

文章编号:1000-582X(2006)11-0115-04

二维微正则 Ising 模型临界相变的 Q2R 方法*

李立奇, 王宗笠

(重庆大学 数理学院, 重庆 400030)

摘要:利用元胞自动机 Q2R/WQ2R 方法研究了二维微正则 Ising 模型的临界相变, 计算结果表明此数值仿真能够显示二维晶格在孤立条件下的自发磁化, 并且观察到了相变临界现象, 得到了临界能量. 文中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:Ising 模型; 元胞自动机模拟; Q2R/WQ2R 方法; 临界能量; 平均磁化强度

中图分类号: O469

文献标识码: A

Ising 模型是相变统计理论的一个核心模型. 它是利用格点自旋来描述相变性质. Ising 模型确实是一种最简单却很有效的理论模型, 对一维和二维的 Ising 模型人们已得出了严格的解析解^[1-3]. 三维 Ising 模型的严格求解是困难的. 一些文献中介绍了求解该模型的 Bragg-Williams 近似^[4]和 Bethe 近似^[5-6](考虑了短程有序), 但推导过程比较复杂.

以上结果是前人在正则条件下, 即保持温度不变的条件利用元胞自动机方法获得的. 事实上, 由于相变过程极为迅速, 系统与外界来不及交换能量, 故笔者利用元胞自动机 Q2R/WQ2R 方法将系统视为封闭的能量守恒系统, 微正则系统, 在此条件下, Ising 模型应该存在临界相变, 存在临界能量. 为了避免配分函数的计算, 运用数值模拟方法, 则能直观地显示 Ising 自旋点阵指向分布随着能量的下降而由无序向有序的演化过程. Q2R/WQ2R 方法正是通过将二维正方形网格划分为两套格子来实现状态更新, 吻合了实际情况中所有的自旋运动的同时性. 通过研究二维微正则 Ising 模型临界相变, 可以找到系统平均磁化随能量的变化, 尤其是在临界能量附近的行为.

1 Q2R 规则和 WQ2R 规则

Q2R 规则: Q2R 规则是 Vishniac^[1]于上世纪 80 年代作为 Ising 自旋动力学模型提出的一种元胞自动机方法. 现考察二维正方形网格, 每个格位拥有一个自旋 S_i , Ising 假定: 所有的 S_i 只能取 ± 1 . 最近邻的自

旋相互作用能为 $\varepsilon = -J \sum S_i S_j$. 其中 J 为自旋相互作用强度系数, 可令 $J=1$. 求和只对每个格点的最近邻点进行. Ising 模型中自旋 S_i 的能量来自它与 Von Neumann 邻居^[1](位于其上下左右)自旋 S_j 的耦合. 自旋对 (S_i, S_j) 的能量计算是: 当 3 个自旋方向相同时为 $-J$, 当两个自旋方向不同时为 J . 考虑 Ising 自旋动力学模型的微正则元胞自动机模拟, 也就是说, 正在考察的是一个与环境无能量交换的系统. Q2R 规则通过在离散的时间演化过程中, 网格中任何一个格点自旋的翻转都要保证局部能量不变来保证全局的能量守恒. Q2R 规定: 当且仅当这个运动不引起任何能量交换时, 即如果自旋 S_i 向上的邻居数与自旋向下的邻居数相同, 则 S_i 翻转成 $-S_i$. 但是由于所有的自旋运动都是同时发生的, 判断是否翻转是基于邻居不改变的前提, 如果邻居也翻转, 则无法保证能量守恒. 为解决这个问题, 可把状态更新分为 2 步: 第一步, 根据偶数自旋构形翻转奇数位的自旋; 第二步, 根据奇数自旋构形翻转偶数位的自旋. 对于二维正方形网格, 就将原网格划分为两套格子, 与国际象棋棋盘黑白格子的分布类似.

