

近似方法

由于高维物理系统本身的复杂性，其配分函数往往难以解析求解。这时，我们利用近似方法求解系统的配分函数和热力学势，以获得系统的宏观信息，解释其行为。

1 Ising模型的平均场近似

Ising 模型的哈密顿量为：

$$\mathcal{H} = -\frac{\mathcal{J}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

其对应的配分函数为：

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\frac{\beta\mathcal{J}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + \beta B \sum_i \sigma_i} = \sum_{\{\sigma\}} e^{\frac{\beta\mathcal{J}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j} e^{\beta B \sum_i \sigma_i} \quad (2)$$

可以看出，由于耦合项 $e^{\frac{\beta\mathcal{J}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j}$ 的存在，配分函数的求解变得困难。为了消除耦合项，简化配分函数的求解，我们引入平均场近似。

1.1 平均场近似

平均场近似引入自旋的平均值，并假设每个自旋的涨落与均值相比可忽略。通过这种方式，可以将配分函数中的交叉项转化为易于求解的线性项。我们引入自旋的统计平均：

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle \quad (3)$$

实际上，这个统计平均就是 Ising 模型系统的磁化强度 m 。此时，有：

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= (\sigma_i + \langle \sigma \rangle - \langle \sigma \rangle) (\sigma_j + \langle \sigma \rangle - \langle \sigma \rangle) \\ &= \langle \sigma \rangle^2 + \langle \sigma \rangle [(\sigma_i - \langle \sigma \rangle) + (\sigma_j - \langle \sigma \rangle)] + (\sigma_i - \langle \sigma \rangle) (\sigma_j - \langle \sigma \rangle) \\ &\cong \langle \sigma \rangle^2 + \langle \sigma \rangle [(\sigma_i - \langle \sigma \rangle) + (\sigma_j - \langle \sigma \rangle)] \\ &= -\langle \sigma \rangle^2 + \langle \sigma \rangle (\sigma_i + \sigma_j) \end{aligned} \quad (4)$$

其中，第三行假设了自旋和自旋平均是一阶小量，忽略了自旋和自旋平均差值的二次方项。由此：

$$\begin{aligned} \sum_{\langle i,j \rangle} -\langle \sigma \rangle^2 + \langle \sigma \rangle (\sigma_i + \sigma_j) &= -Nz\langle \sigma \rangle^2 + z\langle \sigma \rangle \sum_i \sigma_i + z\langle \sigma \rangle \sum_j \sigma_j \\ &= -Nz\langle \sigma \rangle^2 + 2z\langle \sigma \rangle \sum_i \sigma_i \end{aligned} \quad (5)$$

其中， z 为某粒子周围所有可自旋相互作用的粒子数，反映了空间的维度信息与粒子的排布情况。于是，交叉项化为：

$$e^{\frac{\beta J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j} \cong e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2} + \beta J z \langle \sigma \rangle \sum_i \sigma_i} \quad (6)$$

由此，配分函数的平均场近似为：

$$Z_N \cong \sum_{\{\sigma\}} e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} e^{(\beta J z \langle \sigma \rangle + B) \sum_i \sigma_i} \quad (7)$$

此时 Z_N 就是可以计算的了：

$$\begin{aligned} Z_N &\cong \sum_{\{\sigma\}} e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} e^{(\beta J z \langle \sigma \rangle + B) \sum_i \sigma_i} \\ &= e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} \sum_{\{\sigma = \pm 1\}} e^{(\beta J z \langle \sigma \rangle + B) \sum_i \sigma_i} \\ &= e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} \sum_{\{\sigma = \pm 1\}} \prod_i e^{(\beta J z \langle \sigma \rangle + B) \sigma_i} \\ &= e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} \sum_{\{\sigma = \pm 1\}} \prod_i e^{(\beta J z \langle \sigma \rangle + B) \sigma_i} \\ &= e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} \prod_i \sum_{\{\sigma_i = \pm 1\}} e^{(\beta J z \langle \sigma \rangle + B) \sigma_i} \\ &= e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} \prod_i 2 \cosh (\beta J z \langle \sigma \rangle + B) \\ &= e^{-\frac{\beta J N z \langle \sigma \rangle^2}{2}} [2 \cosh (\beta J z \langle \sigma \rangle + B)]^N \end{aligned} \quad (8)$$

