

模拟物理导论

凝聚态物质的数值模拟方法(II)

马红孺

<http://hongruma.net>

马尔可夫链Monte Carlo 取样的实现

马尔可夫链Monte Carlo 取样不直接使用 $P(X)$, 而是以某种方式取样, 大量的样本最终符合所需的分布.

马尔可夫链Monte Carlo利用转移矩阵 $W(x \rightarrow y)$, 从当前 x 生成一个状态 y .

马尔可夫链和Monte Carlo

马尔可夫链是一个简单的随机过程，给定转移矩阵 W ，可以得到平衡分布 P 。

马尔可夫链Monte Carlo 是马尔可夫链的计算机实现。在马尔可夫链Monte Carlo中， P 给定，我们需要寻找 W 使得 $P = PW$ 。

马尔可夫链的收敛条件(充分)

各态历经

$$W^n(X \rightarrow X') > 0$$

对所有 $n > n_{\max}$, 所有 X 和 X'

细致平衡

$$P(x_r)W(x_r \rightarrow x_s) = P(x_s)W(x_s \rightarrow x_r)$$

考虑很多个平行的Markov链，在一个给定的某一步，有 N_r 个链处于第 r 个态， N_s 个链处于第 s 个态。于是在下一步从 r 态到 s 态的数目为

$$N_{r \rightarrow s} = N_r W(x_r \rightarrow x_s)$$

从 s 态到 r 态的数目为

$$N_{s \rightarrow r} = N_s W(x_s \rightarrow x_r)$$

从 r 态到 s 态的净转移的数目为

$$\Delta N_{r \rightarrow s} = N_r W(x_s \rightarrow x_r) \left[\frac{W(x_r \rightarrow x_s)}{W(x_s \rightarrow x_r)} - \frac{N_s}{N_r} \right]$$

$$\Delta N_{r \rightarrow s} = N_r W(x_s \rightarrow x_r) \left[\frac{W(x_r \rightarrow x_s)}{w(x_s \rightarrow x_r)} - \frac{N_s}{N_r} \right]$$

若 $W(x_r \rightarrow x_s)$ 满足细致平衡条件，则上式成为

$$\Delta N_{r \rightarrow s} = N_r W(x_s \rightarrow x_r) \left[\frac{P(x_s)}{P(x_r)} - \frac{N_s}{N_r} \right]$$

这是一个十分重要的结果，上式表明，如果二个状态之间不满足分布 P ，则这一Markov过程的演化结果将总是使其趋于满足。这样，就证明了我们的论断。

Metropolis 算法 (1953)

Metropolis 算法取

$$W(x \rightarrow x') = T(x \rightarrow x') \min(1, P(x')/P(x)), \quad x \neq x'$$

T 为一个对称的转移矩阵

$$T(x \rightarrow x') = T(x' \rightarrow x)$$

The Paper (13300 citations from 1988 to 2011)

THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS

VOLUME 21, NUMBER 6

JUNE, 1953

Equation of State Calculations by Fast Computing Machines

NICHOLAS METROPOLIS, ARIANNA W. ROSENBLUTH, MARSHALL N. ROSENBLUTH, AND AUGUSTA H. TELLER,

Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, New Mexico

AND

EDWARD TELLER, * *Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois*

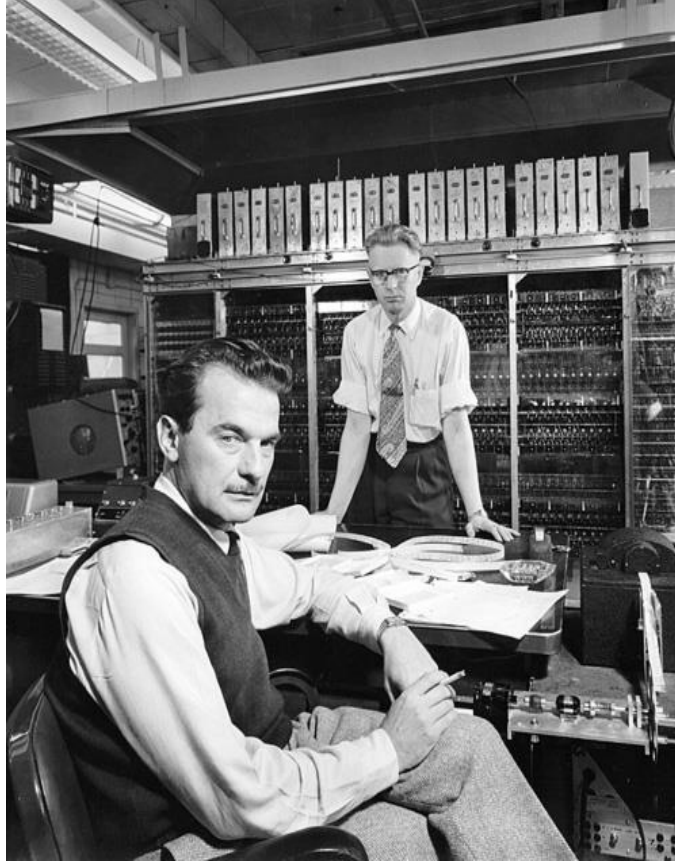
(Received March 6, 1953)

A general method, suitable for fast computing machines, for investigating such properties as equations of state for substances consisting of interacting individual molecules is described. The method consists of a modified Monte Carlo integration over configuration space. Results for the two-dimensional rigid-sphere system have been obtained on the Los Alamos MANIAC and are presented here. These results are compared to the free volume equation of state and to a four-term virial coefficient expansion.

The Calculation

- Number of particles $N = 224$
- Monte Carlo sweep ≈ 60
- Each sweep took 3 minutes on MANIAC
- Each data point took 5 hours

MANIAC the Computer and the Man



Seated is Nick
Metropolis, the
background is
the MANIAC
vacuum tube
computer

正则分布的抽样方法:

选择一个满足细致平衡条件的转移几率;
产生一个Markov链, 丢掉链的前面M个状态;
用其余状态进行物理量的计算.

考虑从r态到s态的转移, 若二状态的能量差为

$$\delta H \equiv H(x_s) - H(x_r)$$

则:

$$\frac{W(x_r \rightarrow x_s)}{W(x_s \rightarrow x_r)} = \exp[-\beta \delta H]$$

当年Metropolis 选择：

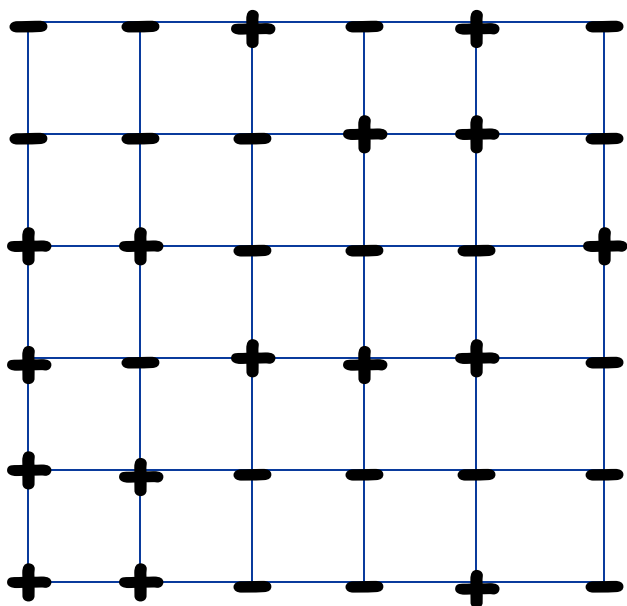
$$W(x_r \rightarrow x_s) = \begin{cases} \exp[-\beta\delta H] & \text{如果 } \delta H > 0 \\ 1 & \text{如果 } \delta H \leq 0 \end{cases}$$

目前常用的另一种选择是:

$$W(x_r \rightarrow x_s) = \frac{1}{2} \left[1 - \tanh \left(\frac{\beta \delta H}{2} \right) \right]$$

应当注意的是, w 的选择并不唯一, 只要满足细致平衡条件的要求即可, 但不同的 w 收敛速度往往差别很大, 如何选择合适的 w 以达到尽可能快的收敛速度和尽可能高的计算精度仍然是当前 Monte Carlo 算法研究的前沿课题之一.

The Ising Model



The energy of configuration s is

$$E(s) = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$$

where i and j run over a lattice, $\langle ij \rangle$ denotes nearest neighbors, $s = \pm 1$

$$s = \{s_1, s_2, \dots, s_i, \dots\}$$

例题, Ising模型的模拟

Ising 模型:

$$H = -J \sum_{nn} s_i s_j - h \sum_i s_i$$

式中J称为交换积分, h为外场, s_i 可取值(1, -1), 称为自旋变量. Ising 模型是最简单的非平庸统计物理模型, 它是由德国物理学家 Lenz 在二十年代提出的, 这一模型可用来描述单轴各向异性磁性系统, 合金等物理体系, 同时也是一个十分有兴趣的理论模型.