WQ2R 规则: 数值模拟过程显示出: Q2R 规则并不满足 ergody 条件, 即丧失各态历经性, 系统在演化过程中不能遍历初始能量 E_0 给定的相空间区域. 这一点可由以下例子说明. 如图 1 为 4 个自旋构成的环, 从 t 时刻开始按 Q2R 规则翻转:

从图 1 可以看到, 经过 4 次循环, 系统又回到初始状态, 而中途不可能演化到 -1111 构形. 即 Q2R 规

* 收稿日期: 2006-06-21

作者简介: 李立奇(1986-), 男, 江西宜春人, 重庆大学硕士研究生, 主要从事凝聚物理方向研究.

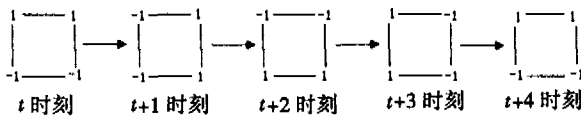


图1 Q2R 规则的演化

则演化会丧失各态历经性. WQ2R 规则是文献[2]中王宗笠教授对 Q2R 规则的改善而提出来的. 其规则修改为: 当某个格点自旋 S_i 满足 Q2R 规则翻转条件时, 其翻转与否随机决定. 这样就极大的改善了 Q2R 规则的非各态历经性, 下面的例子可以说明这一点, 如图 2:

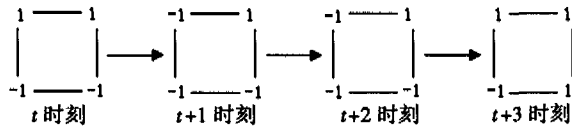


图2 WQ2R 规则的演化

将图 1 和图 2 进行比较, 不难发现, WQ2R 规则演化不仅能得到 Q2R 规则演化的全部构形, 还能得到 1 1 1 -1 和 1 -1 -1 -1 等构形, 这说明 WQ2R 规则确实改善了 Q2R 规则的非各态历经性. 但是 WQ2R 规则是否能完全实现各态历经目前尚不清楚, 有待今后的证明.

2 计算模型

文中考察的是二维正方网格, 每个格位为一个自旋, 自旋状态用状态函数 $\psi(r)$ 表示, $r(a, b)$ 为每个格位在网格中的位置. $\psi(r)$ 取值 1 或 -1. $t=0$ 时刻为初始构形, 记为 $\psi_0(r)$. $t=i$ 时刻状态记为 $\psi_i(r)$. 将二维正方网格按照奇偶格位分为 2 套子格.

元胞自动机(WQ2R)方法: 在 matlab 中以矩阵形式随机产生一初始构形 $\psi_0(r)$, 并计算该状态的能量, 记为 E_0 . 让系统在保持能量 E_0 不变, 即能量守恒的前提下, 按行列顺序依次考察该矩阵上的奇偶格位自旋 S_i 是否翻转, 如此重复足够多步, 可以得到该能量状态下系统的各种微观态 $\psi_i(r)$, 每个微观态 $\psi_i(r)$ 各格点自旋指向分布都能被能量 E_0 所接受, 计算多个微观态的自旋磁化强度 M 就可求得平均磁化强度 $\langle M \rangle$. 通过计算多个能量下的 $\langle M \rangle$ 值, 可以发现确实存在一临界能量 E_c , 当系统能量高于 E_c 时不会出现宏观磁化; 但当系统能量一旦低于临界能量 E_c 时, 就会有明显的自发磁化, 也就是说存在相变. 这种没有温度但有临界能量的情况, 实际上考察的是一个与外界无能量交换的系统, 这个模型正是 Ising 自旋动力学的微正则元胞自动机模拟.

3 算法步骤

元胞自动机(WQ2R)模拟二维 Ising 自旋动力学模型的具体步骤如下:

1) 选定二维正方网格的尺度 $N \times N$.

2) 随机产生一个自旋点阵作为系统的初始构形 $\psi_0(r)$, 并计算其能量 E_0 . 当 S_i 为点阵边缘格点时, 采用周期性边界条件: 若 S_i 在第一行, 则视点阵最后一行且相同列的格点为 S_i 的上邻; 若 S_i 在最后列上, 则视点阵第一列且相同行的格点为 S_i 的右邻, 如此等等.

