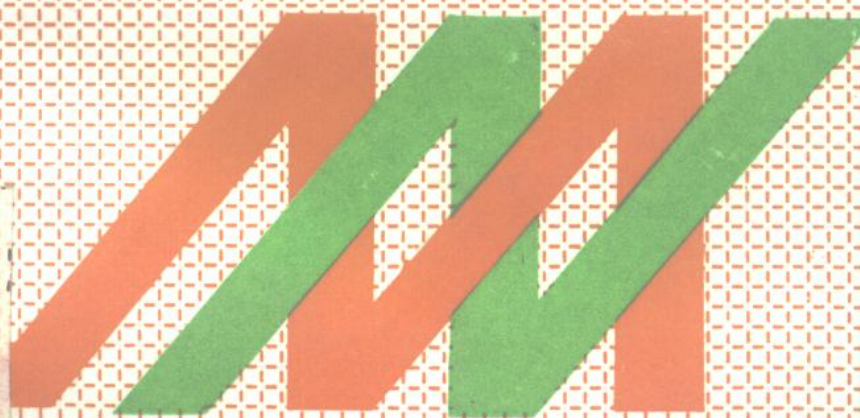


统计物理学中的 蒙特卡罗模拟方法

[德]K. Binder D. W. Heermann 著

秦克诚 译



191

北京大学出版社

统计物理学中的 蒙特卡罗模拟方法

〔德〕宾德 赫尔曼 著
秦克诚 译

北 京 大 学 出 版 社

新登字(京)159号

图书在版编目(CIP)数据

统计物理学中的蒙特卡罗模拟方法/(德)宾德(Binder,K.),
(德)赫尔曼(Heermann,D.W.)著;秦克诚译
北京:北京大学出版社,1993.8
ISBN 7-301-02226-3

I.统…

I.①宾… ②赫… ③秦…

III.统计物理学—数学模拟

IV.O414.2

出版者地址:北京大学校内

邮政编码:100871

排印者:北京大学印刷厂

发行者:北京大学出版社

经销者:新华书店

850×1168毫米 32开本 5.375印张 134千字

1994年2月第一版 1994年2月第一次印刷

定价:9.50元

中文版序

现在，人们已开始把“计算机模拟”看成自然科学在“实验”和“解析理论”以外的第三个分支；使用计算机作为科学研究的工具，使科学家和学生能够以一种同传统方法稍微不同的方式提出问题。计算机在这方面提供的广泛的可能性是如此诱人，使得在这个领域工作的科学界人士急剧增加，迄今一直是在以指数形式无限增长！

虽然有些科学问题需要在世界最快的超级计算机上进行极大规模的计算才能解决，但是统计物理学中遇到的大多数问题远远不需要这样强有力的计算机，用适中规模的计算机资源（例如工作站和个人计算机）就可以解决了。事实上，在本书两个作者的研究组中，现在正在工作站上开展着非常先进的研究。这种性能档次的计算机，看来很快就会在全世界用合理的价格买到。因此，目前普遍需要学习如何使用这个新工具，本书就是用来填补这个空缺的，我们希望它将对中华人民共和国的科学作出贡献。我们相信，即使用很简单的或中等的计算机资源，已足以成功地从头到尾学完本书并做完书中的作业，从而为架设通向现代科学发展的桥梁迈出重要的一步。

这个中译本全靠秦克诚教授的不懈努力才得以完成，他还指出了本书英文版中迄今未发现的一些错误。我们在此非常高兴地感谢他为完成这一任务所作的巨大努力。

K. Binder

D. W. Heermann

译者前言

计算机在物理学中起着越来越重要的作用。它不仅是传统的理论物理学和实验物理学的强有力工具，而且使物理学产生了一个新分支——计算物理学。掌握一些在计算机上通过数值计算解决物理问题的能力，已成为每个物理系学生必须具备的素养。在这种背景下，许多院校的物理系都开设了计算物理基础或计算机模拟方法之类的课程。这些课程的教材建设，除自己动手编写外，引进国外的一些优秀教材也是一条重要途径。

