一小时速成notes：Ising模型(3)

来自一个非概率非物理的同学

2025 年 7 月 22 日

0 渔樵问对：一些对前两次讨论班和这次的notes的说明

0.1 ψ为什么叫压强？

之前我们提到了所谓的ψ，名为压强（pressure），由Hölder不等式可以证得其凸性，这是*热力学势*的特征（反映热力学系统稳定性）. 它是联系微观统计（配分函数）与宏观热力学性质的桥梁，其他的物理量可以通过对它求导得到，比如我们后面会提到的平均磁化强度是$m = \partial\psi/\partial h$，而磁化率$\chi = \partial^2\psi/\partial h^2$，能量密度$u = -\partial(\beta\psi)/\partial\beta$，比热$C = -\beta^2\partial^2(\beta\psi)/\partial\beta^2$，混合导数还可以表示磁热效应.

之所以叫做压强，是因为我们知道物理上自由能密度为

$$f(T,\rho) = \lim_{V\to\infty}\frac{F(T,V,N)}{V},$$

而经典流体系统中压强

$$P = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_{T,N}.$$

而这里体积V的类比是$|\Lambda|$为点数. 对于PVT系统，这个时候所谓的*巨热力学势*定义为

$$J = -PV.$$

所以这个ψ的值相当于负的压强.

0.2 一级还是二级相变？

一级相变的意思是：*序参量不连续，但相共存*；二级相变的意思是*序参量连续但热力学量发散*（如比热发散）. 在Ising模型中有两种相变，读者要注意区分！我们这里用第二章Curie-Weiss模型的图片来解释一下物理图像（模型的图像大致是一致的）.

第一种是所谓的铁磁相变，位于$\beta = \beta_c$临界点处，且$h = 0$. 传统意义上铁磁相变其实被归为Landau二级相变. 所谓二级的含义是，磁化强度m作为参量连续变化，但是m关于h的导数也就是磁化率会发散，比热也会发生变化，所以是二级相变.（原书73页有Curie-Weiss模型中这个二级相变的一些参量变化图）

第二种是所谓的低温对称性破缺产生的相变，位于$\beta > \beta_c$低温区，且$h = 0$，这个时候有两个相，分别为$+$和$-$，具有不同的磁化强度一正一负，会共存. 这个时候取决于你的边界条件，会诱导出不同的态（这就是ghost edge发挥的作用!），决定它是“水”还是“冰”![1] 由于m值发生了突变，所以这是一级相变!

[1] 当然，固液相变并不对称，但这是一种一级相变，所以这只是一种类比.

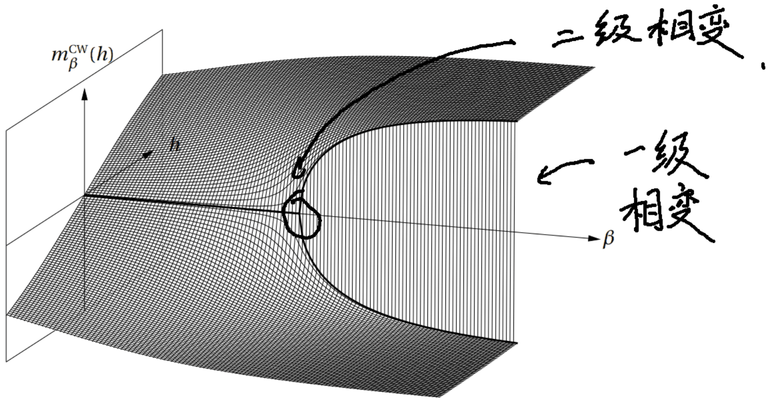

图 1: 原书67页，Curie-Weiss平均场模型的m参量变化图，可以按照这个作为脑海中的图像理解

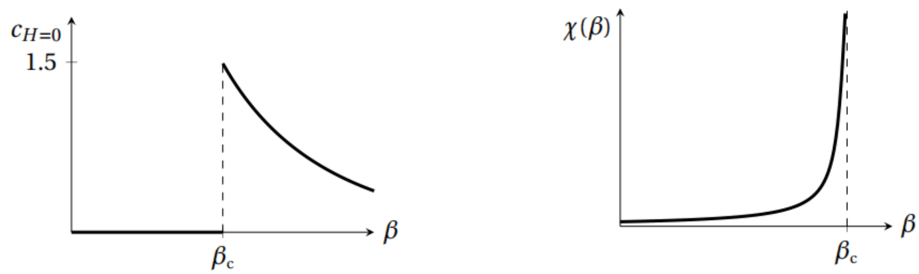

图 2: 原书73-74页，Curie-Weiss模型二级相变的热力学参量的变化.

