二维伊辛自旋模型。图 1 为 4×4 二维正方格子上伊辛自旋模型自旋取向分布的一个状态, 或叫自旋组态 (Configuration)。每个自旋 S 只能取“向上”或“向下”两个方向, 分别以 S 等于 $+1$ 和 -1 值代表。这种只取两个值的变量统称为“伊辛变量”。

伊辛模型的哈密顿量为

$$H(S) = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (1)$$

(1) 式中 S_i 代表第 i 个格点位置的自旋, S_i 取值 $+1$ 或 -1 , 分别对应自旋取向上或向下。 $\sum_{\langle ij \rangle}$ 表示对一切可能的近邻自旋对 $\langle ij \rangle$ 求和。 J 为耦合常数, 我们考虑 $J > 0$ 的铁磁体情形。

设 L 表示所考虑的正方格子的线性大小, 其有 $N = L \times L$ 个伊辛自旋。这 N 个自旋在正方格子上一个取向的分布称为自

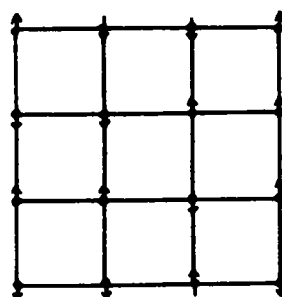


图 1 一个自旋组态图样

1995-02-28 收稿

* 校长基金资助课题研究的一部分。

旋状态(组态),即一个自旋状态记成

$$S=\{S_i\} \quad i=1, 2, \cdots, N \quad (2)$$

伊辛模型的统计力学分析给出的一个重要结论是:在平衡态下,(2)式自旋状态在低温下呈有序(Order)结构,当温度升高时,开始出现无序(Disorder)的扰动,但仍高度有序;当温度继续升高到一个叫临界温度(Critical temperature)值时,自旋组态呈无序状态;而在更高的温度下则呈高度无序结构。这里的温度以 KT/J 代表, T 为一般意义下的绝对温度, J 为耦合常数, K 为玻耳兹曼常数。临界温度则为

$$KT_c/J=2.269 \quad (3)$$

采用 Metropolis 抽样技术的蒙特卡罗方法,可以使一个随机的初始自旋状态,经过马尔可夫过程之后到达平衡态附近。这样,我们便可以利用该方法,模拟出平衡态时自旋状态的图样来,并与统计力学分析结果比较。

2 Metropolis 蒙特卡罗原理

2.1 模拟方法

在此叙述具体做法。详细原理和理论分析可参见文后文献。

首先,随机选取一个自旋状态,即初始组态($t=0$), S_0 ,然后构造一个马尔可夫链(Markov chains)。由前一个状态 S_i 通过一个适当的转移概率 $W(S_i \rightarrow S_{i+1})$ 过渡到后一个状态 S_{i+1} ,其中转移概率

$$W(S_i \rightarrow S_{i+1}) = \begin{cases} e^{-\frac{\Delta H}{KT}} & \Delta H > 0 \\ 1 & \Delta H \leq 0 \end{cases} \quad (4)$$

$$\Delta H = H(S_{i+1}) - H(S_i) \quad (5)$$

(4) 式和 (5) 式确定了马尔可夫过程进行的方向,即当前后状态的能量差 $\Delta H \leq 0$ 时,允许状态 S_i 转移到 S_{i+1} ;若 $\Delta H > 0$,则再通过以下规则判断

$$e^{-\frac{\Delta H}{KT}} \begin{cases} < Z(t) \\ \geq Z(t) \end{cases} \quad \begin{matrix} \text{不允许 } S_i \rightarrow S_{i+1} \\ \text{允许 } S_i \rightarrow S_{i+1} \end{matrix} \quad (6)$$

其中 $Z(t)$ 是 t 时刻所选的 0 与 1 之间均匀分布的随机数。(6) 式说明能量增加较少的状态允许,能量增加较多的状态不允许,判断标准是随机数 $Z(t)$ 。不断重复以上过程后,系统的状态则由初始状态出发随时间转移而向平衡态靠拢。