计算物理教材有两种类型。一种以计算方法为纲，介绍各种常用的计算方法，每种方法之后举一两个应用这种方法解决的典型物理问题，作为例题或作业。另一种是单科性的，介绍物理学某一支学科中所用的计算方法。本书属于后一种。它在不大的篇幅内，详细介绍了统计物理中蒙特卡罗模拟方法的基本理论和技巧，及一些重要应用例子（自回避随机行走、逾渗、Ising模型）的算法。本书的两位作者都是这方面的权威，Binder教授现在在Mainz大学工作；Heermann教授在Heidelberg大学工作。

本书的翻译原来是根据原书初版(1988)进行的。翻译过程中发现了几处错误，译者在征得作者同意后作了更正和改写。在中译本即将付印之际，译者收到了原书出版者寄来的订正再版书(1992)，其主要变动是改正了这些错误及增加了补充文献目录。译者根据再版进行了校订，所据的版本也就改成订正再版本了。

计算物理教材应当包含足够的作业。读者必须动手编写程序，积极参与，完成作业，才能掌握所学的方法，培养解决实际问题的能力，把消极知识变成积极知识。作者在本书序言和正文中多次强调了这一点。本书第三章有不少作业。为了帮助使用本书的教师备课，译者为这些作业题编了FORTRAN程序（一张软盘）需要的教师可同北京大学出版社软件部联系。

序

在学习很正规的教材时，人们会到达这样一个阶段：他自以为已经懂得教材的内容了。但在面对实际问题时，有时就会令人痛苦地表明这种“懂得”只是消极的。为了解决这些实际问题，手头需要有现成的主意和方法。必须熟练掌握这些主意和方法（成为积极的知识），才能成功地加以应用。从这一想法出发，本书的目的是尽可能填补这二者之间的差距。

怎样才能做到这一点呢？本书的材料出自1987年在葡萄牙的Figueira da Foz举办的暑期学校上的一系列讲座。这一系列讲座分为同时并进的两部分。其中一部分是“正规教材。”由于参加者的背景很不一样，正规教材的叙述尽可能符合教学法原则。

在这一正规部分里讨论了蒙特卡罗方法的一般观念。蒙特卡罗方法现在已在许多学科（如物理学、化学和生物学）中得到广泛的应用。因此，必须对讲座的内容范围加以限制。我们不可能给出一个全面的说明，而只限于讨论蒙特卡罗方法在相变物理学上的应用。这里特别着重讨论了有限尺寸效应。

讲座的“非正规”部分将注意力集中在实际方面。它引导参加听讲的人一步一步从“容易”的应用过渡到更高级的算法。在这一部分里，我们试图使正规部分里介绍的种种主意和概念成为活生生的东西。我们希望，本书体现了这次暑期学校做法的精神。在这次暑期学校里，上述差距缩小了，因为许多人都积极参与了两部分的学习和工作。

从上述可知，本书中介绍蒙特卡罗方法的材料对许多科学工作者都有用。它可以用作一门高年级大学生或研究生课程的教材。事实上，本书的一份初稿就曾用于在Mainz大学开设的一门

课程。我们不仅深入地讲述了各个算法，而且通过设置许多练习题让读者去解决，来鼓励读者积极参与。

对使用蒙特卡罗方法的研究工作者和科学家，本书也含有可能对他们的研究工作很重要的材料。例如，我们讨论了一个量的蒙特卡罗估值的统计误差的问题。也考虑了自平均问题。

我们首先要向 K. Kremer 和 D. P. Landau 表示谢意。没有他们不断的合作和建设性的批评，这本书不会是现在这个样子。我们也感谢 Mainz 大学凝聚体理论组的同学们，他们积极参与了这门课程并且带批评性地读了本书手稿。特别感谢 M. DeMeo，他运行了某些程序。