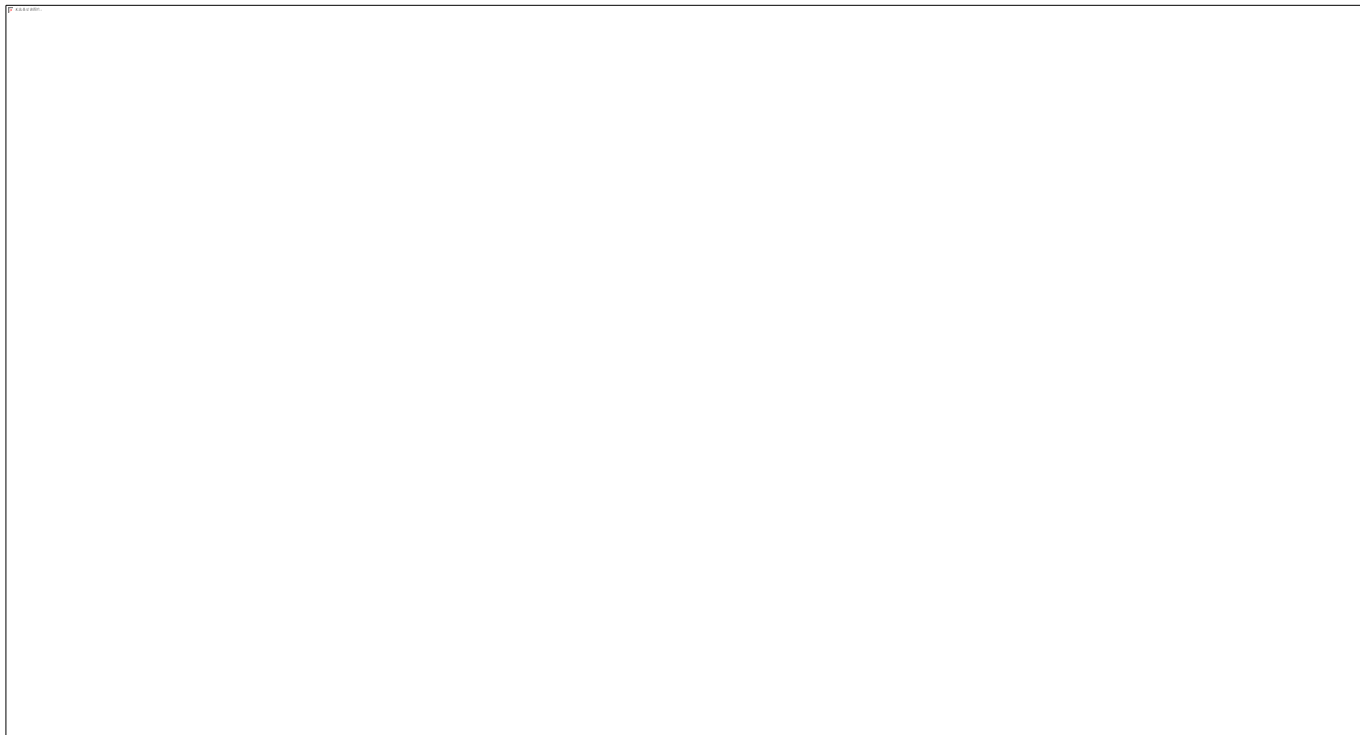
例题, Ising模型的模拟

Ising 最早给出了这一模型在一维情况下的严格解, 证明了在一维下这一模型不存在相变. Onsager 于1944 年做出了零场下这一模型在二维空间的严格解并计算了它的相变温度, 比热在相变点的行为等热力学量. 杨振宁在1952 年解出了外场很小时二维空间的 Ising 模型, 求出了序参量的临界行为.

由于对这一模型的很多形为目前了解的比较透彻, 因此它经常被用来做为检验各种数值方法或解析近似方法的标准.

1969年, A. E. Ferdinand和M. E. Fisher求得了有限尺寸2D Ising 模型在周期性边界条件下的严格解, 成为检验模拟结果的一个有效标准。

感兴趣的物理量



4. 磁化率

$$k_B T \chi = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2$$

5. Binder 4 阶累积量

$$U = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2}$$

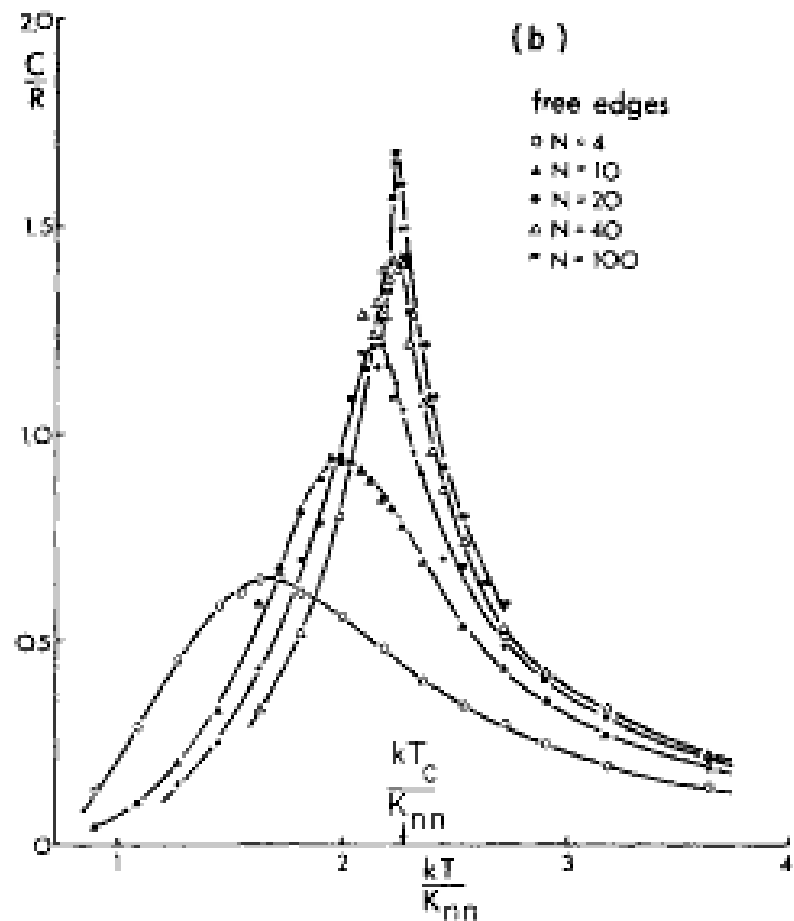
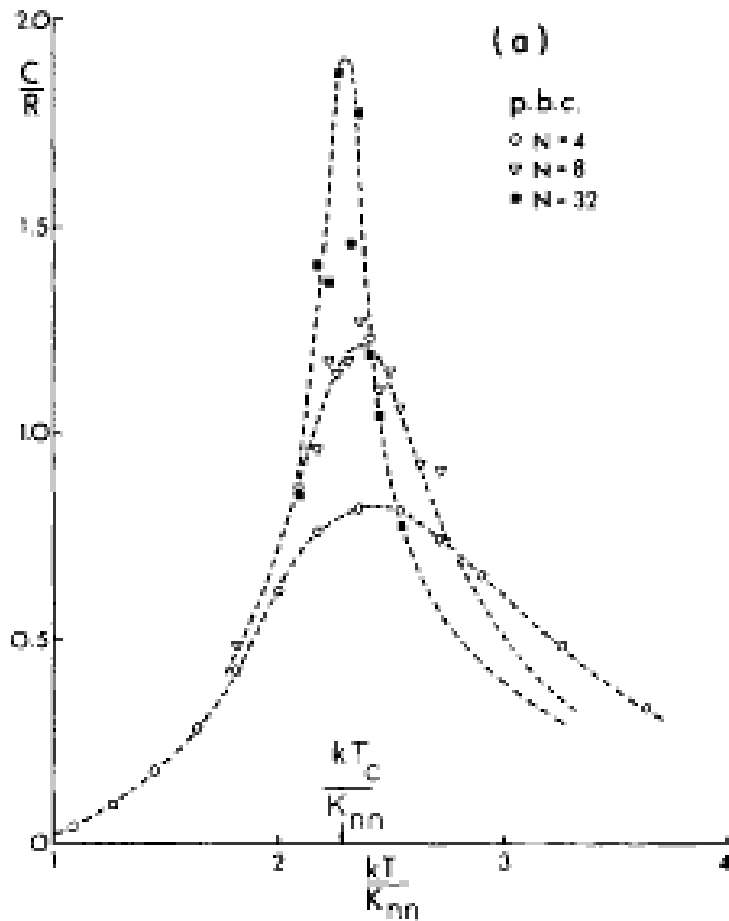
6. 自旋相关函数

$$\langle s_i s_j \rangle$$

7. 时间相关函数

$$\langle E(t') E(t' + t) \rangle$$

2D Ising 模型的比热



From D P Landau, Phys Rev B 13 (1976) 2997.


```

void monte_carlo( )
{
    int i, j, k, e;          /* i is the center site */
    int nn[Z];              /* the name neighbors */

    for(k = 0; k < N; ++k) {
        i = r250( ) * (double) N; /* pick site at random */
        neighbor(i, nn);          /* find neighbors of site i */
        for(e = 0, j = 0; j < Z; ++j) /* go over the neighbors */
            e += s[nn[j]];        /* sum of the neighbor spins */
            e *= 2 * s[i];        /* 2 times the center spin */
            if (e <= 0)           /* when energy change is less */
                s[i] = - s[i];   /* than zero, spin is flipped */
            else if (r250( ) < exp(-e/T)) /* otherwise, it is flipped */
                s[i] = - s[i];   /* with probability less one */
    }
}

```

```

void neighbor(int i, int nn[ ])
{
    int j, r, p, q;

    r = i;
    p = 1 - L;
    q = 1;

    for(j = 0; j < Z; j += 2) {
        nn[j] = (r + 1) % L == 0 ? i + p : i + q;
        nn[j+1] = r % L == 0 ? i - p : i - q;
        r = r/L;
        p *= L;
        q *= L;
    }
}

```

```
void energy(double *e)
{
    int i, j, ie = 0;
    int nn[Z];

    for(i = 0; i < N; ++i) {
        neighbor(i, nn);
        for(j = 0; j < Z; j += 2) /* look at positive direction only */
            ie += s[i]*s[nn[j]];
    }
    assert(ie <= 2*N && ie >= -2*N);
    *e += ie;
}
```



```
void main( )
{
    int i, mc;
    double e = 0;

    for (i = 0; i < N; ++i)    /* initialize, all spin up */
        s[i] = 1;

    for(mc = 0; mc < MCTOT; ++ mc) {
        monte_carlo();
        if( mc >= MCDIS)
            energy(&e);
    }
    printf("<e> = %f\n", e/(MCTOT-MCDIS)/N);
}
```

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <assert.h>

                /* macro definitions */
#define L 16                /* lattice linear size */
#define N (L*L)            /* total number of spins */
#define Z 4                /* coordination number = 2*d */
#define MCTOT 1000        /* total Monte Carlo steps */
#define MCDIS 500         /* steps discarded in the beginning */

                /* global variables */
int s[N];                /* spin +1 or -1 */
double T = 2.269;        /* temperature */

