

三维 Ising 模型的封闭近似解 (IV)

配分函数的近似内插公式

石 赫 郝柏林

(中国科学院)

1980年11月26日收到

提 要

根据对二维严格解和三维 Q 近似的分析, 为三维 Ising 模型的配分函数提出一类近似的内插公式。只要付出足够的计算量, 它原则上可以尽量多地反映目前已有的关于奇异点位置和高低温展开系数的知识, 由一个封闭的解析表达式同时给出较好的高温和低温行为, 但不能更好地反映比热奇异性。

一、引 言

不久前引用四元数为三维 Ising 模型的配分函数求得了一个封闭近似表达式(即 Q 近似, 见文献 [1, 2])。解析地改进 Q 近似的一切尝试迄今未获成果。由于 Q 近似终究包含了若干合理的物理内容, 我们应当尽量利用研究 Q 近似所取得的经验, 探求三维 Ising 模型严格解所可能具备的性质。在文献 [3] 中我们开始这样做。本文继续实现从数值上改进 Q 近似的要求。

对于三维 Ising 模型的任何封闭近似解, 应当提出以下基本要求(本文只讨论简单立方格子):

1. 在各向异性情形下应能回到二维的 Onsager 严格解。 Q 近似和文献 [3] 中建议的更一般的形式, 均能满足这一要求。

2. 在整个从零到无穷的温度区间上, 只有一个奇异点。级数展开解的最好估计, 用约化温度 $u = \text{th} J/kT$ 表示, 它是 $u_c = 0.21813^{[4]}$, 或 $0.21811^{[5]}$; Q 近似给出 $u_c = 1/(2\sqrt{2} + 1) = 0.26120$ 。

3. 它的高温展开

$$S(u) = \sum_n h_{2n} u^{2n},$$

系数应尽量接近已知的精确结果(目前只展到了 u^{18} 项^[4]):

$$\begin{aligned} S(u) = & 3u^4 + 22u^6 + 187.5u^8 + 1980u^{10} + 24044u^{12} + 319170u^{14} \\ & + 4514757.75u^{16} + 67003469 \frac{1}{3} u^{18} + \dots, \end{aligned} \quad (1)$$

至少应有 $h_{2n} \geq 0$. (由简单立方情形下比热展开系数大于零, 还可以求得 $(n+1)h_{2n+2} \geq nh_{2n}$). Q 近似部分地符合此要求.

4. 其低温展开

$$\ln \Lambda(x) = \sum_n l_{2n} x^{2n}$$

的系数也应尽量接近已知的精确结果(目前已展到 x^{40} 项^[6]):

$$\ln \Lambda(x) = x^6 + 3x^{10} - 3.5x^{12} + 15x^{14} - 33x^{16} + \dots, \quad (2)$$

符号 $\Lambda(x)$, $S(u)$ 等等与配分函数的关系见文献 [3] 和后面第二节. Q 近似的低温展开不满足这条要求, 文献 [2, 3] 中的分析在相当大程度上着眼于改进低温行为.

本文在文献 [3] 的分析基础上, 采用那里提出的用高阶超复数逼近配分函数时它应具有的一般形式, 选择其中待定参数, 使之尽量满足上述四项要求. 这样得到的封闭表达式, 可以看作高低温两端之间的近似内插公式. 由于整个工作涉及大量的数学推导和程序设计, 不可能在一篇短文中赘述. 我们将着重讲清楚所做的猜测和假定, 以备识者改进.