Kurt Binder

Dieter W. Heermann

1988年5月于Mainz

K. Binder D.W. Heermann

Monte Carlo Simulation in Statistical Physics

An Introduction

Second Corrected Edition

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York
London Paris Tokyo

目 录

1	引言: 本书的目的和范围及一些一般性的评述.....	(1)
2	蒙特卡罗方法的理论基础及其在统计物理学中的应用	(6)
2.1	简单抽样对重要性抽样	(6)
2.1.1	各种模型	(6)
2.1.2	简单抽样	(8)
2.1.3	随机行走和自回避行走	(10)
2.1.4	由简单抽样方法得出热平均	(15)
2.1.5	简单抽样的优点和局限性	(17)
2.1.6	重要性抽样	(21)
2.1.7	再谈模型和算法	(24)
2.2	蒙特卡罗程序的组织和蒙特卡罗抽样的动力学解释.....	(28)
2.2.1	对Ising模型的模拟的初步讨论.....	(28)
2.2.2	边界条件	(32)
2.2.3	重要性抽样蒙特卡罗方法的动力学解释	(36)
2.2.4	统计误差和时移弛豫函数	(41)
2.3	有限尺寸效应.....	(44)
2.3.1	逾渗转变问题的有限尺寸效应	(44)
2.3.2	逾渗问题的有限尺寸标度	(49)
2.3.3	破缺对称性和热相变问题上的有限尺寸效应	(51)
2.3.4	序参量的概率分布及用它论证有限尺寸标度和唯象重正化	(55)
2.3.5	弛豫时间的有限尺寸行为	(67)
2.3.6	没有“超标度关系”的有限尺寸标度	(70)
2.3.7	一级相变的有限尺寸标度	(71)
2.3.8	统计误差的有限尺寸行为和自平均问题	(77)
2.4	关于本章(理论章)的内容范围.....	(82)
3	蒙特卡罗方法实际工作指南	(84)
3.1	本指南的目标.....	(87)

3.2 简单抽样	(91)
3.2.1 随机行走	(91)
3.2.2 不退行随机行走	(99)
3.2.3 自回避随机行走	(102)
3.2.4 逾渗	(107)
3.3 偏倚抽样	(116)
3.3.1 自回避随机行走	(116)
3.4 重要性抽样	(119)
3.4.1 Ising 模型	(120)
3.4.2 自回避随机行走	(137)
附录	(139)
A1 随机行走问题的算法	(139)
A2 用来证认集团的算法	(141)
参考文献	(146)
补充文献	(155)
索引	(159)

1 引言：本书的目的和范围 及一些一般性的评述

近年来，“计算机模拟”方法已经引发了几乎可以说是一场科学革命：物理学（以及化学、生物学等等）按照老式划分为“实验”分支和“理论”分支这种分法已不再是完备的了。“计算机模拟”已变成第三个分支，它同前两种传统方法互相补充。

那么，计算机模拟或“计算机实验”的特殊意义何在呢？这个问题的答案很简单，那就是计算机模拟对于得到精确描述的模型系统（对于统计物理学问题，这意味着描写哈密顿量的各个参量已一无遗漏地明确知道）能够给出精确的信息（除统计误差外，但是至少在原则上可以使这些统计误差任意小）。

反之，解析理论提供的信息只在很少的情况下是精确的，而在大多数其他情况下，都需要用不受控制的近似。例如，三维情形下可解的统计物理学问题只限于一些理想化的极限情况，如理想气体或理想溶液、耦合简谐振子等。即使很简单的统计力学模型，如三维 Ising 模型，也不能精确求解，而对于原子自由度之间为真实势的模型，所知就更少了。因此，常常设计计算机模拟以检验对一个模型进行解析处理时所作的一些近似的精度。