                /* function prototypes */
void neighbor(int i, int nn[ ]);
void monte_carlo();
void energy(double *);

```

练习： 对于一个 $L \times L$ 的无外场二维Ising模型：
写出产生初始位形的程序段；
写出自旋翻转的程序段；
写出处理周期性边界条件的程序段
联合上述程序段，取 $L = 16$ ，从初始位形开始计算2000MCS，记录每一步的能量和序参量，观察这两个量的平均值的演化。

讨论:

关于每一步要翻转的格点*i*的选择, 一般来说可有很多种不同的方法, 最常用的有两种, 一种是**顺序取每一个格点**, 另一种是**随机的选取**. 在随机选取时, 应使每个格点平均说来被访问的次数相同, 通常每个格点被访问一次称为一个 Monte Carlo 步(Monte Carlo Step or MCS), 一次有价值的计算通常需要做几千或几万个MCS. 有时, 为了得到高精度的结果, 甚至要作百万MCS以上的计算.

由于每一个状态与其前导状态最多相差一个自旋翻转, 因而其物理性质具有很强的关联. 这样, 上述过程的第6步不必对每次自旋都进行, 而是每间隔一个或数个MCS(视问题的关联时间的大小)进行一次. 另外, 如在前面已经指出过的, 前面若干个MCS应舍弃.

计算能量差是最费时的工作, 对于Ising 模型, 由于能量差只能取很少几个数值, 我们可以预先算好存起来以节省计算量. 这一技巧不仅适用于Ising 模型, 也适用于其它分立变量的模型如 Potts 模型等.

模拟技术细节

为了模拟Ising 模型:

☺ 要确定一个晶格和晶格的尺寸.

例如, 我们可以取一个简单立方格子, 取三个方向的大小均为 L ;

其它取法包括FCC, BCC, 金刚石结构, 六角密堆结构等.

模拟的盒子可以取为立方体, 也可以取其它形状, 如各种多面体; 如果利用周期性边界条件, 则对盒子的形状有限制 - - 盒子的周期性排列应该能够填满整个空间。

模拟技术细节

☺ 要指定一个初始位形.

在临界温度之下进行计算, 取所有自旋沿同一方向为初始位形.

在临界温度之下的平衡位形是有序的, 若从一无序位形出发, 系统在演变中将形成若干个有序的区域, 相邻区域的边界上将出现畴壁. (畴壁具有一定的能量, 是一种拓扑性缺陷, 在周期性边界条件下很难通过长时间的模拟消除) .

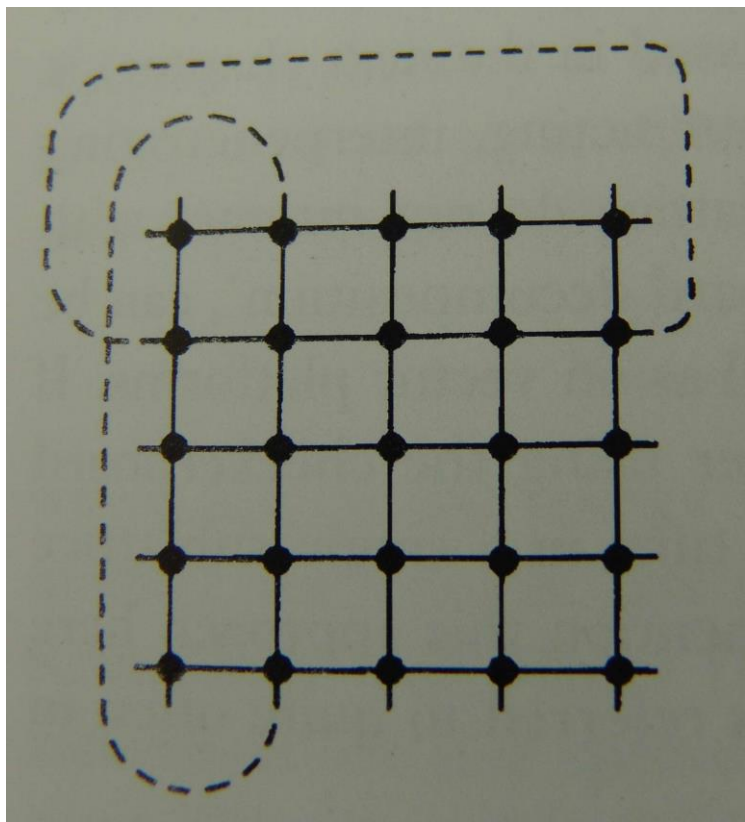
☺ 要指定一个初始位形.

如果计算的目的是为了研究畴壁, 则必须从一自旋取向为随机分布的初始位形出发; 或直接产生畴壁, 研究其性质。

在临界温度之上进行计算, 取随机分布的自旋取向为初始位形或取所有自旋沿同一方向为初始位形.

模拟技术细节

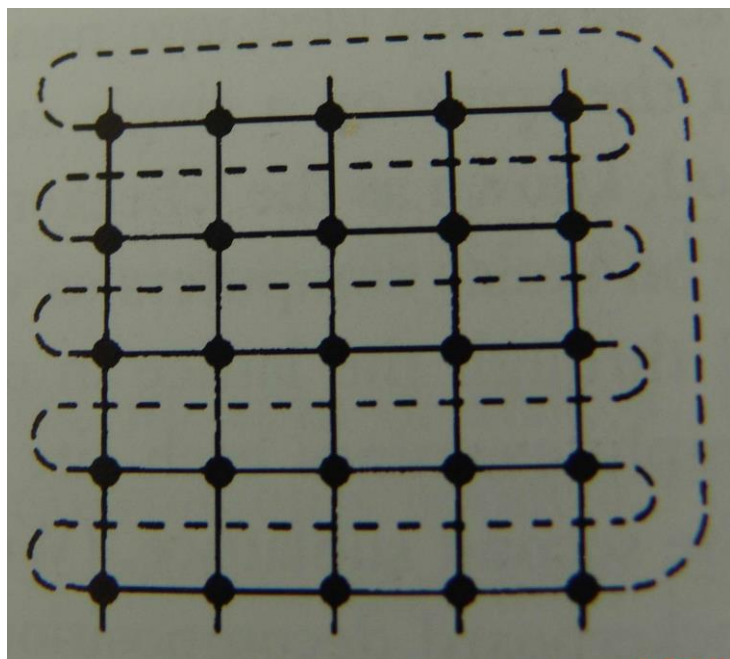
☺ 要确定适当的边界条件



因为计算总是对有限大小的系统进行的, 选择合适的**边界条件**对于得到好的结果是十分重要的, 如果我们感兴趣的是系统的体性质, 则应尽量消除边界的影响, 此时一般取周期性边界条件, 即在每个方向上, 取 $s_{L+1}=s_1$.

模拟技术细节

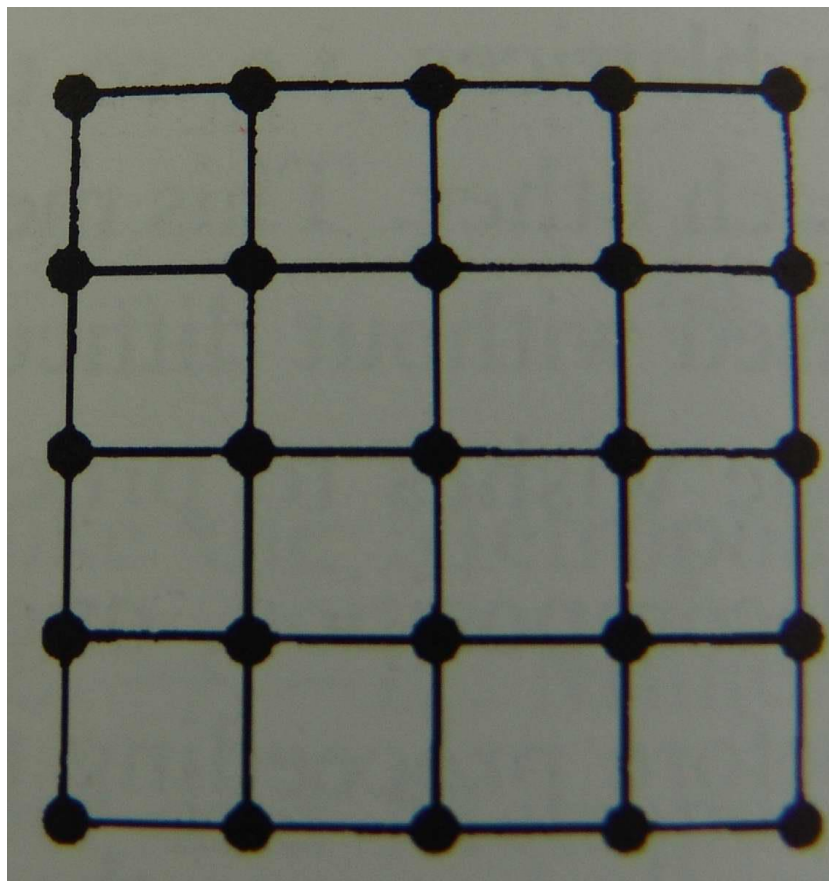
☺ 要确定适当的边界条件



周期性边界条件对于写并行计算的程序不太方便, 而并行计算是当前计算机发展的一个重要方向, 因此, 另一种称为螺旋周期边界条件得到了较多的应用, 以二维正方格子为例, 这种边界条件是让每一行的最后一个自旋与其下一行的第一个自旋相同.

其它边界条件:

自由边界条件



自由边界条件+周期性边界条件

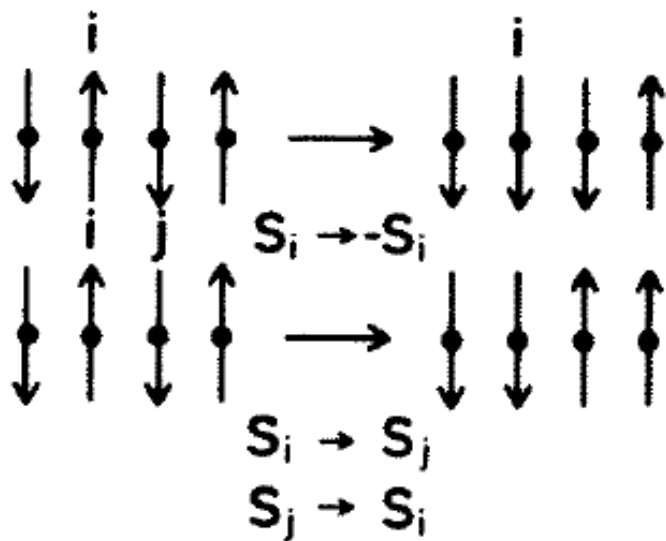
平均场边界条件

固定和部分固定边界条件

反周期边界条件(用于界面的研究)

模拟技术细节

● 选取产生一系列状态的方式.



一般来说, Markov 链中的每一个状态与其前一个状态相差应较小, 因为如果两个状态相差过大, 其能量差亦较大, 从而转移几率太小, 计算很容易陷入相空间中初态附近一个很小的子空间内.

模拟技术细节

● 选取产生一系列状态的方式.

通常有两种作法, **一种是一次翻转一个自旋**, 这是一种不保持总自旋守恒的计算, 另一种是 **每次交换一对相邻自旋**, 这种计算将保持总自旋守恒.

模拟技术细节

讨论:

在随机选取时, 应使每个格点平均说来被访问的次数相同. 通常格子上每个格点平均都被访问一次称为一个 Monte Carlo 步(Monte Carlo Step or MCS), 例如对于 $N=L \times L \times L$ 的格子, 可以把自旋翻转 N 次做为一个MCS. 一次有价值的计算通常需要做几千或几万个MCS. 有时, 为了得到高精度的结果, 甚至要作百万MCS以上的计算.

模拟技术细节

讨论:

关于每一步要翻转的格点 i 的选择, 一般来说可有很多种不同的方法, 最常用的有两种, 一种是**顺序取每一个格点**, 另一种是**随机的选取**.

模拟技术细节

讨论:

由于每一个状态与其前导状态最多相差一个自旋翻转, 因而其物理性质具有很强的关联. 这样, 上述过程的第6步不必对每次自旋都进行, 而是每间隔一个或数个MCS(视问题的关联时间的大小)进行一次. 另外, 如在前面已经指出过的, 前面若干个MCS应舍弃.

模拟技术细节

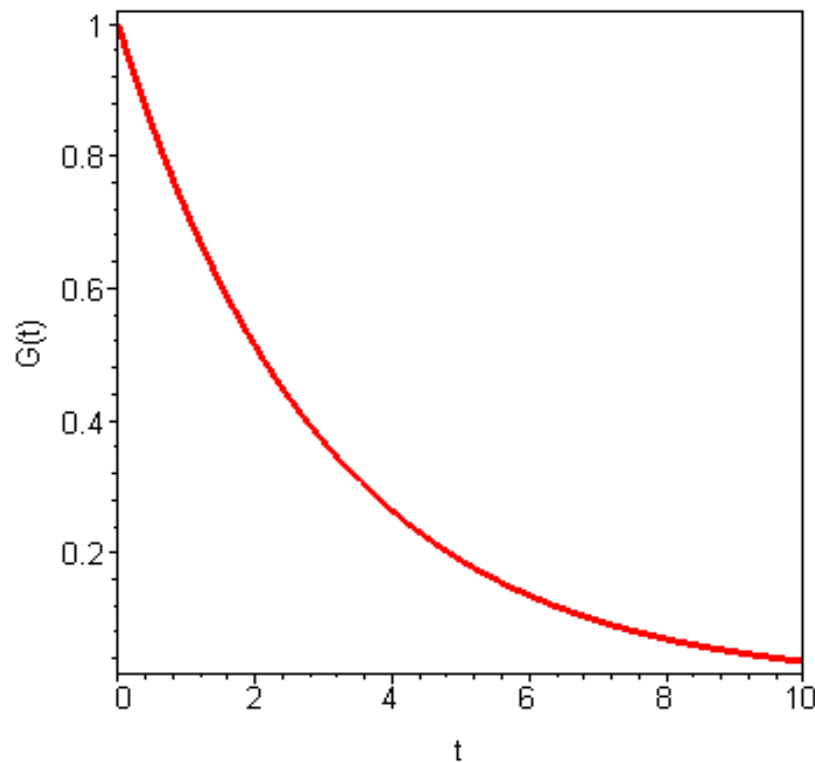
讨论:

每隔多少MCS取一次样的问题是由状态的关联决定的, 考虑物理量A, 并计算A的关联函数