二、配分函数的近似内插公式

根据文献 [3] 中的分析, 我们把归算到每个格点的配分函数写成

$$\ln \lambda = \ln 2 - \frac{3}{2} \ln(1 - u^2) + S(u), \quad (3)$$

其中

$$S(u) = \frac{q}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln D(u, \theta) d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3, \quad (4)$$

$$D(u, \theta) = 1 + \sum_{i=1}^k A_i(\theta) u^i, \quad (5)$$

$$A_i(\theta) = \sum_{i_1+i_2+i_3=i \bmod(2)} x_{ij} \Sigma_1^{i_1} \Sigma_2^{i_2} \Sigma_3^{i_3}, \quad (6)$$

$$\Sigma_1 = 2(\cos \theta_1 + \cos \theta_2 + \cos \theta_3)$$

$$\Sigma_2 = 4(\cos \theta_1 \cos \theta_2 + \cos \theta_2 \cos \theta_3 + \cos \theta_3 \cos \theta_1)$$

$$\Sigma_3 = 8 \cos \theta_1 \cos \theta_2 \cos \theta_3.$$

这些记号已在文献 [1—3] 中说明. 下面要多次引用文献 [3] 中的公式, 办法是在公式符号前冠以 III, 如 (III.19) 式等.

我们当前目标是选择 (6) 式中的待定系数 x_{ij} , 使 (3) 式尽可能满足引言中提出的要求. 在文献 [3] 中已经排除了 $k = 6n$ 中 n 为奇数的情形. 对 $n = 2$ 时的分析表明, 它不能同时满足高低温两端的要求, 而不导致矛盾的代数条件. 这里不再重复这一分析, 因为它与下面 $n = 4$, 即 $k = 24$ 的讨论相像.

按文献 [3] 中建议的办法, 分析 $k = 24$ 时可能出现的余弦幂的组合, 并与二维严格解对比, 可以确定出一批 x_{ij} , 连同未知系数一起列在表 1 和表 2 中. 基于 (III.19) 式, 表中只给出了一半 A_i . 有 * 号的数值是通过与 Q 近似四次方的六阶以内项对比定出来的.

表1 奇 A_i

	Σ_1	Σ_3	Σ_1^3	$\Sigma_1^2 \Sigma_2$	$\Sigma_1^2 \Sigma_3$	$\Sigma_2 \Sigma_3$	$\Sigma_1^3 \Sigma_2$	$\Sigma_1^3 \Sigma_3$	$\Sigma_1^3 \Sigma_2 \Sigma_3$
A_1	-4								
A_3	-28	$4(2-\sqrt{2})^*$	-4	0					
A_5	$16\sqrt{2}-92^*$	x_{53}	12	$-24(\sqrt{2}-1)^*$	$12(2-\sqrt{2})^*$	x_{511}	0	0	0
A_7	x_{71}	x_{-3}	x_{75}	x_{77}	x_{79}	x_{711}	x_{713}	x_{715}	
A_9	x_{91}	x_{93}	x_{95}	x_{97}	x_{99}	x_{911}	x_{913}	x_{915}	
A_{11}	x_{101}	x_{103}	x_{105}	x_{107}	x_{109}	x_{111}	x_{113}	x_{115}	

表2 偶 A_i

	1	Σ_1^2	Σ_2	$\Sigma_1 \Sigma_3$	Σ_1^4	$\Sigma_1^3 \Sigma_2$	Σ_2^2	Σ_2^3	$\Sigma_1^3 \Sigma_3$	$\Sigma_1 \Sigma_2 \Sigma_3$
A_0	1									
A_2	12	6	0							
A_4	66	12	$8(\sqrt{2}-1)^*$	$-12(2-\sqrt{2})^*$	1	0	0			
A_6	$444-160\sqrt{2}^*$	$30-48\sqrt{2}^*$	x_{64}	x_{66}	-8	$24(\sqrt{2}-1)^*$	x_{612}	$36-24\sqrt{2}^*$	$-4(2-\sqrt{2})^*$	x_{618}
A_8	x_{80}	x_{82}	x_{84}	x_{86}	x_{88}	x_{810}	x_{812}	x_{814}	x_{816}	x_{818}
A_{10}	x_{100}	x_{102}	x_{104}	x_{106}	x_{108}	x_{110}	x_{112}	x_{114}	x_{116}	x_{118}

文献 [3] 中 B_0 为常数这一猜测的后果, 是偶 A_i 表中第一列应满足

$$\sum_{j=0}^{12} x_{2j0} = B_0 = 65536, \quad (7)$$

而其余各列之和应为零. 这导致 x_{ij} 间一批线性条件, 同时也是表 2 中不必写出 A_{12} 的原因.