数学上可以证明,马尔可夫链经过上述的 t 步(t 较大)转移后,可认为体系从随机的初始状态出发最后到达平衡态。这样,我们便可据此模拟出平衡态自旋状态的图样来。

如何确定 t 的大小,理论上并没有解决。在实际计算中通常采用观察和经验来决定。一般地,系统愈大 t 越长。

2.2 计算中的几个细节问题

2.2.1 随机数 蒙特卡罗模拟结果好坏与随机数质量有直接关系。本工作在华南农业大学计算中心日产 FACOM M340S 中型机上进行,可应用该机为 FORTRAN 77 所配的 2 个随机数子例程序 RANU₂ 或 RANU₃,两个随机数序列均通过了随机性统计检验(吴文凤,1987)和实

实际问题计算的一检验(刘策军等, 1994)。

2.2.2 边界条件 本文采用通常的周期边界条件。

2.2.3 格点选取方法 N 个自旋的正方格子, 每一自旋格点按上述的 Metropolis 规则随机变化一次才构成马尔可夫链上一个环节, 即 t 增加一次(一个蒙特卡罗步, MCS) $S_i \rightarrow S_{i+1}$ 。可以随机选取格点, 也可以按有规则方式选取格点, 这对平衡态性质无影响。本文采用后一种方式, 从左到右, 从上至下依次选取格点, 称为一个 pass, 我们作一个子程序处理。

3 模拟结果和图样分析

本文取 20×20 大小的系统进行模拟。图 2 是在低温 $KT/J = 0.10$ 情况下, 从任意随机选取的初如状态($t=0$ 图样)出发, 自旋状态随步数 t 增大而转移的情况。为观察方便, 图中凡自旋向下自旋均以竖线“|”代表, 而向上自旋则没画出, 以空白表示。

图 2 使我们获得以下两点认识。

第一, 我们知道, 体系从一个任意的初始随机状态出发, 在向平衡态转移过程中, 体系的能量应不断降低并最后趋于平衡态极小值。这也正是 Metropolis 方法依据的原理。对本文伊辛模型, 从(1)式可知, 当相邻自旋同号(同时向上或向下)能量减小($-JS_i S_j < 0$), 相邻自旋异号(一个向上另一个向下)能量增加($-JS_i S_j > 0$)。在自旋体系由任意初始状态向平衡态转移的过程中, 相同方向的自旋聚合在一起, 将使能量降低最快(因此时自旋异号的相邻自旋仅限于向上方向自旋集团与向下方向自旋集团相交线上的自旋, 数量为最少)。图 2 的模拟图样恰好说明了这点: 在系统由初始状态转移到一定时间后, 如图 2 中的 $t=50$ MCS 时, 所有向上的自旋由 $t=0$ 时完全无序的分布转移为聚集一起(图 2 中空白区域), 并在转移到 80 MCS 时, 区域进一步减小(从而能量进一步降低), 最后到达 $t=100$ MCS 时的低温下自旋取向的完全有序态, 体系的能量达到最小值。

第二, 对 20×20 大小的系统, 由 $t=0$ 的初始状态转移到 $t=100$ MCS 后, 体系已到达了低温下统计力学分析应具有有序态。计算中显示(本文没画出来), 当状态继续随马尔可夫链转移到 $t=200$ MCS, 300 MCS, 500 MCS 时, 自旋组态均处于有序态。所以, 可认为体系由初始组态转移到 $t=100$ MCS 后, 体系到达了平衡态。此后的转移, 自旋状态则在平衡态分布附近涨落。

图 3 便是本文得到的几个不同温度下, 由图 2 中 $t=0$ 时刻随机的初始状态开始, 经过 $t=1000$ MCS 转移后(显然到达了平衡态), 系统自旋状态的蒙特卡罗模拟图样。由图 3 可