$$G(t) = \frac{\langle A(t)A(0) \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

模拟技术细节

$G(t)$ 一般是指指数衰减的, 如图所示. t 的单位是MCS. 由于先后状态的关联, 可以导致误差估计的偏小, 可以证明, 如果 $G(t)$ 的衰减时间为 τ , 则实际误差与计算得到的误差估计差一个因子.



模拟技术细节

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{M} [\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2] \left(1 + \frac{2\tau}{\delta t} \right)$$

δt 为取样间隔, 只有当 $\delta t \gg \tau$ 时, 修正因子才为 1, 当 $\delta t \sim 2\tau$ 时, 修正因子为 2. τ 一般为 2--3 个 MCS.

模拟技术细节

计算能量差是最费时的工作, 对于Ising 模型, 由于能量差只能取很少几个数值, 我们可以预先算好存起来以节省计算量. 这一技巧不仅适用于Ising 模型, 也适用于其它分立变量的模型如 Potts 模型等.

例子，对于正方格子上的Ising模型，每个自旋(设为 s_0)有四个近邻，设为 s_1, s_2, s_3, s_4 ，则 s_0 与近邻的相互作用能量为：

$$E_0 = -Js_0(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)$$

翻转一个自旋(S_0)可能的能量差为

$$\delta E_0 = 2Js_0(s_1 + s_2 + s_3 + s_4)$$

s_0 是翻转前的自旋值，于是

$$\delta E_0 = 8J, \quad 4J, \quad 0, \quad -4J, \quad -8J$$

求出 E_0 和 $\exp(-\beta E_0)$ 的几个数值
保存在数组中
需要时查表
可以节省很多计算时间.

其它常用的模型：

Potts 模型：

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

其中的求和对近邻格点对进行。 σ_i 可以取值 1, 2, \dots , q , 当 $q = 2$ 时, 对应于Ising模型。对于二维晶格, $q < 5$ 时, 系统具有二级相变, 当 $q \geq 5$ 时, 系统具有一级相变。对于三维晶格, 当 $q \geq 3$ 时为一级相变。

其它常用的模型：

在转变的 q 处 ($q = 3(3D)$, $q = 5(2D)$), 是非常弱的一级相变, 通过模拟很难与二级相变区分。Potts模型描述了从二级相变到弱一级相变再到强一级相变的各种情况, 是验证各种理论方法和模拟方法的试验模型。

Potts 模型的模拟方式与Ising模型非常相似。代替自旋的翻转, 可以在 $q - 1$ 个态中随机取一个。

Heisenberg类模型:

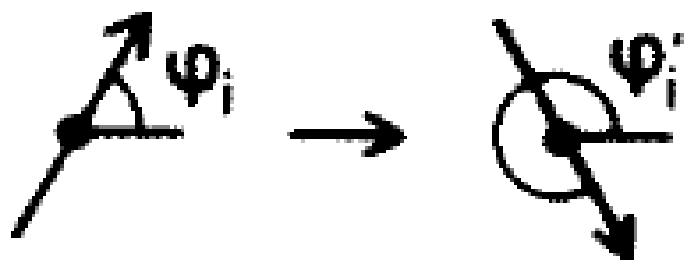
$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j$$

S_i 是一个定义在格点上的单位矢量，一般有三个分量，最早由Heisenberg提出以描述铁磁性(原始的Heisenberg模型中 S_i 是自旋算符)。如果把自旋限制在平面上， S_i 只有二个分量，这样的模型称为XY模型，在二维XY模型中发现了很多非常有趣的物理现象。如果把此模型做一推广，使得 S_i 有 n 个分量，则成为所谓的 n -矢量模型，当 $n \rightarrow \infty$ 时，成为球模型，而当 $n \rightarrow 0$ 时，可以用来描述高分子链的相变等问题。

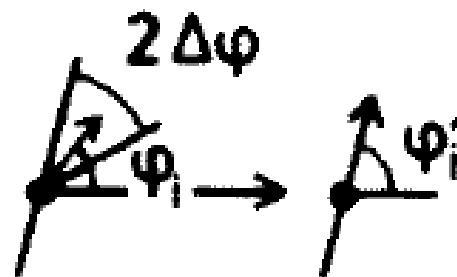
模拟技术细节

XY模型的update方法:

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - H_x \sum_i S_i^x \quad (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1$$



$$\varphi_i \rightarrow \varphi_i' = 2\pi\zeta$$



$$\varphi_i \rightarrow \varphi_i' = \varphi_i + \Delta\varphi (2\zeta - 1)$$

还有一些有趣的模型，如

有次近邻的Ising 模型：

$$H = -J_1 \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - J_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} S_i S_j$$

自旋玻璃模型：

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j$$

J_{ij} 随机取值。

等等 。

模拟技术细节

一些典型的数字：

趋向平衡： $5 \times 10^3 - 5 \times 10^5$ MCS.

取样平均： $10^3 - 10^8$ MCS.

Ising模型的格点数： $L \times L \times L$, $L = 10 - 2000$.