关于 B_i 中哪些 y_{ij} (见 (III.13) 式) 不为零, 没有比较普遍的论据. 在二维情形下, 对于同一个 i , B_i 中不出现 A_i 中没有的余弦组合. 对于三维情形提出类似的要求, 至少在 $k = 24$ 时, 还未发现矛盾. 这是加在 x_{ij} 上的又一批线性条件, 它们从 A_i 中排除了若干较高阶的余弦组合. 表 1 和表 2 中已部分地计入了这一要求.

表 1 和表 2 中已经有确定数值的 x_{ij} , 使得奇异点位置很靠近 0.2. 事实上, 如果表中带 * 号的参数也被采用, 并且要求 $D(u, \theta = 0)$ 蜕化为另一多项式的完全平方, 而且为排除反铁磁奇异点取 $b_{12} = -1$, 这时自动有 $b_6 = 0$, 同时 (7) 式导致 $b_3 + b_5 = -116$ (参见 (III.27) 式及其后的分析), 则奇异点已经唯一地确定为

$$u_c = 0.173811, \quad (8)$$

它低于级数展开估得的 $u_c = 0.2181$. 可见, $k = 24$ 的内插公式活动余地不大, 它比 Q 近似的长处, 是有把握保证较好的低温行为. 因此, $k = 24$ 仍不失为第一个值得认真分析的情形.

由 (4) 式出发, 对 u 作高温展开. 这时要遇到大量余弦幂的积分 (见附录二). 所得高温展开系数是 x_{ij} 的多项式, 要求它们分别等于 (1) 式中的精确值, 就得出—批包含 x_{ij} 的代数方程. 对于表 1 和表 2 中的 x_{ij} , $h_2 = 0$ 和 $h_4 = 3$ 已经自动成立, $h_6 = 22$ 给出线性方程

$$8x_{511} + x_{612} + 2x_{618} = 0. \quad (9)$$

下一个高温系数为

$$\begin{aligned} h_8 = & 13529.625 + 6840x_{33} + 1860x_{44} + 4980x_{46} + 174x_{51} \\ & + 120x_{53} + 1236x_{57} + 3192x_{59} + 1056x_{511} + 6x_{60} + 103.5x_{62} \\ & + 30x_{64} + 60x_{66} + 684x_{610} + 222x_{612} + 78x_{614} + 1728x_{616} \\ & + 594x_{618} + 3x_{71} + 45x_{75} + 12x_{77} + 24x_{79} + 12x_{711} + 288x_{713} \\ & + 96x_{715} + 0.125x_{80} + 0.75x_{82} + 11.25x_{88} + 3x_{810} + 1.5x_{812} \\ & + x_{814} + 6x_{815} + 3x_{818} - 150x_{33}^2 - 0.75x_{44}^2 - 4.5x_{46}^2 \\ & - 24x_{33}x_{44} - 72x_{33}x_{46} - x_{33}x_{53} - 3x_{33}x_{57} - 9x_{33}x_{59} - 3x_{44}x_{46}. \end{aligned}$$

h_{10} 的式子更长, 这里从略.