3) 将二维正方网格按照奇偶格位分成 2 套子格, 状态更新分成 2 步:

第一步, 对于每个奇数位的格位 r , 计算其 Von Neumann 邻居格位的自旋状态值之和 S , 使系统在 a 和 b 两个方向上同时循环, 从而确定其所有奇数格位新的自旋状态, 用 $\psi_1(r)$ 表示. 若 $S=0$ 且 $\text{rand}(1) > 0.5$, 则 $\psi_1(r) = -\psi_0(r)$; 否则 $\psi_1(r) = \psi_0(r)$.

第二步, 对于每个偶数位的格位 r , 计算其 Von Neumann 邻居格位的自旋状态值之和 S . 若 $S=0$ 且 $\text{rand}(1) > 0.5$, 则 $\psi_1(r) = -\psi_0(r)$; 否则 $\psi_1(r) = \psi_0(r)$.

4) 重复演化步骤 3.3) 足够多次 (N 次), 使系统达到平衡态.

5) 计算这 N 个微观态的每个微观态的总磁矩 $M = \sum S_i$, 求和对所有的格点进行. 求这 N 种状态的平均磁化强度 $\langle M \rangle = (\sum M) / N$.

6) 重复演化步骤 3.2) - 3.5), 即可得 $\langle M \rangle$ 随能量 E 的函数变化关系.

注: Q2R 规则的算法步骤与 WQ2R 的基本相同. 不同点在于 3.3) 中: “若 $S=0$, 则 $\psi_1(r) = -\psi_0(r)$ ”.

4 计算结果及分析

按上述算法进行 MATLAB 编程模拟计算, 图 3 是二维方形网格点按 WQ2R 规则翻转的 N.S. 流程图.

从图 4 可以看出, 对于二维正方网格自旋系统来说, 确实存在一临界能量 E_c , 当系统能量 E 大于临界能量 E_c 时, 不发生相变, 也不形成宏观磁化; 而当 E 小于临界能量 E_c 时, 发生相变, 并且形成宏观磁化. WQ2R 规则由于规定格点自旋 S_i 在满足 Q2R 规则翻转条件时, S_i 具体的翻转与否随机决定. 故在相同能量下按 WQ2R 规则翻转所得的平均磁化率 $\langle M \rangle$ 大约是 Q2R 规则的一半.

对于上述 1000×1000 的二维正方网格自旋系统来说, E_c 约在 -1.3×10^6 附近.