粒子模型，粒子数： $N = 10^2 - 10^8$.

$$E_0 = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j, \quad E_t = 0$$

$$S_0 = \sum_i s_i, \quad S_t = 0$$

$$E_n = E_{n-1} + \delta E \quad E_t = E_t + E_n$$

$$\langle E_n \rangle = \frac{1}{n} E_t$$

$$S_n = S_{n-1} + \delta S \quad S_t = S_t + S_n$$

$$\langle S_n \rangle = \frac{1}{n} S_t$$

有限尺寸标度与相变

涨落：

$$\begin{aligned}\langle \Delta A^2 \rangle &\equiv \langle (A(x) - \langle A \rangle)^2 \rangle \\ &= \int dx (A(x) - \langle A \rangle)^2 P(x) \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2\end{aligned}$$

$\langle \Delta A^2 \rangle$ 通常与某种响应函数相联系：涨落耗散定理！
若 $A(x)$ 为系统的哈密顿量，则平均每个粒子的能量 $\langle E \rangle$ 为：

$$\langle E \rangle \equiv \frac{1}{N} \langle H(x) \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Q}{\partial \beta}$$

有限尺寸标度与相变

比热是一个强度量,

$$c = \frac{N}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$$

由此可以推断:

$$(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \propto \frac{1}{N} \rightarrow 0 \quad (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) \propto N$$

自平均效应. 当系统的尺度趋于无限时, 其涨落趋于0!

$$\langle \Delta E^2 \rangle = (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = \frac{k_B T^2}{N} c$$

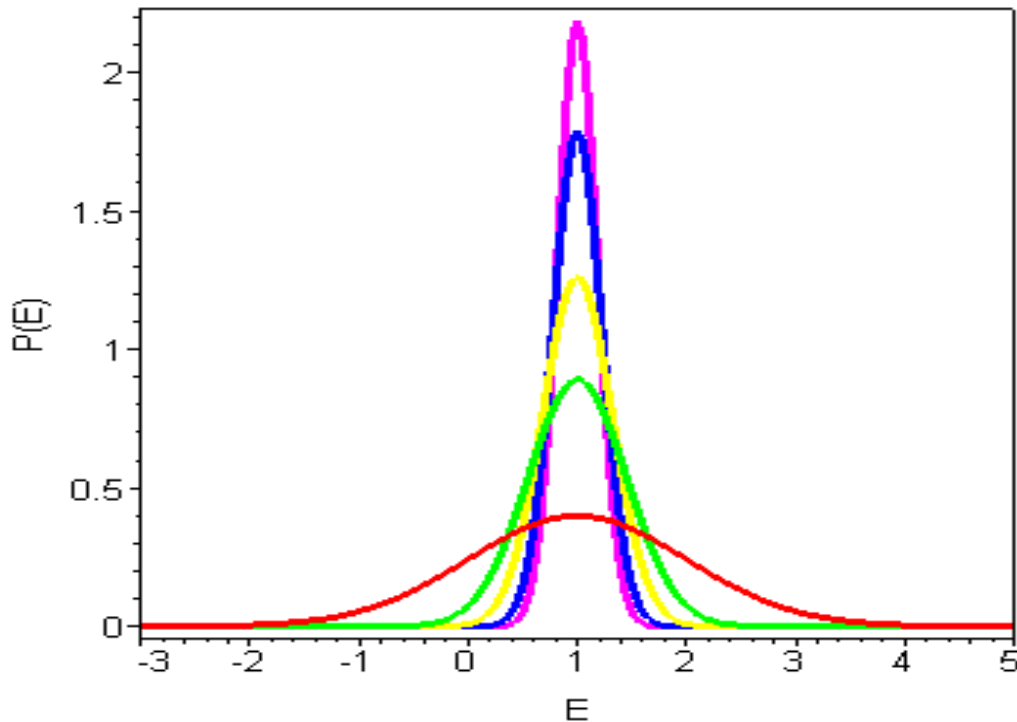
有限尺寸标度与相变

这实际上是中心极限定理的一个结果. 考虑把系统分成一些小的系统, 小系统之间的相互作用可以忽略时(这总可以做到?!), 就是一系列独立, 同分布的样本, 从而中心极限定理成立.

有限尺寸标度与相变

由此，能量的分布可以写为：

$$P(E) = \left(\frac{N}{2\pi c k_B T^2} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{(E - \langle E \rangle)^2}{2k_B T^2 c} N \right\}$$



$P(E)$,

$N = 1, 5, 10, 20, 30$

$\langle E \rangle = 1$

$K_B T^2 c = 1$

分布宽度 $1/\sqrt{N}$

有限尺寸标度与相变

Ising 模型:
$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

平均磁化:
$$M(T, h) = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i S_i \right\rangle \equiv \langle S \rangle$$

自发磁化:
$$M_{\text{sp}}(T, h = 0) = \lim_{h \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} M(T, h)$$

注意求极限的顺序!!

有限尺寸标度与相变

由于Ising模型的哈密顿量在 $h = 0$ 时具有 $s_i \leftrightarrow -s_i$ 的对称性，所以，

$$\langle S_i \rangle = 0$$

如果先取 $h = 0$ ，则得不到自发磁化。自发磁化是热力学极限下的产物，由各态历经破坏而得到。

有限尺寸标度与相变

由于

$$M = \sum_{\{S_i\}} \left(\frac{1}{N} \sum_i S_i \right) \frac{\exp\{-\beta H\}}{Q}$$

磁化率：

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial h} = \beta N \left\langle (S - M)^2 \right\rangle$$

有限尺寸标度与相变

由此：

$$\langle \Delta S^2 \rangle = \frac{k_B T \chi}{N}$$

基于在讨论能量时的同样的分析，我们得到序参量（磁化）的分布。