此时，我们就得到了 Ising 模型的平均场近似解。

1.2 二维 Ising 模型下的铁磁相变

二维时， $z = 2$ ，此时有单粒子的热力学势：

$$F(T, B) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N = \frac{1}{2} \mathcal{J} \langle \sigma \rangle^2 - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta \mathcal{J} \langle \sigma \rangle + B)] \quad (9)$$

系统的磁化强度为：

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle = \langle \sigma \rangle \quad (10)$$

磁性系统在正则系综下有：

$$m = -\frac{\partial F}{\partial B} \quad (11)$$

带入此时的 F 有：

$$m = \tanh(\beta \mathcal{J} m + B) \quad (12)$$

在 $B \rightarrow 0$ 时，若该关于 m 的方程仍有非零解，则系统呈现出铁磁性。使方程存在非零解的 T 称为铁磁相变的临界温度，记为 T_c 。具体的求解可以通过分析方程关于 m 的图像实现，在此不赘述。

1.3 平均场近似的另一种理解

在 Ising 模型的平均场近似中，我们利用自旋相对于其平均值的偏移/涨落较小这一点，导出了配分函数中耦合项的平均场近似：

$$\sigma_i \sigma_j = -Nz \langle \sigma \rangle^2 + 2z \langle \sigma \rangle \sum_i \sigma_i \quad (13)$$

但是，书中对于平均场近似还提出了另一种理解：平均场近似实际上就是说，与某个粒子自旋相互作用的任意一个粒子自旋的作用效果，可以由其自旋的热力学平均带来的效果取代。下面将论述该表述与先前忽略自旋涨落二阶项之表述的一致性。

仅相邻粒子发生相互作用时，Ising 模型系统的哈密顿量为：

$$\mathcal{H} = -\frac{\mathcal{J}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \quad (14)$$

其中第一项为耦合项，反映了粒子自旋之间相互作用的方式， $\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$ 表示只有相邻的粒子之间存在自旋相互作用。现在我们来考虑第 i 个粒子，在 Ising 模型中，它与 z 个相邻的粒子发生自旋相互作用。根据前文所述的假设，每一个粒子自旋的贡献都可以由其热力学平均近似。于是根据这个规则，哈密顿量可以改写为：

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{\mathcal{J}}{2} \left(\sum_i \sigma_i \sum_{j \text{ near } i} \sigma_j + \sum_j \sigma_j \sum_{i \text{ near } j} \sigma_i \right) - B \sum_i \sigma_i \\ &= -\mathcal{J} \sum_i \sigma_i \sum_{j \text{ near } i} \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \\ &\cong -\mathcal{J} \sum_i \sigma_i \sum_{j \text{ near } i} \langle \sigma_j \rangle - B \sum_i \sigma_i \\ &= -\mathcal{J} \sum_i \sigma_i z \langle \sigma \rangle - B \sum_i \sigma_i \\ &= -(\mathcal{J}z \langle \sigma \rangle + B) \sum_i \sigma_i \end{aligned} \quad (15)$$

其中，由于每个粒子的自旋统计平均都是一样的，将 $\langle \sigma_j \rangle$ 替换为总自旋的平均 $\langle \sigma \rangle$ （实际上这里有一个疑问，第一行真的可以如此拆么？如果不可以，那么刘川和 Mussardo 的论述就是不相容的，具体表现为相差一个 $1/2$ 的系数）。可以看到，此时由自旋均值构成的项 $\mathcal{J}z \langle \sigma \rangle$ 与外磁场 B 具有相同的地位，有时我们把这一项称之为由自旋之间相互作用产生的分子磁场。此时，系统的配分函数为：

$$\begin{aligned}
Z_N &\cong \sum_{\{\sigma\}} e^{(\beta \mathcal{J} z \langle \sigma \rangle + B) \sum_i \sigma_i} \\
&= \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} e^{(\beta \mathcal{J} z \langle \sigma \rangle + B) \sum_i \sigma_i} \\
&= \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} \prod_i e^{(\beta \mathcal{J} z \langle \sigma \rangle + B) \sigma_i} \\
&= \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} \prod_i e^{(\beta \mathcal{J} z \langle \sigma \rangle + B) \sigma_i} \\
&= \prod_i \sum_{\{\sigma_i=\pm 1\}} e^{(\beta \mathcal{J} z \langle \sigma \rangle + B) \sigma_i} \\
&= \prod_i 2 \cosh (\beta \mathcal{J} z \langle \sigma \rangle + B) \\
&= [2 \cosh (\beta \mathcal{J} z \langle \sigma \rangle + B)]^N
\end{aligned} \tag{16}$$