同样，实验提供的数据在下述意义上也绝对不是精确的：如果“精确的”意味着精确知道一个给定的实验样品的有效哈密顿量。有时甚至会争论实验观察到的某些现象究竟是固有的还是由某些未知的杂质效应引起的——记住，一种实验样品的化学成分只能近似知道。这些只是几个例子，从这些例子清楚看出，解析理论和实验之间的比较，并不总是导致确定无疑的结论，还需要用模拟

来沟通理论和实验的隔阂。而对一个模型的模拟同实验之间的直接比较，则不受不精确的近似（它们常常是解析理论中不可避免的）的牵累，从而可以更确定无疑地表明，这个模型是否忠实地代表实际系统。

当然，这绝不是计算机模拟富有吸引力的唯一原因。还应看到，模拟提供的关于模拟系统的信息可以任意详尽，不管什么物理量，只要研究者认为它有用，就可以设法从模拟对这个量进行“抽样”。例如，散射技术应用于真实系统时，通常给出关于二粒子关联函数的信息，要得到关于三重关联或高阶关联的直接实验信息是很困难的。但是，模拟却能轻易地给出这些高阶关联，至少在原则上是这样。还有，实验工作者可以改变他的样品的温度和压力，可是要他估计原子间位势变化的效果，就不那么容易了。而对于计算机模拟来说，任意改变原子间位势并不是什么大困难。现在就很清楚了，计算机模拟方法的确很重要；它是理解自然规律的一种有效的研究手段，对它的从事者很有教益，与理论或实验互相补充。

情况既然是这样，这方面的文献有爆炸性的增长，也就不足为奇了。许多以前从事理论物理学(或理论化学、理论生物学等)研究的科研工作者开始搞计算机模拟，一些实验工作者也一样。最后，但并非最不重要的一点是，许多并不具有任何其他科研经验的学生，也立即被吸引到计算机模拟的领域中来来了。

但是，表现出来的这种巨大兴趣遇到了一个严重的困难：到现在为止，在大学中还很少讲授模拟方法，并且也缺乏系统的教科书，而通过这样的教科书，那些新进入这一领域的人可以很容易地学会，变成一个熟练的从事者。虽然本书的作者之一(K.B.)曾经主编过两本书，它们收集了蒙特卡罗计算机模拟方法在统计物理学中的许多应用，但这两本书并不是能够使其读者容易学习一个新领域的教科书。另一位作者(D.W.H.)写过一本更着眼

于教学法的对计算机模拟方法的一般性说明；但是，由于它的一般性，该书未能深入细致地讨论对相变和有关问题（逾渗、随机行走、聚合物、生长现象等）的蒙特卡罗研究。对其他方法（如“分子动力学”方法）的介绍也有同样的问题，或者受到其他的限制。于是，迄今为止蒙特卡罗模拟的“技艺”主要是通过两条途径来学习和传播的，即：或者通过对许多原始论文（其发表时间回溯到几十年前）冗烦的比较研究，或者通过同熟练的从事者之间的私人交流。

本书的目的是要填补（至少是部分地填补）这个空白。因此从一开始，我们就把本书的范围限于计算机模拟的一种方法，即蒙特卡罗方法，而不是试图覆盖整个领域。对范围的这一限制有好几个原因：首先，两位作者的专长主要是在这一方面；其次，加了这个限制之后，就可以现实地采用本书作为一门持续一学期每周两小时的关于计算机模拟的大学课程的教科书。它也适合于用作一个两星期长的计算机模拟讲习班的教材，讲习班的学员在这两个星期的时间里可以每天上机实习，从而在一门紧凑的强化课程中学习蒙特卡罗方法。最后，对一个试图只依靠自学来学完本书的学生或科研工作者，这项任务仍然是有可能完成的！

同以往的关于蒙特卡罗模拟的文献不同，本书对该方法的理论基础（包括结果的分析）和用该方法做的实际作业给以同样的权重。如何进行“计算机实验”是必须学习的，正如实验工作者要通过参与实际进程来学习如何设计实验并用实际系统建立实验，以及评估从实验得到的数据。本书作者和他们的许多同事，曾多次遇到这种对实际作业的需要，以通过它学习如何实现这样的计算机实验。事实上，本书的初稿——一些未正式出版过的讲义，曾于1987年9月在葡萄牙的 Figueira da Foz 举办的计算机模拟讲习班上，以及在 Mainz 大学开设的一些课程上，相当成功地使用过。因此，对学生讲授蒙特卡罗方法的实际教学经验是决