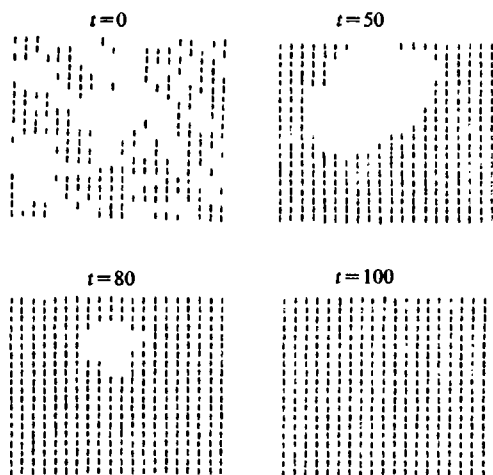


图 2 自旋状态随 t 转移情况

温度 $KT/J = 0.10$ 时, 20×20 方格子伊辛模型在不同时刻(t 以 MCS 为单位)的自旋状态图样。向下自旋以竖线表示, 向上自旋则不画出。

见,当温度为 $KT/J=1.0$ 时,系统仍保持极为有序的自旋组态;当温度升高到 $KT/J=1.6$ 时,出现了自旋向上的自旋(以箭头指明),自旋组态显示出无序的迹象;而当温度 $KT_c/J=2.269$ 时,即伊辛模型的临界温度时,自旋组态变得十分无序了,即发生了有序—无序相变(phase transition);而在高温 $KT/J=2.5$ 下,自旋状态图样已是完全无序情况。这种由低温度向高温变化过程中,伊辛模型自旋组态有序和无序特性的蒙特卡罗模拟图样,极为直观和形象,并符合该模型平衡态统计理论的分析。

最后指出,若期待获得该模型更精细的自旋组态图样,则应在更大的格子上进行,体系由初始态到达平衡态的转移时间以及整个模拟时间需相应延长。

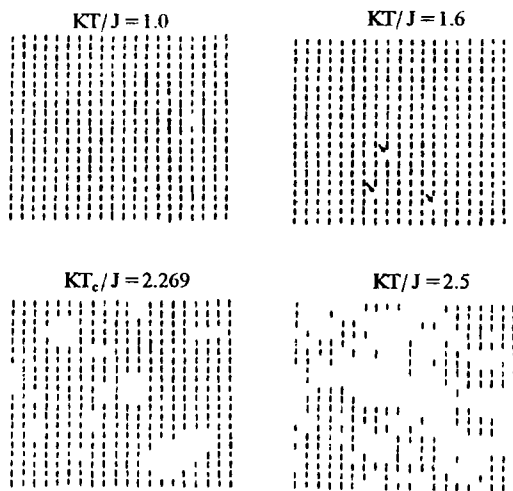


图3 转移时间 $t=1000$ MCS 时,不同温度下自旋状态图样

参考文献

- 马文淦,张子平.1992.计算物理学.合肥:中国科技大学出版社,1~94
- 王式安,徐 信,魏凤荣.1992.数量统计方法及应用模型.北京:科学技术出版社,939~945
- 北京大学物理系.1987.量子统计物理学.北京:北京大学出版社,312~407
- 刘智华,区晶莹.1992.德庆县松脂收购—贮存—加工系统模拟.华南农业大学学报,13(2):67~73
- 刘策军,胡嘉桢.1994.混合自旋模型的动力学相变.计算物理,11(4):439~443
- 吴文凤.1987.M340S 计算机随机数检验.四川大学学报,24(4):427~443
- 陆大猷.1986.随机过程及其应用.北京:清华大学出版社,38~101,117~219
- 陈联诚,区颖刚.1994.用计算机随机模拟方法研究水田土壤圆锥指数.华南农业大学学报,15(3):141~144
- 杨清建.1988.计算物理.上海:科学技术出版社,133~149
- 裴鹿成,张孝泽.1980.蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用.北京:科学出版社,1~45
- Baxter R J.1982.Exact Solved Models in Statistical Physics. London:Academic press,11~73
- Binder K.1986.Applications of the Monte Carlo Method in Statistical physics. 2nd ed. Berlin: Spring-Verlag, 16~68

SPIN CONFIGURATIONS OF THE TWO-DIMENSIONAL ISING MODEL IN MONTE CARLO SIMULATION

Liu Cejun¹ Zheng Youyin²

(1 Dept. of Basic Courses; 2 Computer Center, South China Agr. Univ., Guangzhou, 510642)

Abstract

Monte Carlo studies of the two-dimensional Ising model on 20×20 square lattice with periodic boundary conditions and nearest neighbor interactions are presented. The spin configurations of this model at various temperatures are obtained, consistent with the analyses of statistical mechanics.

Key words two-dimensional Ising model; spin configuration; Metropolis Monte Carlo Simulation