由此可得单粒子的热力学势为：

$$F(T, B) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N = -\frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta \mathcal{J} \langle \sigma \rangle + B)] \tag{17}$$

尽管此时我们得到的 F 与先前得到的 F ：

$$F(T, B) = -\frac{1}{\beta N} \ln Z_N = \frac{1}{2} \mathcal{J} \langle \sigma \rangle^2 - \frac{1}{\beta} \ln [2 \cosh (\beta \mathcal{J} \langle \sigma \rangle + B)] \tag{18}$$

不同，但是注意到两者之间只相差了一个常数 $\frac{1}{2} \mathcal{J} \langle \sigma \rangle^2$ ，在求导得热力学量的时候它们是等价的。由此即证明了两种引入平均场近似方式的等价性。

2 Potts 模型的平均场近似

Potts 模型的哈密顿量为：

$$\mathcal{H} = -\frac{\mathcal{J}}{2} \sum_{\langle i, j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \tag{19}$$

利用第二种平均场近似的思想，我们认为和第 i 个粒子相互作用的粒子的自旋可以近似认为是其统计平均。但是，在处理 Potts 模型的时候，我们将进一步改善我们进行平均场论的策略。此时，我们认为第 i 个粒子与其他的 $N - 1$ 个粒子都进行耦合并取代数平均，这与直接用统计平均替换某个特定相互作用粒子的贡献是相近的（很遗憾，我并没有从书中找到一个统一的平均场近似的方法，只能以这种形式尽可能一致地阐述平均场近似的思想）。此时，Potts 模型系统的哈密顿量可做如下推导（这个推导仍然具有和之前一样的，对于求和的潜在风险，最终会造成结果差一个 $1/2$ 的系数）：

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= -\frac{\mathcal{J}}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \\
&\cong -\frac{\mathcal{J}}{2} \left[\sum_i \sum_{j \text{ near } i} \delta(\sigma_i, \sigma_j) + \sum_j \sum_{i \text{ near } j} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \right] \\
&= -\mathcal{J} \sum_i \sum_{j \text{ near } i} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \\
&\cong -\mathcal{J} \sum_i z \delta(\sigma_i, \frac{1}{N} \sum_j \sigma_j) \\
&\cong -\frac{\mathcal{J}z}{N} \sum_{i,j} \delta(\sigma_i, \sigma_j)
\end{aligned} \tag{20}$$

2.1 求解热力学势

不同于 Ising 模型，Potts 模型在 $q \leq 2$ 时会展现出二阶相变，而在 $q > 2$ 时则会展示出一阶相变。这与 Potts 模型在 $q = 2$ 时几乎（在相变而不是热力学势的意义上）等价于 Ising 模型有关。Potts 模型的平均场近似可以展示出 Potts 模型在此意义上不同于 Ising 模型的特点。

同样，Potts 模型的平均场近似的求解和 Ising 模型也大不相同。此时，我们可以直接利用热力学势在微观态上的展开来求解 Potts 模型的平均场近似，并展示在 $q > 2$ 时 Potts 模型会展示出一阶相变的特点。

设系统中有 N_i 个粒子处于自旋态 i 上， $i = 1, 2, 3 \dots q$ ，记 $x_i = N_i/N$ 为相应自旋态的占比，显然有归一化条件：

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1 \tag{21}$$

现在我们想利用 N_i 来表示系统的内能 U 。考虑 Potts 模型平均场近似的哈密顿量：

$$\mathcal{H} = -\frac{\mathcal{J}z}{N} \sum_{i,j} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \tag{22}$$

