級數展開法在統計模型上的應用

林克瀛
清華大學物理系
email: lin@phys.nthu.edu.tw

摘　要

臨界現象的各種統計模型大部分都沒有精確解。級數展開法是一種最常用的求臨界點及臨界指數之近似值的方法。

一八九五年的居禮發現當溫度增加時，鐵磁性物質（例如磁鐵）的自發磁化強度下降，在某一臨界溫度時完全消失，若溫度大於臨界溫度則轉變成順磁性物質。一九二零德國人冷次提出一個簡單的模型來解釋這種現象，後來他把這個模型交給他的學生易辛做為博士論文題目。易辛只能解決一維的情形，發現臨界溫度是絕對零度，並推測在二維及三維時也是如此，所以這個模型不能用來描述鐵磁性物質。他在一九二五年發表了他的博士論文。易辛在一生中只發表過這一篇論文，他畢業後去大學教書，希特勒上台後，易辛因為是猶太人被迫辭職。二次大戰期間他躲在盧森堡的小城中，戰後移民美國，才知道易辛模型已經引起很大的注意。

一九三六年英國人派瑞耳證明二維易辛模型在溫度很低但大於零時，一定有自發磁化，因此易辛的猜想是錯的。一九四二年美國耶魯大學教授翁沙格在一次會議上，宣佈找到在二維方形晶格上易辛模型在沒有外在磁場時配分函數的準確解，詳細的證明在兩年後發表。一九四八年他又在一次會議上宣佈找到易辛模型在方形晶格上的自發磁化強度。他的結果非常簡單，但他一輩子都沒發表他的證明。一九五二年楊振寧才把證明發表，他在三十年後回憶說這是他一生中所作最長的計算，好幾次幾乎要放棄，先後工作了六個月，發現許多項正好互相抵銷，最後得到一個非常簡單的結果。三維易辛模型的準確解到今天仍然沒有人知道。

按照易辛模型，晶格上每一格點 i 有一個磁矩 S_i，它有向上 (S_i=1) 及向下(S_i=-1) 兩種狀態。N 個格點上每個磁矩可獨立取兩種狀態，所以一共有 2^N 種狀態。假定只有最靠近的兩個磁矩才有相互作用。為了解釋鐵磁性，再假設相鄰兩個磁矩同方向時能量較低，等於 $-J$，反方向時能量較高為$+J$，正數 J 代表相互作用的強度。晶格的一個微觀狀態 **S**，就是每個格點上 S_i 取 1 或 -1

$$\mathbf{S} = \{S_1, S_2, \ldots, S_N\},$$

此一微觀狀態的能量為

$$E(\mathbf{S}) = -J\,\Sigma_{(ij)}\,S_i\,S_j$$

式中 $(i\,j)$ 表示對一切最鄰近的磁矩求和。把 2^N 種微觀狀態的貢獻加起來，就得到配分函數

$$Z = \Sigma\ \exp[-E(\mathbf{S})/kT],$$

式中 k 是波茲曼常數，T 是絕對溫度。

自從易辛模型以來，物理學家提出各式各樣的統計模型，幾乎每一個模型都是一個新的數學難題，到今天仍沒有一個有現實意義的三維統計模型是嚴格可解的。在理論物理學中，碰到難題時，常用的方法是找一個小參數，對它求級數展開式中的

若干項來研究。小參數要從物理上來選擇。以易辛模型的自發磁化強度為例，可選擇

$x = \exp(-2J/kT)$

因為當 $T \to 0$ 時，$x \to 0$。

把級數展開法應用到統計模型，有兩種困難。第一種是技術性的。不同的模型有不同的計算規則。例如在計算易辛模型自發磁化強度的展開式時，就要計算出在晶格上能畫出多少個不同的圖形，每個圖形都有相同的點數及邊數。因人工計算極易出錯，因此必須設計很複雜的電腦程式來計算。一般說來，統計模型的級數展開式通常計算到三十項左右。

第二種困難是原則性的。理論上級數展開式中每一項的係數都可以精確的計算出來，但實際上只能算出無窮級數中最前面的若干項。每個無窮級數都有一個收斂半徑，這個半徑由函數的奇異點決定，例如

$(1 - x)^{-1} = 1 + x + x^2 + \ldots + x^n + \ldots$

的奇異點只有一個，就是 $x=1$，無窮級數的收斂半徑也是 1。易辛模型的臨界點是一個奇異點。然而往往一個代表物理量的函數，會有一個非物理奇異點，它比物理點更靠近原點，例如函數

$f(x) = (1 + x^2)^{-1}(2 - x)^{-1}$

的物理奇異點是 $x=2$，非物理奇異點是虛數 $x = i$ 及 $-i$，函數的級數展開式的收斂半徑是 1。要如何利用短短的級數，來得到在收斂圓之外的臨界點及在臨界點附近函數的性質呢？

一九六二年美國人貝克注意到法國數學家佩德早在十九世紀就已經解決了這個難題，方法是把有限級數化為二個有限多項式的比。這種方法，現在已經變成為研究無法求得精確解的統計模型的標準工具了。市面上廣泛地使用的軟體 Mathematica，就提供一些指令，把現有級數表達為兩多項式之比，並把分母多項式的根全部算出，其中有一個正實根很接近臨界點。下面以方形晶格易辛模型的自發磁化強度 $M(x)$ 為例，來說明這種方法。

楊振寧曾證明（$x = \exp(-4J/kT)$）

$M(x) = [\,(1 + x)^2(1 - 6x + x^2)/(1 - x)^4\,]^{1/8}$

其級數展開式為

$M(x) = 1 - 2x^2 - 8x^3 - 34x^4 - 152x^5 - 71x^6 - 3472x^7 - 17318x^8 - 88048x^9 \ldots$

假設我們只知道級數展開式的前面幾項，但知道在臨界點 x_c 附近

$M(x) \quad A(1 - x/x_c)^\beta$

A 為常數，β 為臨界指數。先取對數再微分可得

$$F = \frac{d}{dx}\ln M(x) \sim \frac{\beta}{x - x_c}$$

用指令 Series[D[Log[M],x]], {x, 0, 9}]，可得

$F = -4x - 24x^2 - 144x^3 - 840x^4 - 4900x^5 - 28560x^6 - 166464x^7 - 970224x^8 - 5654884x^9 \ldots\ldots$

一個無窮級數的佩德近似 $[M, N]$ 之定義為

$$[M, N] = \frac{a_0 + a_1 x + \ldots + a_M x^M}{1 + b_1 x + \ldots + b_N x^N}$$

式中共有 $1 + M + N$ 個係數，由級數中最前面的 $1 + M + N$ 所唯一決定。用相關的指令可以立即得到

$[3, 4] = [4, 4] = [4, 5] = [5, 5] = -4x/(1 - x^2)(1 - 6x + x^2)$

令人感到意外的是由無窮級數的前幾項居然可以得到完全正確的結果！不過這只是一個特例，在三維易辛模型就不行了。一般的情形是選擇 $M = N$ 或 $N \pm 1$，再用指令把分母多項式的正實根全部找出來，如果其中沒有一個根是合理的，就換一組 (M, N) 重算。當級數中已知的項數越來越多時，臨界點的估計值逐漸接近準確值。

參考文獻

郝柏林　相變與臨界現象　凡異出版社

林克瀛　臨界現象與平面易辛模型　物理會刊十二卷三期(1990)