§3 Ising model
第 3 次作业，2023.06.11，本次作业 ddl，2023.06.25

1 习题解答

1. 设维数 $d=1$，周期 Ising model 对应的 Hamiltonian 为

$$H(\sigma)=-J\sum_{k=1}^{N}\sigma_k\sigma_{k+1}-h\sum_{k=1}^{N}\sigma_k \tag{1}$$

其中 $\sigma_{k+1}=\sigma_1$，考虑 $M_N=\sum_{k=1}^{N}\sigma$ 对应的大数律和中心极限定理。

Proof. 考虑 M_N 的矩母函数

$$\begin{aligned}<e^{\beta t M_N}> &= \frac{1}{Z_{N;\beta,h}}\sum_{\{\sigma\}}e^{-\beta H(\sigma)}\cdot e^{\beta t\sum_{k=1}^{N}\sigma_k}\\ &= \frac{1}{Z_{N;\beta,h}}\sum_{\{\sigma\}}e^{\beta J\sum_{k=1}^{N}\sigma_k\sigma_{k+1}+\beta(h+t)\sum_{k=1}^{N}\sigma_k}\\ &= \frac{Z_{N;\beta,h+t}}{Z_{N;\beta,h}}.\end{aligned} \tag{2}$$

于是只需考虑 $Z_{N;\beta,h}$ 的计算（参考2.2）。类似 $h=0$ 时的 Ising model 的计算，我们知道其为

$$Z_{N;\beta,h}=A^N(0,0)+A^N(1,1). \tag{3}$$

其中 $A^N(i,j)$ 表示矩阵的第 (i,j) 个分量，并且

$$A=\begin{pmatrix}e^{\beta J+\beta h} & e^{-\beta J}\\ e^{-\beta J} & e^{\beta J-\beta h}\end{pmatrix} \tag{4}$$

计算其特征值为

$$\begin{aligned}\lambda_h &= \frac{e^{\beta J+\beta h}+e^{\beta J-\beta h}\pm\sqrt{(e^{\beta J+\beta h}-e^{\beta J-\beta h})^2+4e^{-2\beta J}}}{2}\\ &= e^{\beta J}\frac{\cosh(\beta h)\pm\sqrt{\sinh^2(\beta h)+4e^{-4\beta J}}}{2}.\end{aligned} \tag{5}$$

从而我们要求的矩母函数

$$<e^{\beta t M_N}>=\frac{Z_{N;\beta,h+t}}{Z_{N;\beta,h}}=\frac{(\lambda_{h+t}^{+})^N+(\lambda_{h+t}^{-})^N}{(\lambda_h^{+})^N+(\lambda_h^{-})^N} \tag{6}$$

由于 N 会很大，而 $|\lambda^-| < |\lambda^+|$，我们只要考虑 $(\frac{\lambda_{h+t}^+}{\lambda_h^+})^N$ 的渐近行为。

$$
\begin{aligned}
< e^{\beta t M_N} > &\sim (\frac{\lambda_{h+t}^+}{\lambda_h^+})^N \\
&= (1 + \frac{\lambda_{h+t}^+ - \lambda_h}{\lambda_h^+})^N \\
&\sim (1 + t\frac{1}{\lambda_h^+}\frac{d\lambda_h^+}{dh})^N \\
&\sim (1 + t\frac{d\log\lambda_h^+}{dh})^N.
\end{aligned} \tag{7}
$$

取 $t \sim \frac{s}{N}$，我们可以得到 M_N 的大数定律现象

$$
< e^{\beta s \frac{M_N}{N}} > \quad \Rightarrow \quad (1 + t\frac{d\ \log\lambda_h^+}{d\ h})^N \sim e^{s\frac{d\log\lambda_h^+}{dh}}. \tag{8}
$$

也就是

$$
\frac{M_N}{N} \to \frac{1}{\beta}\frac{d\log\lambda_h}{dh}. \tag{9}
$$

我们再考虑其波动，考虑

$$
\begin{aligned}
< e^{\beta t M_N} > e^{-t\frac{d\log\lambda_h^+}{dh}} &\sim (\frac{\lambda_{h+t}^+}{\lambda_h^+} e^{-t\frac{d\log\lambda_h^+}{dh}})^N \\
&= e^{N(\log\lambda_{h+t}^+ - \log\lambda_h^+ - t\frac{d\log\lambda_h^+}{dh})} \\
&\sim e^{N\frac{t^2}{2}\frac{d^2\log\lambda_h^+}{dh^2}}.
\end{aligned} \tag{10}
$$