对低温变量 x 作展开时, 在 B_0 与角度 θ_i 无关的前提下, 只出现与高温展开相同的余弦幂的积分. 低温系数 $l_2 = 0$ 导致

$$B_0(y_{20} + 6y_{22}) - 3y_{11}^2 = 0, \quad (10)$$

其中 y_{ij} 由 (III.13) 式定义, 它们与 x_{ij} 的关系都是线性的:

$$\begin{aligned} y_{11} &= 4(-296 + 7x_{51} + 5x_{71} + 3x_{91} + x_{101}), \\ y_{20} &= 16(-47760 + 9x_{60} + 4x_{80} + x_{100}), \\ y_{22} &= 16(342 + 9x_{62} + 4x_{82} + x_{102}). \end{aligned}$$

一般情形下,

$$y_{ij} = \sum_{l=0}^k T_{il} x_{lj}. \quad (11)$$

我们在附录一中给出 T_{il} 的表. 这里省略 h_4, h_6 等等更为冗长的表达式.

上面提出的全部条件, 都表现为代数关系. 因此, 为了确定 x_{ij} , 只须求解高次代数方程组.

三、数值结果

写出全部代数条件的工作量, 超出了手工推导的可能性. 我们只为 $k = 24$ 情形推导了 $h_2 \sim h_{10}, l_2 \sim l_{10}$ 的表达式. 为了改进 u_c 的数值, 应当研究 $k = 36, 48$ 等情形, 这只有在将来借助符号运算程序实现. 为了看一下这类内插公式可能给出的数值效果, 我们利用一批已经推得的方程, 特别是其中的线性关系, 来减少未确定的 x_{ij} 的数目. $k = 24$ 时可以作到只剩下 $x_{73}, x_{75}, x_{82}, x_{88}, x_{93}, x_{95}$ 六个系数(尚未利用 h_8 和 h_{10} 条件). 剩下的任意性当然还很大. 然后经过一个类似非线性规划的过程, 为这六个系数选值, 使未作为条件引用的高温系数保持正值, 同时这些高低温系数的数值不要在量级上差得太远. 表 3 是 $x_{73} = 9, x_{75} = -6, x_{82} = 0, x_{88} = 34, x_{93} = 3, x_{95} = 0$ 时高低温系数的数值.

表 3 高低温展开系数的计算值

n	h_{2n}	l_{2n}
1	0	0
2	3	0
3	22	1
4	187.5	0.42929...
5	1980	-136.997...
6	6293.28...	2169.794...
7	785661.25	10437.380...
8	40590848	-266523.745...
9	1081163776	-1410465.015...
10	13555990528	34873648.720...

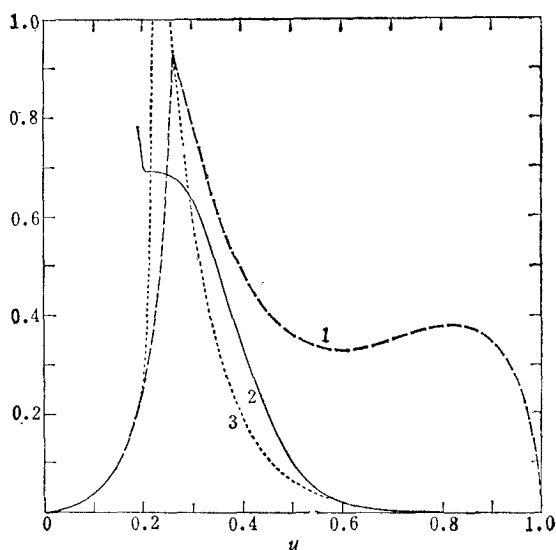


图 1 比热曲线

曲线 1 为 Q 近似 曲线 2 为本文结果;
曲线 3 为 Wakefield 结果

原则上还可以求得比表 3 更好的数值. 然而只有在采用更大的 k 值, 同时改进 u_c 时, 才值得付出相应的计算量. 如何计算有边界奇异性的比热积分, 在附录三中简述. 比热曲线示于图 1 中, 图中点线是三十年来人们一直引用的 Wakefield^[7] 从级数展开估算的曲线, 而虚线是 Q 近似^[1] 的结果. 从图中可见, 低温行为确实得到改进. 然而 $k = 24$ 时, 临界点已由 (8) 式确定, 比热奇异性也不可能在有限的 k 下很好地逼近, 这在前面和文献

[3] 中已经讨论过. 图中实线在 u_c 附近的一段空缺, 是因为用现有的计算机已不能在可以容忍的时间内保证精度. 我们的计算对于从高温展开系数用 Pade 变换估出的比热临界指数 $\alpha^{[4,8]}$ 是否可靠提出问题. 因为按照本文的办法, 原则上可以构造出一个配分函数的内插公式, 它的前若干个展开系数与 Pade 变换所用者完全相同, 但仍然导致 $\alpha = -1$ 的结果.