1 低温对称性自发破缺

在$h=0$且低温区我们希望能证明存在一级相变，换言之出现对称性破缺，整块物体呈现出自发磁化的现象，也就是所谓的铁磁相. 这种机制的原理来自于低温下耦合作用显著强于热力学无序作用.

我们希望证明$\beta_C<\infty$. 对于所有$d\geq 2$的格子$\mathbb{Z}^d$都是如此. 要做到这一点，只要证明，我们对区域大小$|\Lambda|$一致地有

$$\mu^+(\sigma_0=-1)\leq\delta(\beta).$$

这样的话如果$\delta(\beta)<1/2$就会有

$$m^*(\beta)>0.$$

并且我们希望$\beta\to\infty$之时，$\delta(\beta)\to 0$.

用到的方法叫做Peierls论证，这是一种巧妙的方法，分为四步：

1. 几何表示，轮廓（Contours）的构造. 如图，我们勾画出$+$与$-$边界的轮廓即可. 接下来我们将这些边界分成简单闭曲线轮廓$\gamma_1\cup\cdots\gamma_n$的并. 记这个集合是$\Gamma(\omega)$强调对$\omega$的依赖.

2. 利用上述分解，可以将Hamilton量用轮廓表示.

$$H(\omega)=-\beta|E|+2\beta\sum_{\gamma\in\Gamma(\omega)}|\gamma|.$$

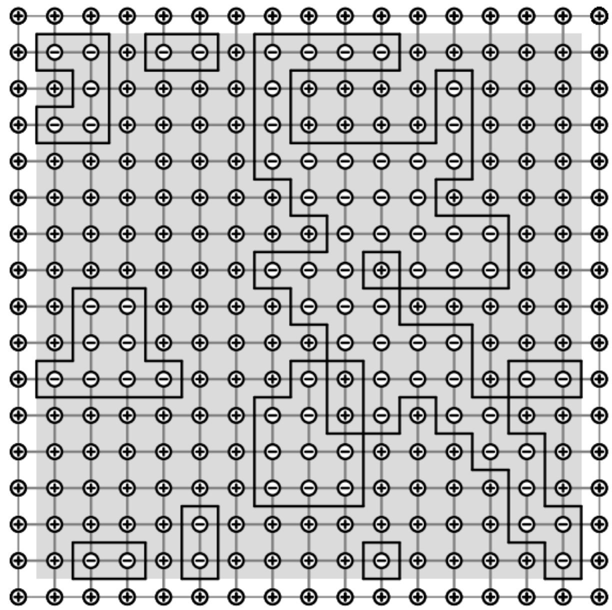

Figure 3.10: A configuration of the two-dimensional Ising model in a finite box Λ with + boundary condition. At low temperature, the lines separating regions of + and − spins are expected to be short and sparse, leading to a positive magnetization in Λ (and thus the validity of (3.29)).

图 3: 轮廓的构造

其中第一项与ω无关可以忽略，第二项中的$|\gamma|$为这些轮廓的长度. 这是一种反平行边的惩罚. 所以Gibbs分布形如

$$\mu^+(\omega) = \mathrm{const} \cdot \prod_{\gamma \in \Gamma(\omega)} e^{-2\beta|\gamma|}.$$

3. 我们需要一个核心的不等式，也就是轮廓概率估计. 需要这个不等式的原因是：

$$\mu^+(\sigma_0 = -1) \le \mu^+(\Gamma(\omega)\text{存在一个轮廓把0这个点围起来}) \le \sum_{\text{所有把0围起来的轮廓}\gamma} \mu^+(\gamma \in \Gamma).$$

所以我们需要两件事：控制$\mu^+(\gamma \in \Gamma)$大小和这样的γ的数量. 其一为轮廓概率的估计.