我们考察处于自旋态 i 的粒子：由于只有自旋态相同的粒子才有 $\delta(\sigma_i, \sigma_j) \neq 0$ ，对求和有贡献且贡献为 1。由于处于 i 态的粒子共有 N_i 个，总贡献的数目相当于从 N_i 个粒子中选 2 个粒子的选法的数目，即 $C_{N_i}^2 = \frac{N_i(N_i-1)}{2}$ 。对所有可能的自旋态 i 求和，就得到了系统在 N_i 个粒子处于自旋态 i 时的内能：

$$U = -\frac{1}{2N} \mathcal{J}z \sum_{i=1}^q N_i(N_i - 1) \tag{23}$$

为了考察 N 趋向于无穷时的 U ，我们计算单粒子的内能近似：

$$\begin{aligned}
\frac{U}{N} &= -\frac{1}{2N^2} \mathcal{J}z \sum_{i=1}^q N_i(N_i - 1) \\
&= -\frac{1}{2} \mathcal{J}z \sum_{i=1}^q \frac{N_i}{N} \frac{(N_i - 1)}{N} \\
&\cong -\frac{1}{2} \mathcal{J}z \sum_{i=1}^q \left(\frac{N_i}{N}\right)^2 \\
&= -\frac{1}{2} \mathcal{J}z \sum_{i=0}^q x_i^2
\end{aligned} \tag{24}$$

其中，利用了 N 很大这一假设。接下来，我们将利用类似的形式表示 S ：在统计物理中， S 可以定义为：

$$S = k \log \Omega \tag{25}$$

其中， Ω 是系统在 N_i 个粒子处于自旋态 i 时的总微观态数目，即为 $N!/(N_1!N_2!\dots N_q!)$ 。其中 $N!$ 表示所有可能的组合数，而除去 $N_i!$ 则表示 N_i 个自旋相同的粒子无论如何排列都具有相同的能量，是同一个微观态。因此：

$$S = k \log \frac{N!}{N_1!N_2!\dots N_q!} \tag{26}$$

利用大数的 Stirling 公式：

$$\begin{aligned}
S &= k \log \frac{N!}{N_1!N_2!\dots N_q!} \\
&= k \left[\log N! - \sum_i^q \log N_i! \right] \\
&\cong k \left[N \log N - \sum_i^q N_i \log N_i \right]
\end{aligned} \tag{27}$$

同样，为了考察 N 趋向于无穷时的 S ，我们计算单粒子熵的近似：

$$\begin{aligned}
\frac{S}{N} &\cong -k \frac{\sum_i^q N_i \log N_i}{N} + k \log N \\
&= -k \frac{\sum_i^q N_i \log \frac{N_i}{N} + N_i \log N}{N} + k \log N \\
&= -k \sum_i^q \frac{N_i}{N} \log \frac{N_i}{N} - k \frac{\log N}{N} \sum_i^q N_i + k \log N \\
&= -k \sum_i^q x_i \log x_i - k \log N + k \log N \\
&= -k \sum_i^q x_i \log x_i
\end{aligned} \tag{28}$$

据热力学势 F 的定义：

$$F = U - TS \tag{29}$$

我们可以得到单粒子的热力学势 f :

$$f(x_i) = \frac{U}{N} - T \frac{S}{N} = - \sum_{i=1}^q \left[\frac{\mathcal{J}z}{2} x_i^2 - T k x_i \log x_i \right] \quad (30)$$

2.2 相变

根据 Landau 相变理论, 分析 f 的极小值点即可获得关于系统相变的信息。但是, 此时 f 的自变量并不是自由的, x_i 之间具有约束:

$$\sum_{i=1}^q x_i = 1 \quad (31)$$

为了用自由变量表示 f 以便分析系统的相变信息, 我们可以引入变量代换:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{q} [1 - s + q], \\ x_i &= \frac{1}{q} (1 - s), \quad i = 2, 3, \dots, q \end{aligned} \quad (32)$$

其中 $0 \leq s \leq 1$ 。注意, 这个变量替换并不是一个等价的变量替换: 约束 $\sum_{i=1}^q x_i = 1$ 是 R^q 中的一个 $q-1$ 维平面, 这个变量替换实际上是为了方便抽出这个平面中的一条直线来进行分析。我们将看到, 在这个直线上, Potts 模型 $q \leq 2$ 时会展现出二阶相变, 而 $q > 2$ 时则会展示出一阶相变。将变量代换带入 f 可得:

$$\beta f(s) = \frac{q-1}{2q} \beta \mathcal{J} z s^2 - \frac{1+(q-1)s}{q} \log [1+(q-1)s] - \frac{q-1}{q} (1-s) \log (1-s) + C \quad (33)$$