作者感谢卢琪同志在数值积分方面的部分协助和中国科学院数学研究所计算站 FELIX-512C 机组的支持.

附录一、 T_{il} 表

对于每个给定的 K 值, 可利用 (III. 14) 式计算出 T_{il} . 由于 A_i 和 B_i 的对称性质 (III. 19 和 20) 式, 真正用到的只是 T_{il} 中的一部份, 即两个下标奇偶一致者. 例如 $k = 24$ 时, 由 $A_0, A_2, \dots, A_{11}$ 变到 $B_0, B_2, \dots, B_{12}$ 用到的 T_{il} 见附表 1.

附表 1

2	2	2	2	2	2	1
552	376	232	120	40	-8	-12
21252	8932	2692	228	-252	-28	66
269192	58520	2888	-2152	392	280	-220
1470942	106590	-17442	2142	478	-930	495
3922512	-56848	-5168	4080	-2480	1776	-792
5408312	-235144	33592	-8840	3640	-2184	924

表中除最后一列外, T_{il} 值均因 (III. 19b) 式而乘过 2.

由 $A_1, A_3, \dots, A_{11}$ 变到 $B_1, B_3, \dots, B_{11}$ 用到的 T_{il} 见附表 2

附表 2

44	36	28	20	12	4
3036	1524	588	100	-68	-44
49588	12348	644	-756	84	220
288420	17100	-6156	1052	324	-660
653752	-43928	2584	1224	-1416	1320
416024	-54264	12920	-4760	2520	-1848

表中各值均因 (III. 19a) 式而加过倍.

附录二、余弦组合的积分表

计算高温展开系数时, 要遇到大量如下形式的积分

$$I(N, M, L) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \Sigma_1^N \Sigma_2^M \Sigma_3^L d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3.$$

这个积分的计算已在别处^[9]讨论过. 附表 3 给出本文推导中用到的一部分积分值. 为了节约版面, 按 N 的奇偶分放在两个三角形中. $N \neq L \bmod(2)$ 的积分都是零, 附表 3 中没有给出.

当 B_0 是与角度无关的常数时, 计算低温展开系数同样用到这批积分. 如果 B_0 与角度有关, 则积分

$$\iiint \Sigma_i^N \Sigma_j^M \Sigma_k^L B_0^{-1} d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3,$$

依赖于系数 y_{0j} , 不能给出通用的积分表.

附表 3 余弦幂的积分

M, L	0, 0	1, 0	2, 0	0, 2	3, 0	1, 2	4, 0	2, 2	5, 0	0, 4
N										
0	1	0	12	8	48	0	540	216	4320	216
2	6	24	192	72	1512	432	13608	4680	126240	
4	90	576	4704	1536	41184	13536	383184			
6	1860	14400	125640	41880	1160880			11125296	1149120	9
8	44730	383040	3521784			1325520	3681888	380520	40320	7
10	1172556	10689840		443160	1219680	43200	125520	13440	1440	5
12	32496156		403200	15120	41688	1296	4368	504	48	3
		4320	13536	648	1512	0	144	24	0	1
		2, 3	4, 1	1, 3	3, 1	0, 3	2, 1	1, 1	0, 1	N
										M, L