引理 1.1.

$$\mu^+(\gamma \in \Gamma) \le e^{-2\beta|\gamma|}$$

其物理本质是说，低温条件下轮廓是某种能量激发，长度$|\gamma|$是激发代价的度量. 而该不等式$\mu \le e^{-2\beta|\gamma|}$表明这个能量障碍越高，涨落就越罕见.

证明. 证明可以用下面这张图概括，首先第一步我们对配分函数进行拆分.

$$\mu(\gamma \in \Gamma) = e^{-2\beta|\gamma|} \frac{\sum_{\omega:\gamma\in\Gamma(\omega)} \prod_{\gamma_i \ne \gamma, \gamma_i \in \Gamma(\omega)} e^{-2\beta|\gamma_i|}}{\sum_{\omega} \prod_{\gamma_i \in \Gamma(\omega)} e^{-2\beta|\gamma_i|}}$$

现在的问题是分子里面的轮廓和中都去掉了γ部分的贡献，因此我们使用一个“翻转”的操作，将ω替换为ω'. 二者区别在于ω'将ω内部的自旋全部翻转了，这样其轮廓集合$\Gamma(\omega')$与$\Gamma(\omega)$几乎相同，除了它不包含ω. 可以参考下面这个图.

翻转后分子改成对ω'求和，但对于固定的ω'，并非所有的Ω中的东西都来自对ω的一个对γ的翻转得到，但是每一个ω'最多对应于一个ω，就是添加上γ之后的轮廓. 因此分子$\leq$分母，估计成立. $\square$

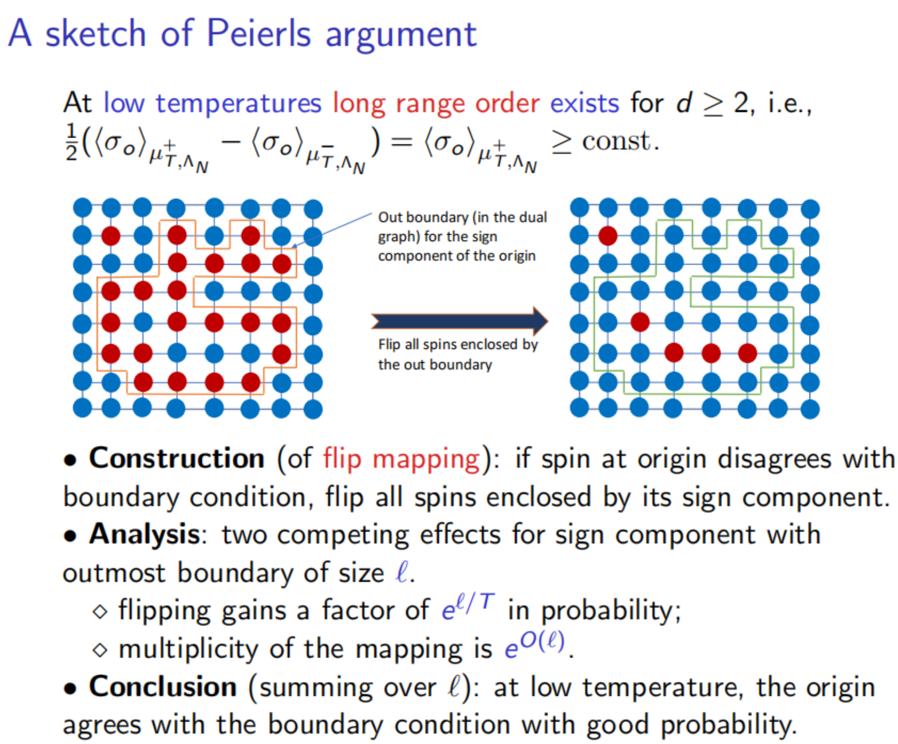

图 4: Peierls论证的原理，来自丁剑的Beamer文档，
网址是https://mathpicture.fas.harvard.edu/sites/g/files/omnuum6611/files/mathpicture/files/ding-rfim.pdf.

4. 还差最后一步，需要一个计数论证，数出包含0点的轮廓的数量. 一个消极的估计是固定长度$k \geq 4$之时，轮廓数$\leq 2k \cdot 3^{k-1}$（书上式3.39）. 于是这个求和就有一个上界$2\sum_{k\geq 4} k \cdot 3^k e^{-2\beta k}$，很容易可以由此计算出$d=2$之时的一个悲观估计$\beta_c < 0.88$（实际上$\beta_c = 0.441$对于$\mathbb{Z}^2$）.