最后一步将 $\log\lambda_h^+$ taylor 展开到第二阶，我们知道要取 $t \sim \frac{s}{\sqrt{N}}$，并且此时有中心极限定理。 $\square$

2. 证明 $\exists c_-, c_+ > 0$ 使得 $\forall m \in A_N := \{-1 + \frac{2k}{N} : k = 0, 1, \ldots, N\}$

$$
\frac{c_-}{\sqrt{N}} e^{NS(m)} \le C_N^{\frac{1}{2}N(1+m)} \le c_+\sqrt{N}e^{NS(m)}. \tag{11}
$$

其中

$$
S(m) = -\frac{1-m}{2}\log\frac{1-m}{2} - \frac{1+m}{2}\log\frac{1+m}{2}. \tag{12}
$$

Proof.

$$
\begin{aligned}
C_N^{\frac{1}{2}N(1+m)} e^{-NS(m)} &= \frac{N!}{(\frac{1+m}{2}N)!(\frac{1-m}{2}N)!} e^{-NS(m)} \\
&= e^{\sum_{i=1}^N \ln i - \sum_{i=1}^{\frac{1+m}{2}N} \ln i + \sum_{i=1}^{\frac{1-m}{2}N} \ln i - NS(m)}.
\end{aligned} \tag{13}
$$

对??两边取对数，实际上就是要证明存在常数 C_1, C_2 使得

$$C_1 - \frac{\ln N}{2} \le \sum_{i=1}^{N} \ln i - \sum_{i=1}^{\frac{1+m}{2}N} \ln i - \sum_{i=1}^{\frac{1-m}{2}N} \ln i - NS(m) \le C_2 + \frac{\ln N}{2}. \quad (14)$$

我们有如下渐近公式（可以用 Euler–Maclaurin formula 证明）

$$\sum_{i \le x} \ln x \sim (x-1)\ln x + \frac{x}{2} + O(1) + O(1/n). \quad (15)$$

带入 (14) 即可证明。 □

3. 设 $\zeta : \mathbb{N} \to \mathbb{R}^+$，考虑如下修改后的 Curie-Weiss 哈密顿量 $(h = 0)$

$$H_{N;\beta,0} = -\frac{\beta}{\zeta(N)} \sum_{i,j=1}^{N} \omega_i \omega_j. \quad (16)$$

设 $m_N = \frac{M_N}{N}$，说明有如下结论：

a. 如果 $\lim_{N\to\infty} \frac{\zeta(N)}{N} = \infty$, 则 $m_N \to 0$ 依概率收敛对于所有 $\beta \ge 0$.

b. 如果 $\lim_{N\to\infty} \frac{\zeta(N)}{N} = 0$, 则 $|m_N| \to 1$ 依概率收敛对于所有 $\beta > 0$.

这说明只有当 $\zeta(N)$ 和 N 同阶时 m_N 才会有与 β 有关的非平凡表现。

Proof. 由于

$$H_{N;\beta,0} = -\frac{\beta}{\zeta(N)} M_N^2 = -\frac{\beta}{\zeta(N)} N^2 m_N^2. \quad (17)$$

我们可以得到

$$\mathbb{P}(m_N = m) \propto e^{\frac{\beta}{\zeta(N)} N^2 m^2} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N}. \quad (18)$$

考虑 $\mathbb{P}(m_N)$ 可以从 $e^{\frac{\beta}{\zeta(N)} N^2 m_N^2} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N}$ 的渐近行为考虑。

由前一题我们知道 $\log \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} \sim NS(m)$. 所以

$$\log e^{\frac{\beta}{\zeta(N)} N^2 m_N^2} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} = N(\frac{\beta N}{\zeta(N)} m^2 + S(m)). \quad (19)$$

从而根据 $\frac{N}{\zeta(N)}$ 的不同关系，我们可以得到不同情况时 $N \to \infty$ 的主要项

当 $\frac{N}{\zeta(N)} \to 0$ 时，$S(m)$ 起到主要作用，从而在使 $S(m)$ 最大的 $m = 0$ 外，其他部分相对于此都会有个指数衰减的速度，从而此时 m_N 会依概率收敛到 0。而当 $\frac{N}{\zeta(N)} \to \infty$ 时，$\frac{\beta N}{\zeta(N)} m^2$ 是主项，从而 m_N 会以指数速度往使得 $\frac{N\beta}{\zeta(N)} N m^2$ 最大的 m 集中，也就是 $|m_N| \to 1$ 依概率收敛。 □