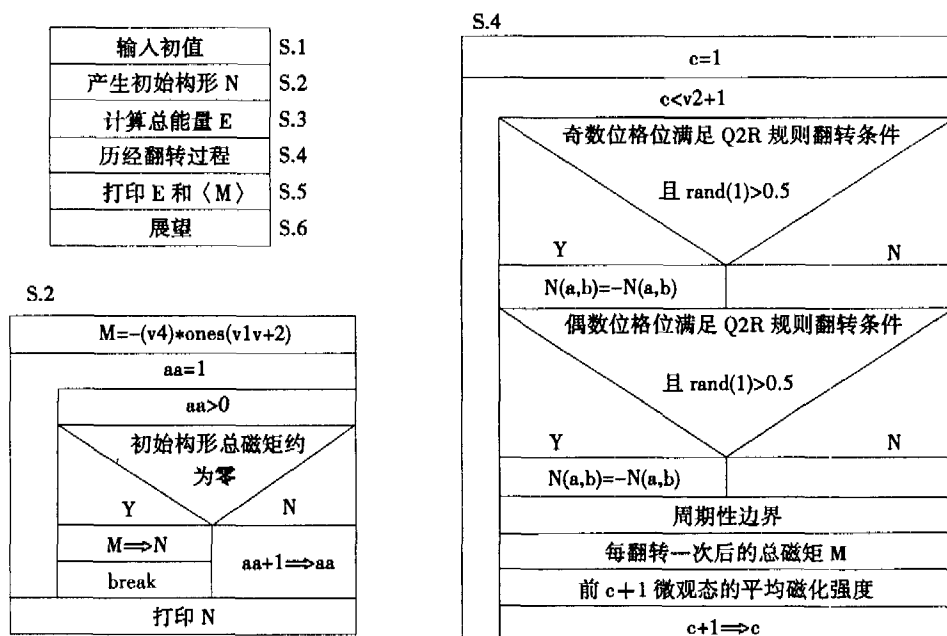


图 3 二维方形网格点按低 WQ2R 规则翻转的 N. S. 流程图

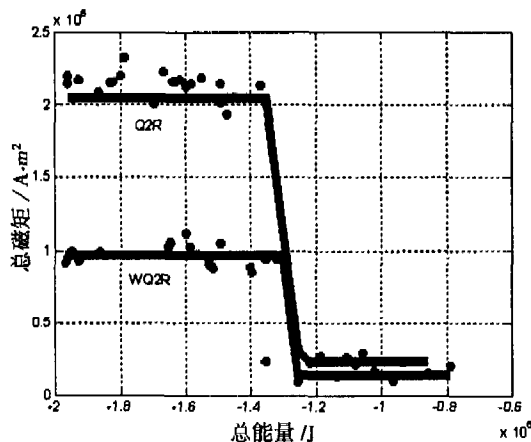


图 4 二维网格平均磁化强度 $\langle M \rangle$ 随系统能量的变化 (1000×1000)
(其中 N 取 500, 总磁矩为 Ising 模型中总格子数不变的总磁矩)

5 结束语

文中介绍了 Q2R/WQ2R 方法在二维 Ising 模型中的应用. 对于更复杂而实际的三维问题, 尚有待进一步的研究. 初步的数值仿真表明, 临界相变现象在三维情况下仍可观察到.

参考文献:

[1] 祝玉学, 赵学龙. 物理系统的元胞自动机模拟[M]. 北京: 清华大学出版社, 2003.

[2] 李晓寒. 二维 Ising 模型重整化群方法及数值模拟分析[D]. 重庆: 重庆大学数理学院, 2005.

[3] 姜寿亭, 铁磁性理论[M]. 北京: 科学出版社, 1983.

[4] 付凤玉, 周云松. (2+L) 维伊辛模型的 Bragg-Williamms 近似[J]. 首都师范大学学报, 2001, 22(1): 41-44.

[5] 代学芳, 靳红云, 荣铮. (2+L) 维伊辛模型的 Bethe 近似[J]. 首都师范大学学报, 2002, 23(4): 24-27.

[6] 靳红云. 2+L 维伊辛系统的 Bethe 近似[D]. 北京: 首都师范大学物理系, 2000.

Critical Phase Transition of the Two-dimensional Microcanonical Ising Model by Cellular Automata Q2R Method

LI Li-qi, WANG Zong-li

(College of Mathematics and Physics, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: The authors construct a microcanonical ensemble system and analyzes the phase change of the two-dimensional Ising model Cellular Automata Q2R/WQ2R method. The result indicates that the numerical value simulation can show the spontaneous magnetization of two-dimensional crystal lattice in isolated system. The authors have observed the critical phase transition phenomenon and gotten the critical energy. The simulation of three-dimensional Ising model can be grounded on the method that this article establishes.

Key words: Ising model; cellular automata simulation; Q2R/WQ2R method; critical energy; average magnetization intensity

(编辑 陈移峰)

(上接第 114 页)

Method of Two-channel Computer-generated Hologram

HOU Rui-ning, WANG Ding

(College of Mathematics and Physics, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

Abstract: The method of two-channel computer-generated hologram manufactured by matlab software is proposed, and a simple optical reconstruction method is also proposed. With the interior function of matlab to plot this hologram, a dark rectangle is drawn in one unit, which can encode two object functions in a same hologram. The hologram drawn by this method is shown on the computer screen, then microfilmed to 4 mm × 4 mm by camera directly, and a computer-generated hologram film are gained. When the film is illuminated with a collimated monochromatic light, two images appeared in two orthogonal directions at the back focal of the lens behind the film. The two channel display is implemented. The methods of plot and reconstruction were demonstrated by the experiment results, and the good results was shown.

Key words: computer-generated hologram; matlab; two-channel; optical reconstruction

(编辑 陈移峰)