Peierls论证不能推广到$d=1$的情形，问题出在我们并没有一个长度逐渐增加的轮廓被我们控制（因为只有一条线，如果硬要说轮廓就是两个端点），轮廓的数量也不受控制. 事实上$d=1$的时候不存在相变. 但高维推广都没有任何问题.

定理 1.2. $d \geq 2$，$\beta_c < \infty$.

2 高温无序性

接下来我们考虑高温情形，也就是β接近于0之时. 这个时候系统呈现出无序相，热涨落显著强于自旋相互作用，即在热力学极限下我们失去了关联性，σ_0和σ_i之间的值不再强相关，系统无长程序，自发磁化消失. 事实上，$\langle\sigma_0\sigma_i\rangle - \langle\sigma_0\rangle\langle\sigma_i\rangle \sim e^{-|i\text{到}0\text{距离}|/\xi(\beta)}$且$\beta \to 0$之时关联长度$\xi(\beta) \to 0$，自旋仅在短程内微弱关联，并且长程迅速以指数衰减.

这个时候我们重写一下Hamilton量，来做高温展开.

$$Z = (\cosh\beta)^{|E_\Lambda|} \sum_{E \subset E_\Lambda} (\tanh\beta)^{|E|} \sum_{\omega\in\Omega_\Lambda} \prod_{i\sim j\text{对位于}E\text{中}} \omega_i\omega_j.$$

这个时候，一旦从某个$i \in \Lambda$连出的落在E中的边为奇数条，便会给出0的贡献，否则贡献为$2^{|\Lambda|}$. 把满足所有$i \in \Lambda$中满足这个条件的E记成偶图集合E_Λ^{even}，因此配分函数Z又可以被写成

$$Z = 2^{|\Lambda|}(\cosh \beta)^{|E_\Lambda|} \sum_{E \in E_\Lambda^{\text{even}}} (\tanh \beta)^{|E|}.$$

用同样的方法可以得到

$$\langle \sigma_0 \rangle = Z^{-1} 2^{|\Lambda|}(\cosh \beta)^{|E_\Lambda|} \sum_{E \in E_\Lambda^0} (\tanh \beta)^{|E|} = \frac{\sum_{E \in E_\Lambda^0} (\tanh \beta)^{|E|}}{\sum_{E \in E_\Lambda^{\text{even}}} (\tanh \beta)^{|E|}}.$$

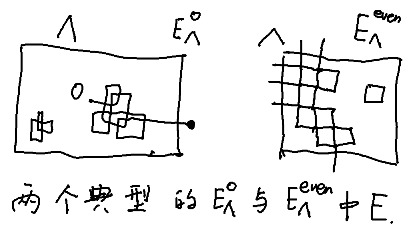

图 5: E_Λ^0与E_Λ^{even}的图示

自然E_Λ^0定义方式类似，只不过要求除了其他点以外，0这个点要连出奇数条边. 注意，这似乎违背了握手原理？其实不然，这说明E“连到了”Λ的外面. 也正因如此，我们可以将E分解为$E_0 \cup E'$，其中E_0是这个图的一个包含0这个点的连通分支，那么E_0就要包含连到Λ外面的边. 同样使用和Peierls论证过程中关于翻转操作的讨论，不是每一个E'都来自于一个E，但是给定一个E_0之后可以倒推出的E是唯一的，所以会给出一个分子$\leq$分母的结果. 因此我们就有

$$\langle \sigma_0 \rangle \leq \sum_{E_0 \in E_\Lambda^0, E_0 \text{连通}} (\tanh \beta)^{|E|}.$$

同样我们需要两个估计，一个是给定$|E_0| = l$下$\tanh \beta < \beta$对求和项的估计，这个很容易，因为求和项不会超过β^l. 另一个是给定$|E_0| = l$之下，连通的这样的E_0的数量的控制. 这里要用到原书引理3.38.

引理 2.1. *对于一个连通图G，从任何一个顶点出发，存在一个恰走过G的每条边两次的路径.*

注意和图论中*Euler*定理的区别. 这里我们需要走过每条边恰两次.