注 1.1. 这种分析在物理里面叫鞍点分析 *(Saddle point analysis)*，来自现实世界观测到的复杂系统总是处在某种量取极值的状态（最大熵，最低能量等等）的物理直觉，上面只是把这种直觉用数学算了一遍，极大值 m_0 之外的量出现的概率都会以关于 $e^{-N(f(m_0)-f(m))}$ 的速度随着 $N \to \infty$ 指数小。

4. 说明极限
$$\psi_\beta^{CW}(h) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log Z_{N;\beta,h}^{CW}$$
存在，并且对于 h 是凹 (凸) 函数的，进一步其等于自由能的 Legendre 变换：
$$\psi_\beta^{CW}(h) = \max_{m\in[-1,1]} \{hm - f_\beta^{CW}(m)\}.$$

Proof. 我们可以计算其对应的配分函数。
$$Z_{N;\beta,h}^{CW} = \sum_{i=1}^{N} \binom{N}{i} e^{d\beta(\frac{N-2i}{N})^2 N + h\frac{N-2i}{N}N}. \tag{20}$$

我们找到使得 $\frac{1}{N}\log\binom{N}{i}e^{d\beta(\frac{N-2i}{N})^2N+h\frac{N-2i}{N}N}$ 最大的那个 i，则其他的项会以指数的速度小于那一项。取对数之后主要项由那个 i 所给出。设 $\frac{N-2i}{N} = m$ 则我们考虑下式的渐近行为（如前一题中考虑的）
$$e^{(d\beta m^2+hm)N}\binom{N}{\frac{1-m}{2}N}.$$

用 Stirling 公式或者式 (**??**) 其渐近行为为:
$$\frac{1}{N}\log \mathbb{P}(m_N = m) \sim hm + d\beta m^2 - (\frac{1+m}{2}\log(\frac{1+m}{2}) + \frac{1-m}{2}\log(\frac{1-m}{2})). \tag{21}$$
可以将其他项都放成这个，只不过是多了个 $\frac{\log N}{N}$ 这个无穷小量，所以 $\psi_\beta^{CW}(h) = \frac{1}{N}\log Z_{N;\beta,h}^{CW}$ 是存在的，并且
$$\psi_\beta^{CW}(h) = \max_{m\in[-1,1]} \{hm - f_\beta^{CW}(m)\}.$$

□

2 Ising model

2.1 背景

日常生活中我们经常会遇到相变现象，比如一定温度下水的稳定状态会从液体变为气体，或者低于一定温度液体会结成冰。热力学这一唯象学通过最大熵原理等一些观点对这种非理想气体的三相变化做出了解释，但是在现实世界中，相变无处不在而不仅仅是水的三相态中。而且同时随着统计物理的发展，人们希望从更底层的观点去考察相变是否会发生。最为知名的模型便是从永磁体的相变。具体来说是这

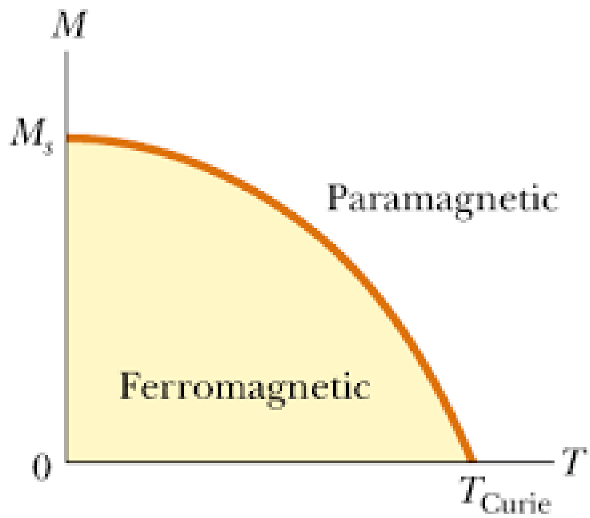

Figure 1: 低于 T_c 有磁性，高于 T_c 失去磁性

样的，对于每种特定的永磁体材料，存在居里温度 (Curie temperature)T_c，当温度 $T < T_c$ 时物体仍然具有永磁性；而当 $T > T_c$ 时，物体则失去它的永磁性，并且可以被外部磁场影响产生诱导磁性。(如图2.1)