定本书内容的一个主要因素。我们的经验是，永远可以假定学生具有一种程序设计语言如 PASCAL 的背景知识，以及统计力学的一些知识，包括相变的基本原理。如果读者对诸如“临界指数”和它们之间的“标度关系”这样的概念以及像 Ising 模型和逾渗之类的模型还不熟悉，他很容易找到清晰地阐述这些概念的教材（我们在本书中要提到一些），因此就没有必要重复这些基本概念。

使用本书时，理论部分（本书的第 2 章）和“实际作业指南”（第 3 章）的互相配合是至关重要的。这两章都讨论相同的题目（简单抽样、随机行走和自回避行走、逾渗、Ising 模型等），但是观点有所不同。在前一部分引进并解释了用来对这些问题进行数值处理的概念；后一部分则把这些概念应用于具体问题，它要求读者积极参与（即在个人计算机上做这些题目）以更深刻地理解这些概念。

特别适合于做到这一点的方式是一个“讲习班”的形式，这个讲习班采用本书为教学指导书。先提出对一个问题的解决方法并立即加以试验，然后再对解这个问题的方法即算法进行改进。当然，讲习班要办得效果最好，必须依靠学员与教师之间以及学员相互之间的交流。讲习班的每个成员都将因所得到的反馈而受益。采用一份书面教材，讲习班的效率会低一些。然而，我们已使本书具有这样的结构，使读者有可能而且有必要对本书不是消极地阅读，而是与本书有某种形式的交流。

我们的目标是介绍足够的材料，使读者能够在所述概念的基础上，着手开发解决其他问题的算法。为了达到这个目标，必须从头到尾做全部内容。因此这个“讲习班”（第 3 章）是一个单独的单元。第 3 章的另一个目标是介绍数据分析方法，使读者熟悉如何应用这些方法。这仍然要求读者积极参与。

既然本书是按照上述想法写的，两章有很强的相互关联，那

么内容上的某些重复便是不可避免的，从叙述的清晰和连贯性来考虑甚至是必要的。事实上，本书讨论的全部方法的科学背景都已在其他文献中叙述过，本书的新颖之处以及和以往的工作完全不同之处在于它的引论性质，它要顺利地引导学生去熟悉用蒙特卡罗方法做的许多实际工作和经验。为了这个教学法目的，内容的少许重复甚至是我们所希望的。我们故意选用统计物理学中一些非常简单的问题，例如随机行走和自回避行走、逾渗和 Ising 模型，这些问题比较容易说明和演示全部概念和方法，而不在本书中讨论那些更复杂的问题，像具有实际势的流体、自旋玻璃及其他无序材料、量子力学蒙特卡罗方法或点格规范理论中的问题。我们认为，读者在从头至尾学完本书之后，借助于已有的关于蒙特卡罗方法的其他书籍，是能够转到这些问题上来的。我们对具有离散自由度的点格问题（Ising 模型、Potts 模型等）和连续自由度的点格问题（Heisenberg 磁体和 XY 磁体、 ϕ^4 模型等）的热平均的特性讨论到一定深度，而对非点格问题如简单流体只简短地提一提。书中特别注意理解计算机模拟方法的局限性（有限尺寸和边界条件引起的效应、有限观测时间效应、自平均问题），以及人们为克服这些局限性所作的努力；例如，如果引用适当的有限尺寸标度理论，二级相变和一级相变时的有限尺寸效应可以用作研究系统的大块性质的有用工具。书中也讨论了蒙特卡罗重要性抽样的动力学解释。我们看到，虽然一方面隐含着一种不希望看到的收敛变慢现象，特别是在临界点附近（临界慢化）和玻璃态系统中；但另一方面，蒙特卡罗方法却成为研究随机模型的动态行为的唯一工具。