$$P(S) = \left(\frac{N}{2\pi k_B T \chi} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{(S - M)^2}{2k_B T \chi} N \right\}$$

有限尺寸标度与相变

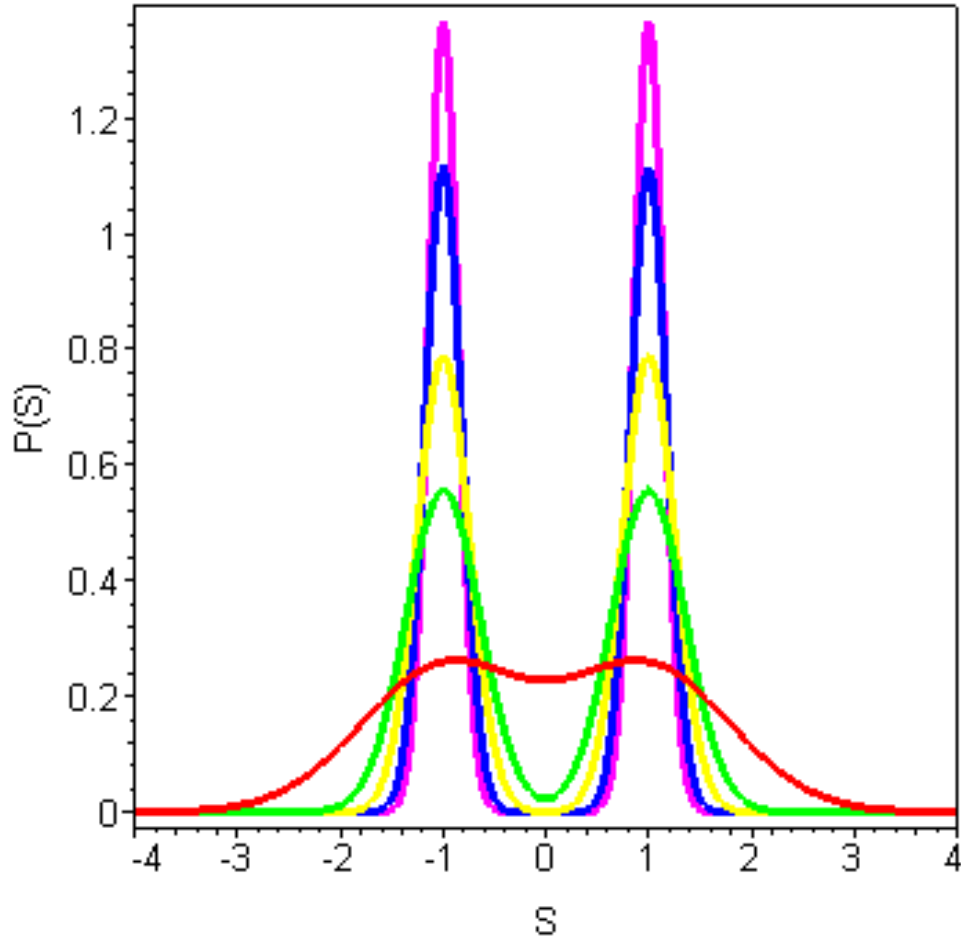
当 $h = 0$ 时，由于对称性， M 和 $-M$ 是对称的。在临界温度以上， $M = 0$ ，所以

$$P(S) = \left(\frac{N}{2\pi k_B T \chi} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{S^2}{2k_B T \chi} N \right\}$$

当 $T < T_C$ 时，为了反映这种对称性，分布函数写为：

$$P(S) = \left(\frac{N}{2\pi k_B T \chi} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{(S - M)^2}{2k_B T \chi} N \right\} + \frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{(S + M)^2}{2k_B T \chi} N \right\} \right]$$

有限尺寸标度与相变



$$P(S),$$
$$N = 1, 5, 10, 20, 30$$
$$\langle S \rangle = 0.8$$
$$K_B T \chi = 1$$

有限尺寸标度与相变

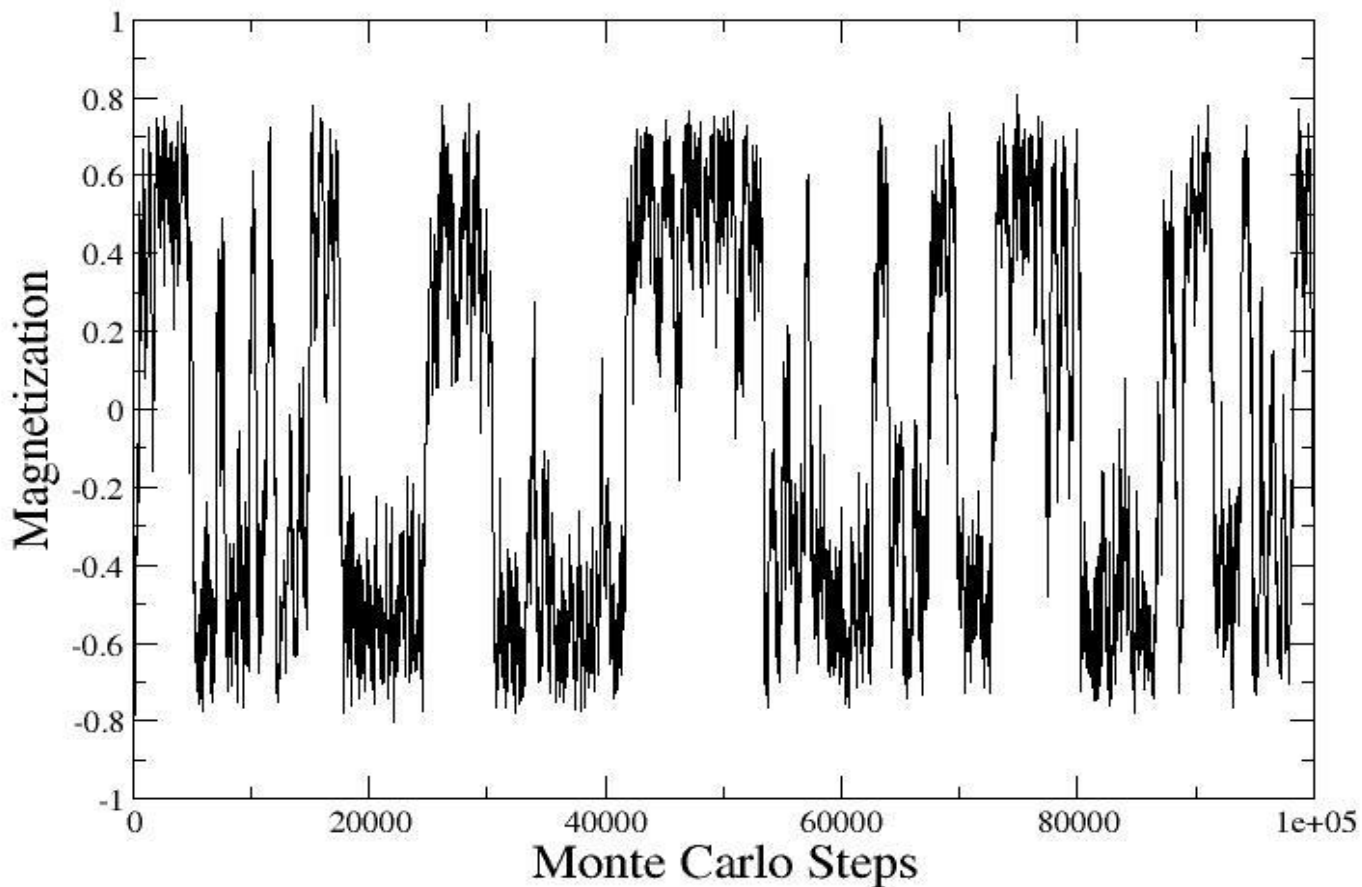
如何计算序参量?

注意到前面的分析, 对于有限系统, 如果直接计算 $\langle S \rangle$, 则在任何温度都得到的是0!!

注意到自平均效应, 有下述结果:

$$M_{\text{sp}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle |S| \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sqrt{\langle |S^2| \rangle}$$

可以使用上述任何一种进行计算, 然后外推到 $N \rightarrow \infty$.



磁化随MCS的变化，有限系统的各态历经演示。
2D Ising 模型， $L=64$

有限尺寸标度与相变

相变点会发生什么？

在二级相变点(现一般称为临界点, 二级相变也称为连续相变), 系统的比热, 磁化率等物理量发散, 发散的根源在于相关长度发散. 这样, 前面的分析将不再成立.

在临界点, 热力学量具有很有趣的标度行为: 以单轴各向异性磁体为例(理论上近似以Ising模型描述). 在 $T \neq T_c$ 时, 引进约化温度:

$$t = \frac{T - T_c}{T_c}$$

有限尺寸标度与相变

比热： $c \propto |t|^{-\alpha}$

磁化率： $\chi \propto |t|^{-\gamma}$

自发磁化： $M_{\text{sp}} \propto (-t)^\beta$

关联长度： $\xi \propto |t|^{-\nu}$

当 $t = 0$ 时，磁化与外场之间有：

$$M \propto h^{1/\delta}$$

有限尺寸标度与相变

α , β , γ , δ , ν 称为临界指数, 是反映临界点本质的量. 这些指数的来源与关联长度的发散有关. 还有一个指数 η , 这里不做介绍.

当系统有限时, 不会有发散! Monte Carlo只能计算有限体系, 如何从Monte Carlo计算获得相变和临界现象的信息?

有限尺寸标度与相变

如何找临界点？

如何算临界指数？

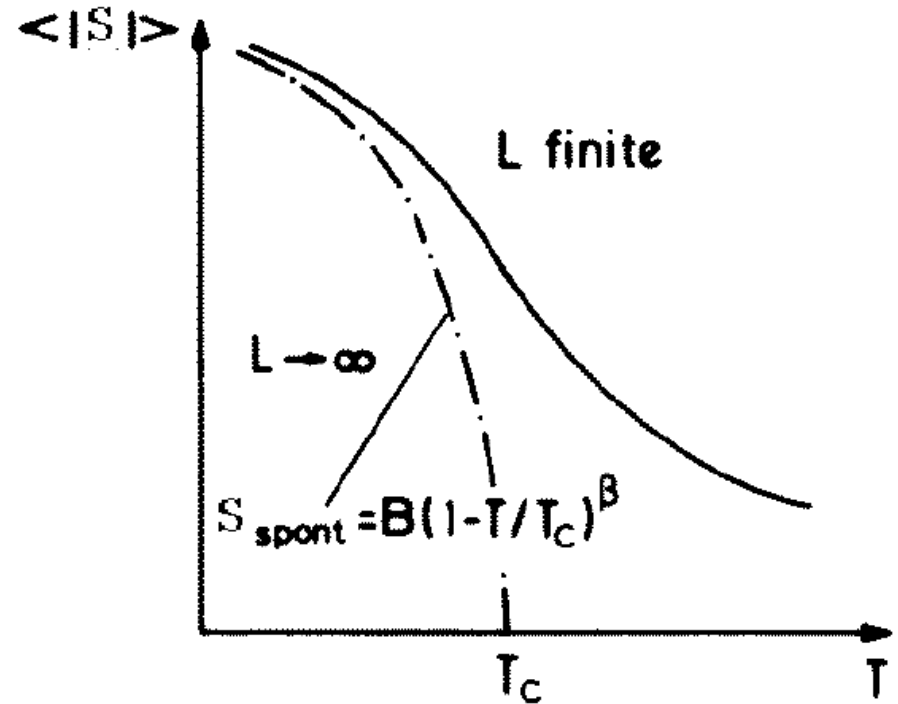
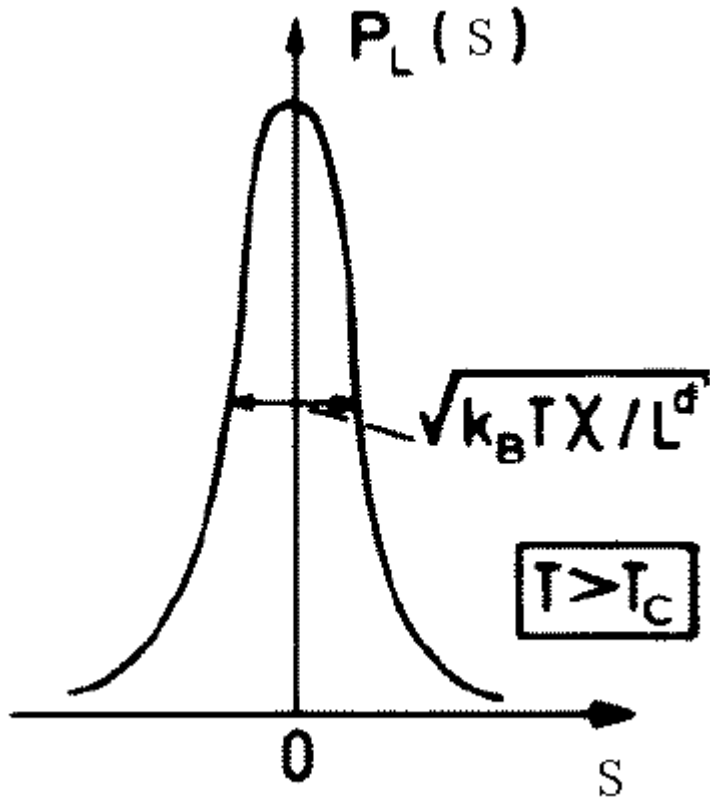
为此，我们考虑有限体系的标度理论。

$$N \equiv L^d$$

基本出发点： 设有限系统的线度为 L ， 则关联长度最多为 L ， $\xi < L$ ；

发散的物理量不再发散， 而是宽度为 ΔT 的峰。

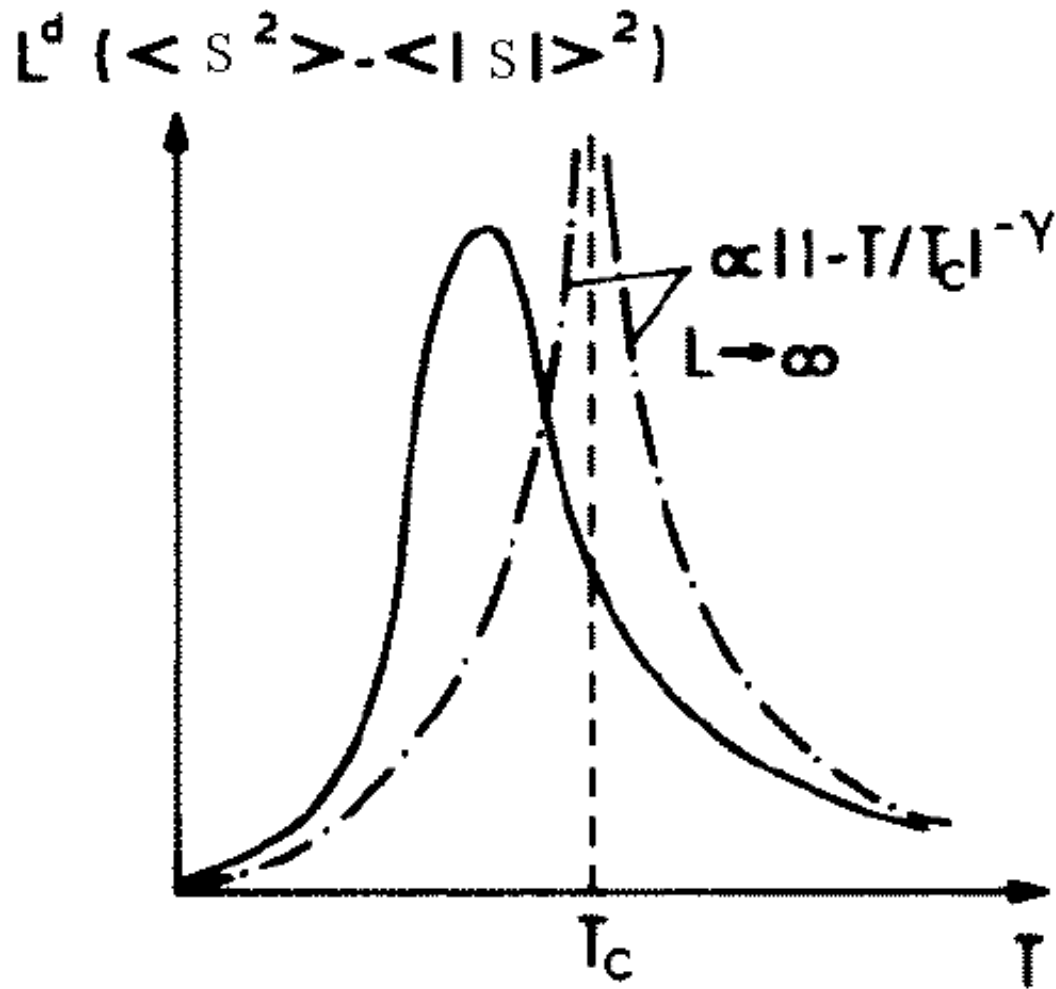
有限尺寸标度与相变



$T > T_C$ 时的序参量分布

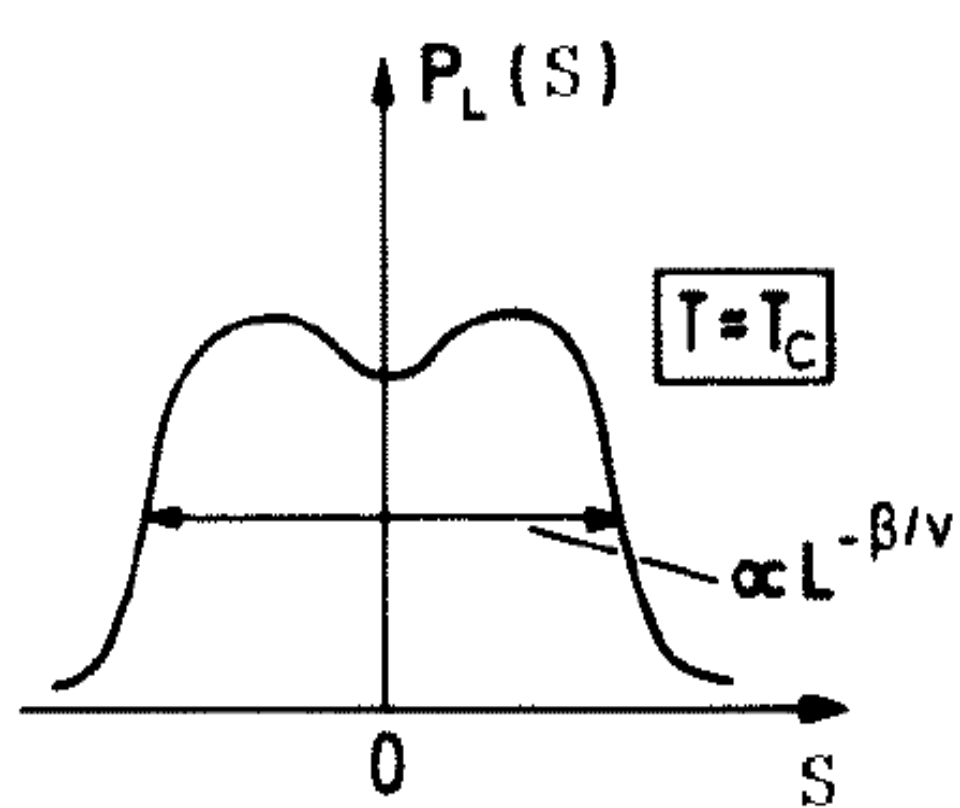
序参量的有限尺寸效应

有限尺寸标度与相变

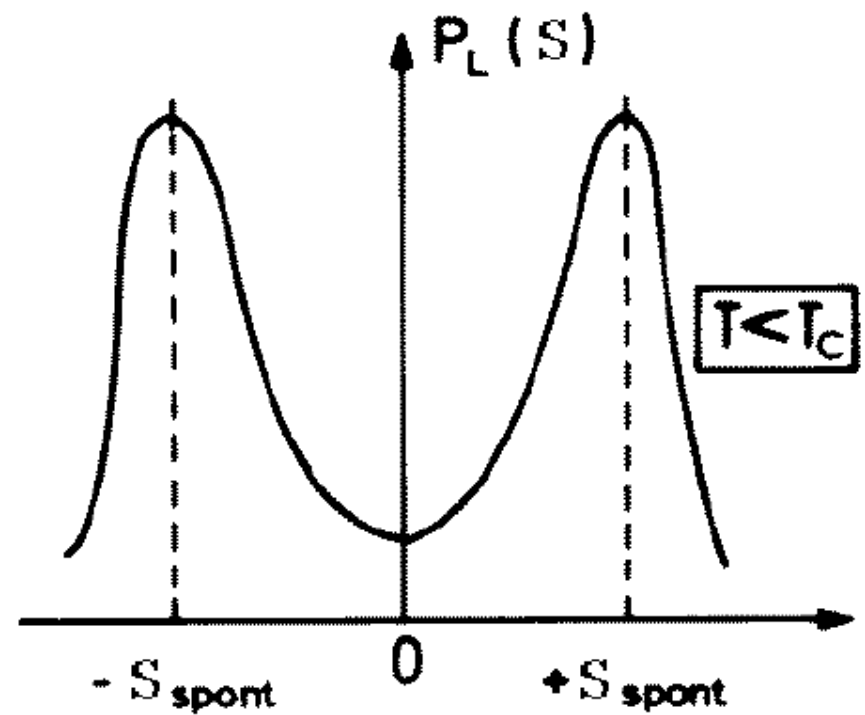


磁化率的有限尺寸效应

有限尺寸标度与相变



$T \approx T_C$ 时的序参量分布



$T < T_C$ 时的序参量分布

有限尺寸标度与相变

考虑磁化率：在临界点附近有一个峰，最高处的温度定义为有限系统的临界温度 $T_C(L)$ ，峰宽为 ΔT 。

当 $L \rightarrow \infty$ 时， $T_C(L) \rightarrow T_C(\infty)$ ， $\Delta T \rightarrow 0$

假定：

$$\Delta T \propto L^{-\Theta}, \quad T_c(L) - T_c(\infty) \propto L^{-\lambda}$$

有限尺寸标度与相变

磁化率的极大值:

$$\chi_{\max} \propto \chi(L, T_c(L)) \propto L^{\gamma_c}$$

磁化在 $T_c(L)$ 不为0, 而是:

$$M(L, T_c(L)) \propto L^{-\beta_c}$$

Fisher 假定: 在临界点只有一个重要的特征长度, 即关联长度.

有限尺寸标度与相变

由于 $\xi \propto |t|^{-\nu}$, 磁化率峰的宽度对应于 $\xi \sim L$, 于是

$$\Delta T \sim L^{-1/\nu}$$

$$T_c(L) - T_c(\infty) \sim L^{-1/\nu}$$

有限尺寸标度与相变

由 $M_{\text{sp}} \propto (-t)^\beta$, $\chi \propto |t|^{-\gamma}$ 用关联长度表示,

$$M_{\text{sp}} \propto \xi^{-\beta/\nu} \sim L^{-\beta/\nu}$$

$$\chi \propto \xi^{\gamma/\nu} \sim L^{\gamma/\nu}$$

由此得到: $\Theta = \lambda = \frac{1}{\nu}$

$$\beta_c = \frac{\beta}{\nu} \quad \gamma_c = \frac{\gamma}{\nu}$$

Finite-Size Scaling

Singular part of free-energy has the scaling form:

$$F(L, T) = L^{-(2-\alpha)/\nu} \hat{g}((T - T_c)/T_c L^{1/\nu})$$

This implies at T_c for large size L ,

$$M \sim L^{-\beta/\nu}, \quad \chi \sim L^{\gamma/\nu}, \quad C \sim L^{\alpha/\nu}$$

Shift of T_c

$$T_c(L) = T_c(\infty) + aL^{-1/\nu}$$

By considering the shift of T_c with respect to sizes, Ferrenberg and Landau determined highly accurate $1/T_c = 0.2216595 \pm 0.0000026$ for the 3D Ising model.

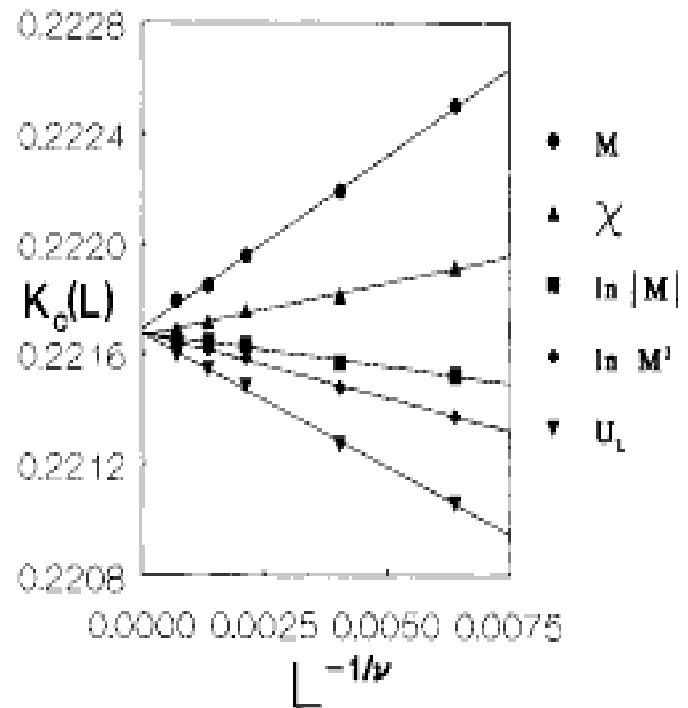


FIG. 6. Magnification of Fig. 5 using the data for $L \geq 24$ and excluding the specific heat. The curves are straight-line fits to Eq. (8) with $\nu=0.6289$ and no correction term.

From A M Ferrenberg and D P Landau, Phys Rev B **44** (1991) 5081

Accurate Exponent Ratio

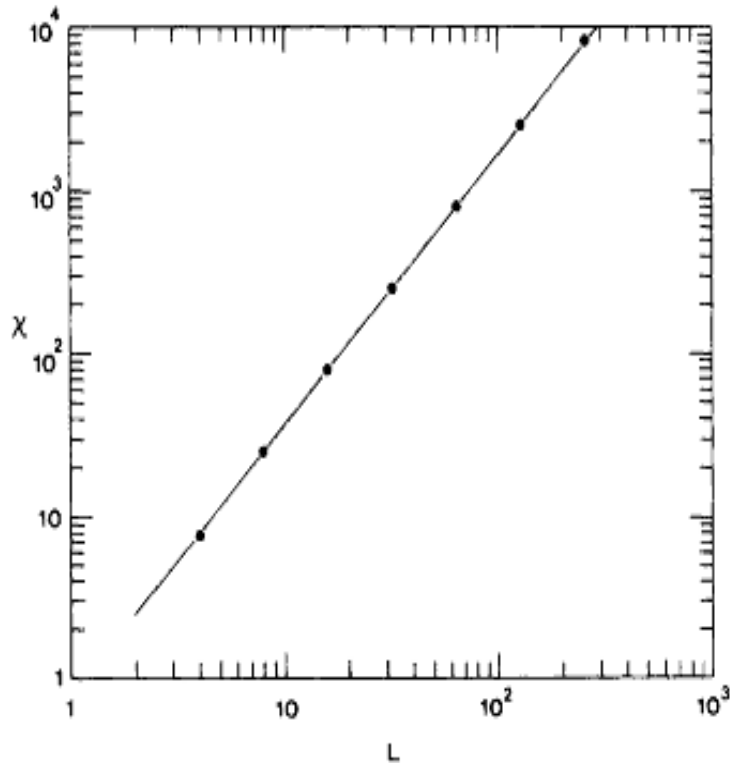


FIG. 1. Log-log plot of the two-dimensional susceptibility χ vs linear size L at $T=0$. The straight line has a slope $\gamma/\nu = \frac{5}{3}$.

Finite-size scaling $\chi \sim L^{\gamma/\nu}$ at $T_c = 0$ for the three-state anti-ferromagnetic Potts model:

$$E(\sigma) = J \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j)$$

Where $\sigma = 1, 2, 3$ and δ is Kronecker delta function. We found numerically that $\gamma/\nu = 1.666 \pm 0.002$

From J S Wang, R H Swendsen, and R Kotecký, Phys Rev. B, **42** (1990) 2465.

有限尺寸标度与相变

Binder 累积量:

$$U_L = 1 - \frac{\langle S^4 \rangle_L}{3 \langle S^2 \rangle_L^2}$$

有限尺寸标度与相变

性质1: $T < T_C$, $L \gg \xi$, 远离临界区域

$$P(S) = \left(\frac{L^d}{2\pi k_B T \chi} \right)^{1/2} \left[\frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{(S-M)^2}{2k_B T \chi} L^d \right\} + \frac{1}{2} \exp \left\{ -\frac{(S+M)^2}{2k_B T \chi} L^d \right\} \right]$$

$$\langle S^2 \rangle = (k_B T \chi + L^d M^2) / L^d \rightarrow M^2$$

$$\langle S^4 \rangle = \frac{6 L^d M^2 k_B T \chi + L^{2d} M^4 + 3 (k_B T \chi)^2}{L^{2d}} \rightarrow M^4$$