附录三、比热积分

与 Q 近似^[13]不同, 计算比热时不能先完成一次积分而只处理二重数值积分. 把积分区间换到单位立方体上,

$$I \equiv \iiint_0^1 f(x, y, z) dx dy dz.$$

为了计算这类在立方体八个顶点都可能奇异性(当 $u \rightarrow u_c$ 时)的积分, 我们把简单的矩形公式推广到三维, 构造一个布点渐密的求和序列. 序列的第一个元素为

$$S_1 = f\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right),$$

第二个元素为

$$S_2 = \frac{1}{8} \left\{ f\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right) + f\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right) + 3f\left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right) + 3f\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4}\right) \right\}.$$

这里已经利用了被积函数的立方对称性. 一般元素为 ($k = 2^{N-1}$)

$$\begin{aligned}
 S_N = \frac{1}{k^3} & \left\{ \sum_{i=1}^k f\left(\frac{2i-1}{2^N}, \frac{2i-1}{2^N}, \frac{2i-1}{2^N}\right) \right. \\
 & + 3 \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k \left[f\left(\frac{2i-1}{2^N}, \frac{2i-1}{2^N}, \frac{2j-1}{2^N}\right) \right. \\
 & \left. + f\left(\frac{2j-1}{2^N}, \frac{2j-1}{2^N}, \frac{2i-1}{2^N}\right) \right] \\
 & \left. + 6 \sum_{i=1}^{k-2} \sum_{j=i+1}^{k-1} \sum_{l=j+1}^k f\left(\frac{2i-1}{2^N}, \frac{2j-1}{2^N}, \frac{2l-1}{2^N}\right) \right\}.
 \end{aligned}$$

这一序列的好处是从内向外逐渐逼近边界, 但永不使用函数在边界上的值, 同时在点数加密的过程中不重复计算函数值. 如果没有边界奇异性, 可以对序列

$$S_1, S_2, \dots, S_N$$

进行线性插值, 得到推广到高维的 Romberg 积分公式. 有边界奇异性时, 余项 $I-S_N$ 对积分步长的依赖性是非解析的. 我们按照文献 [10] 中建议, 采用了非线性的 ε 插值法^[11], 来计算这类多重积分.

参 考 文 献

- [1] 石赫、许以超、郝柏林, 物理学报, **27**(1978), 47.
- [2] 石赫、郝柏林, 物理学报, **29**(1980), 1564.
- [3] 石赫、郝柏林, 本刊本期.
- [4] M. F. Sykes *et al.*, *J. Phys. A*, **5**(1972), 667.
- [5] J. Zinn-Justin, *J. de Physique*, **40**(1979), 969.
- [6] M. F. Sykes *et al.*, *J. Phys. A*, **6**(1973), 1507.
- [7] A. J. Wakefield, *Proc. Cambr. Phil. Soc.*, **47** (1951), 799.
- [8] R. A. Ferrell, P. H. E. Meijer, *Phys. Rev.*, **180**(1969), 57.
- [9] 郝柏林, “FORTRAN 程序设计”, 人民邮电出版社, 1980 年, 第 121 页.
- [10] A. Genz, *Computer Phys. Comm.*, **4**(1972), 11.
- [11] P. Wynn, *SIAM J. Numer. Analysis*, **3**(1966), 91.

CLOSED-FORM APPROXIMATION FOR THE 3-DIMENSIONAL ISING MODEL (IV)

THE APPROXIMATE INTERPOLATION FORMULA FOR THE PARTITION FUNCTION

SHI HE

(*Institute of System Science, Academia Sinica*)

HAO BAI-LIN

(*Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

A class of approximate interpolation formula for the partition function of the 3-dimensional Ising model is proposed on the basis of a previous analysis of the 2-dim rigorous solution and 3-dim Q-approximation. In principle, the present knowledge about the location of the singular point and the low- and high-temperature expansion coefficients can be incorporated provided a sufficient amount of computation is carried out. One and the same analytical expression leads to good low- and high-temperature behaviour except for the specific heat singularity.