2 蒙特卡罗方法的理论基础及其 在统计物理学中的应用

在本章中，我们首先引进蒙特卡罗抽样的基本概念，介绍蒙特卡罗程序应当怎样组织的一些细节，进而讨论蒙特卡罗计算结果的解释和分析。

2.1 简单抽样对重要性抽样

2.1.1 各种模型

统计物理学是同具有许多自由度的系统打交道。统计物理学提出的一个典型问题，是假定一个系统的哈密顿量已知，计算该系统的“平均”宏观可观察量。例如，我们考虑磁性系统：如果一块铁磁体具有很强的单轴各向异性，我们可以用 Ising 模型来描写它，其 N 个自旋以下述方式相互作用：

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} S_i S_j - H \sum_i S_i, \quad S_i = \pm 1, \quad (2.1.1)$$

其中格点 i 上的自旋 S_i 可以沿着“易磁化轴”指向上或向下，

(2.1.1) 式中的交换能只限于最近邻之间， H 是外磁场， $-H \sum_i S_i$ 项描述系统的 Zeeman 作用能。但是，如果铁磁体具有平面各向异性（自旋取向限于 xy 平面内：XY 模型），或者完全各向同性（Heisenberg 模型），情况便会不同：

$$\mathcal{H}_{\text{XY}} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - H_x \sum_i S_i^x, \quad (2.1.2)$$

$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1;$$

$$\mathcal{H}_{\text{Heisenberg}} = -J \sum_{\langle i, j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) - H_z \sum_i S_i^z, \quad (2.1.3)$$

$$(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1.$$

当然，实验工作者在其实验室中可以制备大量的形形色色的材料，这就引起了对这些模型的多种变型的兴趣：代替(2.1.1)式中所隐含的自旋量子数 $S = 1/2$ 或(2.1.2), (2.1.3)式中隐含的 $S \rightarrow \infty$ ，我们可能想要考虑一般的自旋量子数；代替只考虑最近邻之间的交换作用，我们可能想要把次近邻、第三级最近邻等等之间的交换能也包括进来；代替(2.1.3)式中的完全各向同性，可能需要对它加上一个单轴或平面各向异性项；代替(2.1.1)式中的均匀交换能 J 和均匀磁场 H ，改用随机的交换常数 J_{ij} 和随机场 H_i 也许是合适的，以模拟该系统中的某种冻结的随机无序性。因此，单是磁性固体就已向我们提供了不可胜计的模型哈密顿量，(2.1.1) — (2.1.3) 只不过是这些哈密顿量的一些例子，而大量的模型又只是凝聚体物理学所提供的广阔应用的一小部分。

统计物理学的一个任务是从模型哈密顿量计算出所要的各种平均性质，例如每个自由度的平均能量 E 或平均磁化强度 M ，

$$E = \langle \mathcal{H} \rangle_T / N, \quad M = \left\langle \sum_i S_i \right\rangle_T / N. \quad (2.1.4)$$

其中 $\langle \rangle_T$ 代表热平均。任何可观察量 $A(\mathbf{x})$ ，例如 $A = \mathcal{H}$, $\sum_i S_i$ 等等， $\mathbf{x}$ 是相空间中的矢量，代表描述所考虑的自由度的一组变量的集合，例如对(2.1.1)式 $\mathbf{x} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ ，对(2.1.3)式 $\mathbf{x} = (S_1, S_2, \dots, S_N)$ 的热平均在正则系综中由下式定义：

$$\langle A(\mathbf{x}) \rangle_T = \frac{1}{Z} \int d\mathbf{x} \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T] A(\mathbf{x}), \quad (2.1.5)$$

$$Z = \int d\mathbf{x} \exp[-\mathcal{H}(\mathbf{x})/k_B T].$$