乍一看起来这个定理不知道在说什么，但其实我们可以有效地计算出这样一条路径出来. 这就是孩子们游戏中最常见的一种*走迷宫策略*. 这有点像是*深度优先搜索*（*DFS*）算法，但区别在于，我们要恰好走每条路两次，而DFS通常在实际中不需要回溯那么多次（人类不像甲壳虫一样有强迫症！）.

所谓的走迷宫策略，可以归纳成一首诗.

勇往直前探新路，无路可退便回头。每条通道走两遍，迷宫再大不发愁！

意思是这样的：

- 首先从一个起点出发.
- 如果在某个地点一条新路还没有走过，先去尝试走这条新路.
- 假如走到了一个“死路”，也就是其他所有的路都已经被走过，那么回溯到上一个地点（不正确回溯的后果见图）.

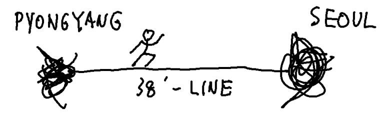

图 6: 为什么要回溯？想象一下白天你从右边的城市来到了左边，但晚上你脱被头寒了要回到右边，这个时候你只能一直往右走，可千万不能再走这条路第三次啊！（回溯一定要往回走！）

当然，数学是要求严谨性的，在给出证明之前，我们需要找到这个策略奏效的条件.

- 首先，连通性保证了无遗漏. 因为所有的点都相连，而这种“深度优先”的策略意味着你会覆盖全图，不会错过任何一个角落.
- 其次，回溯机制保证了每条边恰好走两次. 如果你不是回溯而是换一条路，你就有可能走一条路超过2次！
- 最后，执行这个算法的时候，你无需记忆全图！要点在于，你要记住你怎么来的，以及你走过不同路的次数来避免重复. 在算法上这可以用堆栈来实现.
- 我要发出警告，这里存在一个小的思维陷阱！连通图中仍可能存在环路（比如说$A-B-C-A$），但此时策略依然有效. 当你从A到B再到C的时候，你会先探索$C-A$，再回溯，最终每条边还是被走过两次.

证明. 使用归纳法. 略. □

回到证明之中，那么一个长度为l的连通图E_0，就必然其数量不会超过长为$2l$的路径的数量，也就不会超过$(2d)^{2l}$这么多（因为$\mathbb{Z}^d$每个点都连出去$2d$条边）.

$$\langle \sigma_0 \rangle \le \sum_{l \ge n} (4d^2\beta)^l \le e^{-cn}.$$

其中$\beta < 1/4d^2$. 取热力学极限之后，右边就是0.

定理 2.2. $d \ge 1$，$\beta_c > 0$.

3 有磁场时唯一性

在这一节我们聚焦于有磁场时候的变化，会固定一个逆温度$\beta > 0$，考虑h变化时配分函数Z的行为.

$h = 0$且$\beta > \beta_C$之时我们指出在临界温度会出现ψ不可微现象，存在相变；但$h \neq 0$之时m有着与外场h符号一致的偏向性，似乎不存在相变. 这是因为我们有所谓的*磁化现象*，两种态不再对称因而只有一种是Gibbs基本态.

我们知道，

$$\psi = \frac{\log Z}{|\Lambda|}.$$

而Z是一些e^{-H}的和自然是大于0的关于h的实解析函数. 因此ψ也应该是一个良好定义的解析函数. 似乎我们没有遇到什么矛盾. 但我们要注意，

物理上真实的相变只发生在热力学极限下！

当$\Lambda \to \mathbb{Z}^d$时，ψ的解析性质可能不再被保持！比如在低温下，根据Peierls论证，$h=0$便不是如此. 而我们希望$h \neq 0$的时候，这样的解析性质能被保持，换言之，就不存在相变.

现在我们有两条路可以选. 第一条路是这样的，根据原书中的注记3.41，此时我们也可以用另一个书中未提及的GHS不等式证明$h \mapsto \langle \sigma_0 \rangle^+$在$h \in (0,+\infty)$上面是凸函数（或者凹，我从来记不住区别），因此连续，从而其积分也就是ψ给出一个$h>0$可微函数，$h<0$与之对称同理，再根据定理3.34，事实上这和实解析差的不是很远.