其中, 与 s 无关的常数打包入 C 。对 s 展开 \log 函数得:

$$\beta f(s) = -\frac{q-1}{2q} (q - \beta \mathcal{J} z) s^2 + \frac{1}{6} (q-1)(q-2) s^3 + \dots \quad (34)$$

由此, 可以看出, 在 $q < 2$ 时和 $q > 2$ 时, s^3 项会变号, 这将反映出两种不同情况时相变的不同。

3 Bethe–Peierls 近似

这个太复杂, 略

4 高斯近似

Ising 模型中, 对于 σ 的求和可以利用 δ 函数变为积分:

$$\sum_{\sigma_i = \pm 1} [\dots] = \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_i \delta(\sigma_i^2 - 1) [\dots] \quad (35)$$

我们可以认为, δ 函数表示了 σ 的一种分布:

$$\sum_{\sigma_i=\pm 1} [\dots] = \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_i P_I(\sigma_i) [\dots] \quad (36)$$

对 Ising 模型来说，其分布可以做以下形式的归一化：

$$P_I(\sigma_i) = \frac{1}{2} [\delta(\sigma_i - 1) + \delta(\sigma_i + 1)] \quad (37)$$

这时，系统的配分函数：

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta\mathcal{H}} \quad (38)$$

就可以改写为：

$$Z_N = \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N P_I(\sigma_i) e^{-\beta\mathcal{H}} d\sigma_1 \dots d\sigma_N \quad (39)$$

注意到 σ 的分布具有特征：

$$\langle \sigma_i \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_i P_I(\sigma_i) \sigma_i = 0 \quad (40)$$

$$\langle \sigma_i^2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} d\sigma_i P_I(\sigma_i) \sigma_i^2 = 1 \quad (41)$$

这和高斯分布具有相同的期望和方差：

$$P_G(\sigma) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \exp\left[-\frac{\sigma^2}{2}\right] \quad (42)$$

高斯近似就是通过高斯分布来替换 δ 分布，计算系统的配分函数：

$$Z_N \cong \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \prod_{i=1}^N P_G(\sigma_i) e^{-\beta\mathcal{H}} d\sigma_1 \dots d\sigma_N \quad (43)$$

高斯分布的一个好处就是，自带一个 e 指数，可以方便的与哈密顿量相统一：

$$\begin{aligned} Z_N &\cong \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-\frac{\sigma^2}{2}} e^{-\beta\mathcal{H}} d\sigma_1 \dots d\sigma_N \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-\frac{\sigma^2}{2} - \beta\mathcal{H}} d\sigma_1 \dots d\sigma_N \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \dots \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-\beta\mathcal{H}'} d\sigma_1 \dots d\sigma_N \end{aligned} \quad (44)$$

其中，定义了 \mathcal{H}' 为新的哈密顿量，替换原来的 \mathcal{H} ：

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2\beta} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 - f \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (45)$$

这时只需要计算新哈密顿量对应的配分函数就好了：

$$Z_N = \int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 + J \sum_{\langle kl \rangle} \sigma_k \sigma_l + B \sum_l \sigma_l \right] d\sigma_1 \cdots d\sigma_N \quad (46)$$

为了计算这个积分，我们引入记号：

$$\sigma^T \mathbf{V} \sigma = \frac{1}{2} \sum_l \sigma_l^2 - \mathcal{J} \sum_{\langle kl \rangle} \sigma_k \sigma_l \quad (47)$$

其中 \mathbf{V} 是一个矩阵，而 σ 则是一个 N 阶向量。为了计算配分函数，我们将利用如下恒等式：

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cdots \int_{-\infty}^{+\infty} \exp [-x^T \mathbf{V} x + h^T x] dx_1 \cdots dx_N = (\pi)^{N/2} [\det \mathbf{V}]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{1}{4} h^T \mathbf{V}^{-1} h \right] \quad (48)$$

其证明可以从坐标变换与矩阵本征值的角度简单的看出，本文不赘述。需要注意的是，这个恒等式成立的充要条件为，矩阵 \mathbf{V} 可对角化，即 \mathbf{V} 本征值实部非负。因此，此时的配分函数被完全计算出来了：

$$Z_n = \pi^{\frac{N}{2}} [\det \mathbf{V}]^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{1}{4} B^T \mathbf{V}^{-1} B \right] \quad (49)$$