为了解释这一相变我们抽象出 Ising model(每个点上可取 $\sigma = \pm 1$ 表示那个原子的磁性朝向)，以及其平均场模型 Curie-Weiss model。简便起见我们就介绍最简单的定义，考虑 d 维整数格点 $N \times N \times \ldots \times N$，最近邻之间连一条边。给定一种 $\{\sigma\}$ 的分配方式，我们会有其对应的能量 (或者 Hamiltonian) 为

$$H(\sigma) = -J \sum_{xy} \sigma_x \sigma_y - h \sum_x \sigma_x. \tag{22}$$

其中 σ_x 表示 x 处的取值，xy 表示对所有图上相邻的 (x, y) 求和。模型对应的配分函数 (Partition function) 为

$$Z_{\beta;N,h} = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H(\{\sigma\})}. \tag{23}$$

统计物理告诉我们，有了配分函数我们就能得到系统我们关心的所有宏观性质。我们可以看到，$Z_{\beta;N,h}$ 实际上关于 β, h 是一个光滑函数，理应不出现相变。但是现实世界中 $N \to \infty$，连续函数的极限不一定再是连续函数，这也是出现相变的原因，当 N 足够大时，新的现象会涌现出来。具体来说结果是这样的，$d = 1$ 的时候不会出现相变，$d \geq 2$ 的时候系统会出现相变，当 $d \geq 5$ 时系统性质可以用 Curie-Weiss 模型很像。最有趣的便是 $2 \leq d \leq 4$ 的情况，最近也有很多新的数学在这几种情况里发生。

譬如 $d = 2$ 时，临界温度 T_c 时 Ising model 会具有共形不变性，因此可以用物理中的 CFT(conformal field theory) 来研究其连续的极限。CFT 可以由代数上的 Virasoro 代数刻画，但是这个世纪初，人们发现我们可以考虑一组概率下共形不变的曲线 (Schramm–Loewner evolution)，或者一族共形不变的随机场 (Gaussian free field 等)，用这些工具来刻画这些统计物理模型更加精细的性质。

$d=3,4$ 时则更加困难，Michael Aizenman, Hugo Duminil-Copin 2021 年发表在 Annals of mathematics 上的结果说明 $d=4$ 时它的极限场应该也是一个 Gaussian 过程（对应到平均场情况）。

2.2 1d Ising model 计算

故事讲完了，我们来说点数学。这一节中我们考虑 1 维的 Ising model，并且使用转移矩阵方法计算他的配分函数和点关联函数 $<\sigma_0\sigma_n>$。具体可以参看这个lecture note。

我们首先定义哈密顿量

$$H(\{\sigma\}) = -J\sum_k^N \sigma_k\sigma_{k+1} - h\sum_k^N \sigma_k. \tag{24}$$

则每一个态出现的概率正比于 $e^{-\beta H(\{\sigma\})}$，注意到 $H(\{\sigma\})=\sum_k E(\sigma_k,\sigma_{k+1})$，也就是只由 k 和 $k+1$ 的局域作用影响，我们有

$$e^{-\beta H(\{\sigma\})} = \prod_k e^{-\beta E(\sigma_k,\sigma_{k+1})} = \prod_{k=1}^N A_k(\sigma_k,\sigma_{k+1}) = \prod_{k=1}^N A(\sigma_k,\sigma_{k+1}). \tag{25}$$

其中

$$A_k = A = \begin{pmatrix} e^{\beta J+\beta h} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J-\beta h} \end{pmatrix} \tag{26}$$

对 $e^{-\beta H(\{\sigma\})}$ 求和得到配分函数

$$\begin{aligned} Z_{\beta;N,h}(\sigma_1,\sigma_{N+1}) &= \sum_{\{\sigma\}}^n e^{-\beta H(\{\sigma\})} \\ &= \sum_{\{\sigma\}}\prod_{k=1}^N A(\sigma_k,\sigma_{k+1}) \\ &= A^N(\sigma_1,\sigma_{N+1}) \end{aligned} \tag{27}$$

这时候我们只要将矩阵 t 对角化，就能得到边界条件 σ_1,σ_{n+1} 时的配分函数。而周期边界条件就表示 $\sigma_1=\sigma_{N+1}$，

$$Z_{\beta;N,h}(\text{周期}) = Z_{\beta;N,h}(1,1) + Z_{\beta;N,h}(-1,-1) = \mathrm{Tr}(A^N) = (\lambda_h^+)^N + (\lambda_h^-)^N. \tag{28}$$