但实际上还有第二条路，更加优雅，那就是对于有限区域的配分函数，把h的定义域先延拓到整个复平面.

3.1 渔樵问对2：为什么要延拓到整个复平面？

某种意义上，这种延拓方式相当于开启了某种“上帝视角”. 我们知道事物总有两面，一面是“谱侧”，另一侧是“几何侧”.

回忆一下我们知道数论中的von Mangoldt公式形如

$$\psi(x) = x - \sum_\rho \frac{x^\rho}{\rho} - \frac{1}{2}\log\left(1 - \frac{1}{x^2}\right) - \log 2\pi$$

左侧是某种数论信息，可以理解为“几何侧”发生的事情，关注于素数分布也就是$\psi(x)$的变化（很遗憾这里也用到了ψ这个记号，但这也是标准的）. 而右侧分成了若干项，包括一个渐进增长的主项，以及反映波动的Riemannζ函数的非平凡零点的项，还有“无穷远”处的一些Γ-因子等等. 而ρ这样的东西有点像是Fourier展开后描述波动的振幅和频率的量，是某种“谱侧”发生的事情.

又比如我们知道在线性代数里面，一个$n \times n$矩阵A的迹（trace）一般有两种计算方式.

$$\mathrm{tr}(A) = \sum_{1 \le i \le n} a_{ii} = \sum_{1 \le i \le n} \lambda_i.$$

前者是一种“几何侧”的计算方式，将对角线元素求和；而后者是一种“谱侧”的方式，将A这个矩阵的特征值求和.

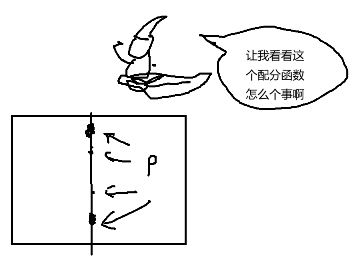

图 7: 上帝视角下的配分函数（谱侧）

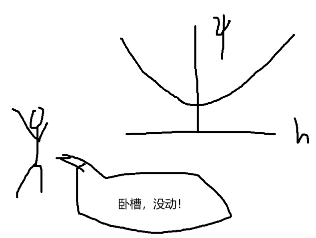

图 8: 人类视角下的配分函数（几何侧）

我们现在的想法和Riemann当年将ζ函数延拓到复平面的想法有点类似，也就是我们要看“谱侧”的信息. Z这个函数作为实函数当然是一个正的实解析函数，但延拓成复平面上的函数之后，“谱侧”能告诉我们一些不太直接从正面观察到的信息，有可能能够从其零点的信息中做出判断，事实上这是Lee-Yang单位圆定理将会告诉我们的事情.

顺便一说，这是一种在代数与数论中极为常见的哲学，甚至也出现在一些来自分析的等式中. 比如Poisson求和公式、Riemann-Roch定理、Weil显式公式、Selberg迹公式.

接下来我们回到Lee-Yang单位圆定理的叙述上.

定理 3.1. *在进行解析延拓之后，$Z_{\Lambda;\beta,h}$零点在纯虚数线$\Re(h)=0$上.*

其实这是一个一般性的定理，我们只需要用到任意两个点i和j之间有某种正的耦合（甚至耦合常数不必相同），不需要用到格点形状的信息. 因此我们接下来假设在顶点集合V和边集E上工作.

原书中的证明使用了Asano归并技巧，我们使用一个更加易懂的复分析证明. 这个证明来自于刘党政老师的讲义，记号会有点不同. 我们会按照他的记号.

现在我们假设有N个点，每个点σ_i仍然可以取±1两个值. Hamilton量H有如下形式

$$H=-\sum_{1\le i<j\le N}J_{ij}\sigma_i\sigma_j-h\sum_{1\le i\le N}\sigma_i.$$

J_{ij}是一些非负的耦合常数. 且$e^{-\beta H(\sigma)}$还是Gibbs测度. 这样记$\sigma=(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_N)$与$[N]=\{1,2,3,\cdots,N\}$，与

$$X(\sigma)=\{i\in[N]:\sigma_i=-1\}$$

是-1的点组成的集合.

$$Z_{N;\beta,h}=e^{\beta hN+\beta\sum_{i<j}J_{ij}}\sum_{\sigma}e^{\beta h\sum_i(\sigma_i-1)+\beta\sum_{i<j}J_{ij}(\sigma_i\sigma_j-1)}.$$

接下来换元$z=e^{-2\beta h}$，且$a_{ij}=a_{ji}=e^{-2\beta J_{ij}}$. 注意到这个时候虚直线被映射到单位圆周了.