$$U_L \rightarrow 1 - \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$$

有限尺寸标度与相变

性质2: $T < T_C$, $L \gg \xi$, 远离临界区域

$$P(S) = \left(\frac{L^d}{2\pi k_B T \chi} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{S^2}{2k_B T \chi} L^d \right\}$$

$$\langle S^2 \rangle = \frac{k_B T \chi}{L^d}$$

$$\langle S^4 \rangle = \frac{3(k_B T \chi)^2}{L^{2d}}$$

$$U_L = 0$$

有限尺寸标度与相变

性质3: $T \approx T_C$, $L \ll \xi$, 在临界区域

$$U_L \rightarrow U^*$$

U^* 是一个与 L 关系很小的普适值.

应用: 确定 T_C , 对不同的 L 计算 U_L , 对各种对 (L, L') , 计算比值 $U_L/U - L'$, 并对 T 作图, 这些比值的曲线将交于一点, $T - C$.

由此方法可以非常精确地定出临界温度. 对于一级相变, U_L 也很有用.

有限尺寸标度与相变

证明：在临界区域，由于 $L \ll \xi$ ，所以前面给出的分布失效。这里的关键假定是 做为 L, S, ξ (对应于温度) 函数的 $P(S)$ 实际上只是两个变量的函数。

$$\begin{aligned} P(S) &= \xi^{\beta/\nu} \hat{P}(L/\xi, S\xi^{\beta/\nu}) \\ &= L^{\beta/\nu} \tilde{P}(L/\xi, SL^{\beta/\nu}) \end{aligned}$$

有限尺寸标度与相变

计算二阶和四阶距：

$$\begin{aligned}\langle S^2 \rangle &= \int dS S^2 P(S) \\ &= \int dS S^2 L^{\beta/\nu} \tilde{P}(L/\xi, SL^{\beta/\nu}) \\ &= L^{-2\beta/\nu} \int ds s^2 \tilde{P}(L/\xi, s) \\ &= L^{-2\beta/\nu} \tilde{\chi}_2(L/\xi)\end{aligned}$$

有限尺寸标度与相变

类似的有： $\langle S \rangle = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(L/\xi)$

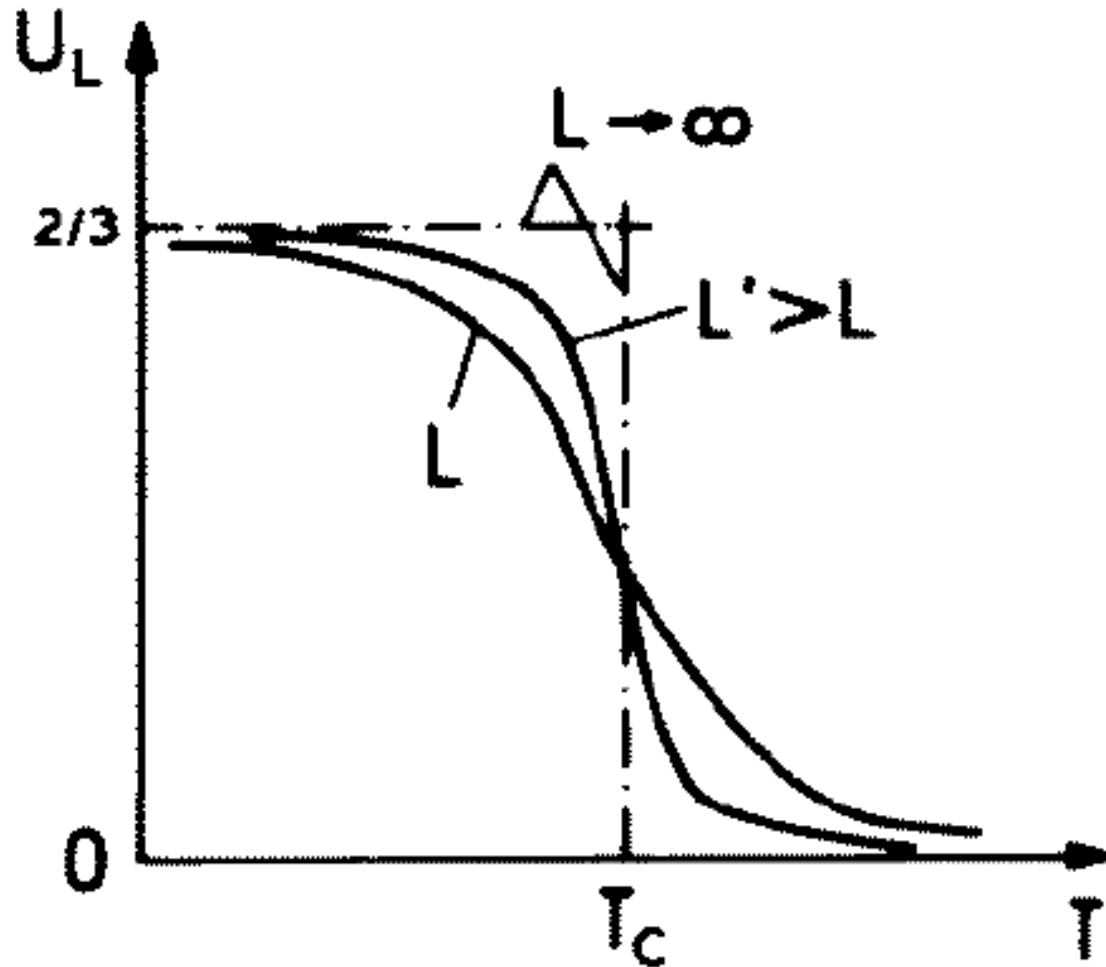
$$\langle S^4 \rangle = L^{-4\beta/\nu} \tilde{\chi}_4(L/\xi)$$

于是：

$$U_L = 1 - \frac{\tilde{\chi}_4(L/\xi)}{3\tilde{\chi}_2^2(L/\xi)}$$

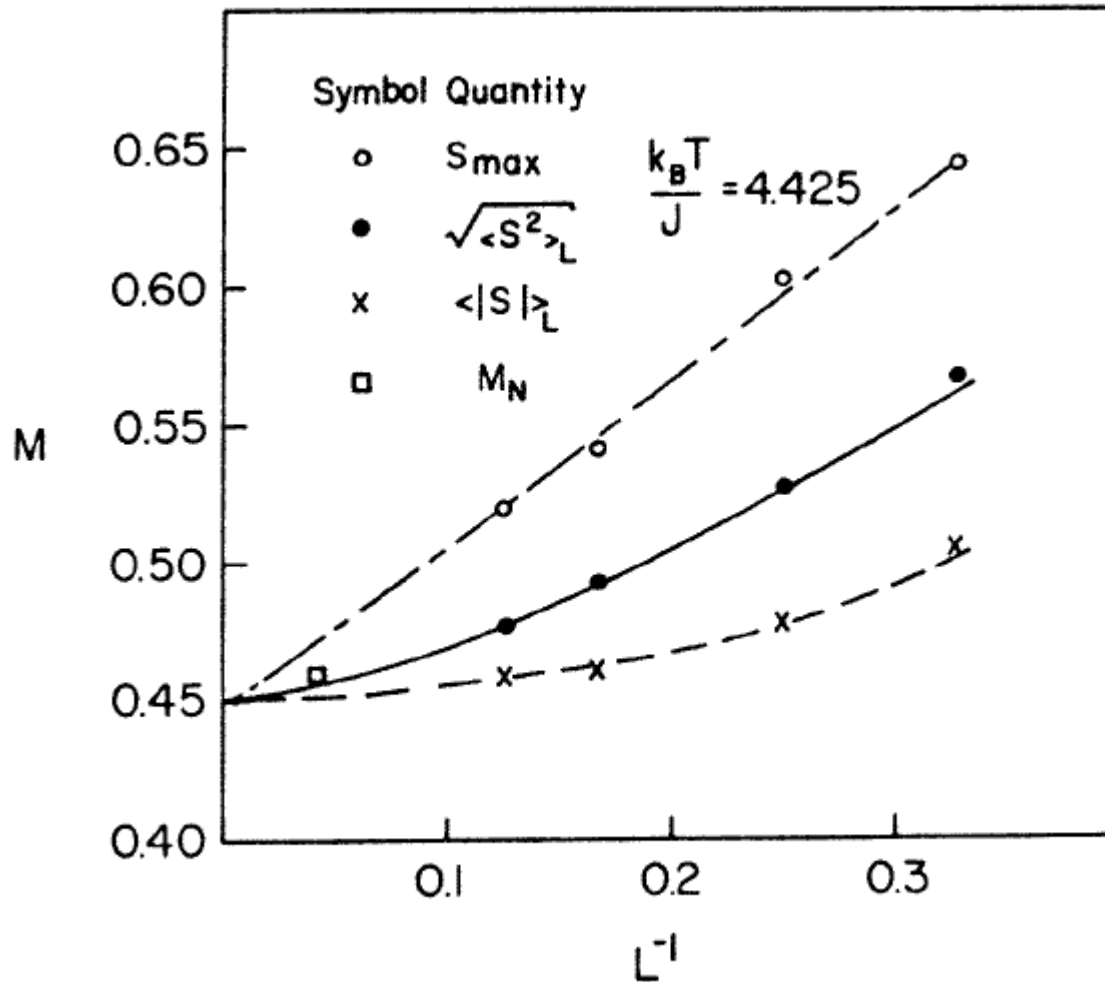
当 $T \rightarrow T_C$ 时， $\xi \rightarrow \infty$ ， $U_L = 1 - \frac{\tilde{\chi}_4(0)}{3\tilde{\chi}_2^2(0)} \equiv U^*$ 与 L 无关.

有限尺寸标度与相变



Binder累积量的尺寸效应—确定 T_C 的方法

有限尺寸标度与相变



不同方法计算自发磁化，外推到无限大系统时，趋于同一个值。

练习： 对于一个 $L \times L$ 的无外场二维Ising模型：
写出产生初始位形的程序段；
写出自旋翻转的程序段；
写出处理周期性边界条件的程序段
联合上述程序段，取 $L = 16$ ，从初始位形开始计算2000MCS，记录每一步的能量和序参量，观察这两个量的平均值的演化。

练习：修改上述程序段，

- 1, 计算能量和序参量的涨落
- 2, 选定合适的计算序参量的方法
- 3, 计算能量和序参量的Binder累积量

利用修改后的程序, 取 $L=8$ 、 16 、 20 、 24 、 32 、 40 、 64 、 \dots , 取合适的初始位形, 计算合适的MCS, 对不同的MCS间隔计算能量、序参量、涨落和Binder累积量, 确定比热、磁化率和临界温度.

补充练习：

根据Ferdinand-Fisher解，计算有限格点上Ising模型的内能和比热的精确值，与模拟结果比较，分析模拟的误差。

谢谢大家



有限尺寸标度与相变

磁化率的计算: $\chi'(L, T) = \frac{L^d}{k_B T} (\langle S^2 \rangle_L - \langle |S| \rangle_L^2)$

$T > T_c$ 时: $\chi(T) = \lim_{L \rightarrow \infty} \chi'(L, T)$

$T < T_c$ 时, 注意到:

$$\langle |S| \rangle_L = \sqrt{\frac{2k_B T \chi^{(L)}}{\pi L^d}} \neq 0 \quad \langle S^2 \rangle_L = \frac{k_B T \chi^{(L)}}{L^d}$$

$$\chi(L, T) = \chi'(L, T) \left(1 - \frac{2}{\pi}\right)^{-1}$$