那么可以把Z写成关于z的多项式

$$Z=e^{\beta hN+\beta\sum_{i<j}J_{ij}}\sum_{X\subset[N]}z^{|X|}\prod_{i\in X}\prod_{j\notin X}a_{ij}=\star\cdot P_A(z)$$

其中$A=(a_{ij})$是一个对称矩阵.

比如说$N=3$的时候这个$P_A(z)$就形如

$$P=1+a_{12}a_{13}z_1+a_{21}a_{23}z_2+a_{31}a_{32}z_3+a_{13}a_{23}z_1z_2+a_{12}a_{32}z_1z_3+a_{21}a_{31}z_2z_3+z_1z_2z_3.$$

Yang的想法是我们应该使用本手，化为多元多项式

$$P_A(z_1,\cdots,z_N)=\prod_{S\subset[N]}z^S\prod_{i\in S}\prod_{j\notin S}a_{ij},\quad z^S=\prod_{i\in S}z_i.$$

定理 3.2 (Lee-Yang单位圆定理)**.** *设A为Hermite矩阵，若所有的$|a_{ij}|\le 1$，那么$|z_1|<1,\cdots,|z_N|<1$之时必定有*

$$P_A(z_1,\cdots,z_N)\neq 0.$$

特别地，$P_A(z,\cdots,z)=0$的所有根都在单位圆上.

证明. 用归纳法，$N=1$，假设$N\ge 2$且对$N-1$结论成立，接下来直接把$[N]$的子集分成两类：包含N的和不包含N的. 利用$a_{ij}=\overline{a_{ji}}$，A的左上角$(N-1)\times(N-1)$子式为B，那么

$$P_A(z_1,\cdots,z_N)=P_B(a_{1,N}z_1,\cdots,a_{N-1,N}z_{N-1})+(z_1\cdots z_N)\overline{P_B(a_{1,N}/\overline{z_1},\cdots,a_{N-1,N}/\overline{z_{N-1}})}.$$

比如$N=3$时

$$P=(1+a_{12}(a_{13}z_1)+a_{21}(a_{23}z_2)+(a_{13}z_1)(a_{23}z_2))+z_1z_2z_3\overline{(\cdots)}.\quad \text{(括号里的东西我懒于写出)}$$

我们先来证明：

$$\sup_{|a_{i,N}|\le 1,|z_k|\le 1}|\frac{P_B(a_{1,N}/\overline{z_1},\cdots,a_{N-1,N}/\overline{z_{N-1}})}{P_B(a_{1,N}z_1,\cdots,a_{N-1,N}z_{N-1})}|\le 1$$

证明需要使用所谓的最大模原理. 根据归纳假设，P_B在单位圆内部是全纯的（零点在边界上），所以可以使用最大模原理. 而所有的$|z_k|=1$时候我们知道右边其实严格等于1（注意到$1/\overline{z_k}=z_k$，当$|z_k|=1$之时）.

现在根据归纳假设，第一项非0，而根据归纳假设，加上条件$|z_k|<1$，就能推出第二项模长严格小于第一项，所以之和非0.

接下来我还要说明我们是有对称性的，

$$P_A(z,\cdots,z)=z^N\overline{P_A(1/\overline{z},\cdots,1/\overline{z})}.$$

所以零点都只在单位圆上.

□

最后，我们说明这为什么能推出$h\neq 0$时候没有相变. 因为在整个取热力学极限的过程中，谱侧Z的零点会发生移动. 在$\beta>\beta_c$且$h=0$的时候我们已经看到会发生相变，可以被理解为随着系统大小N增大，这些零点越来越多，互相推搡，最后这些零点在极限下被“挤压”到了实轴上！但是，由于这些零点最开始都位于虚轴上，所以它们若被“挤压”到了实轴上，唯一可能的点是$h=0$!

定理 3.3. *$h\neq 0$之时不存在相变.*