

3. Curie–Weiss-malli

3.1. Keskimääräisen kentän teoria

Ising mallin avaruudellinen rakenne tekee siitä matemaattisesti haastavan: dimensiossa $d = 1$ Ising malli toki ratkeaa helposti, dimensiossa $d = 2$ Ising mallin ratkaisu vaatii syvällistä matematiikkaa (palaamme tähän luvussa IV), ja dimensiossa $d = 3$ mallista ei enää osatakaan matemaattisesti todistaa juuri muuta kuin faasitransition olemassaolo. Tällä luennolla käsittelemme helpotettua mallia, josta kaikki avaruudellinen rakenne on poistettu — tästä käytetään termiä *keskimääräisen kentän teoria*. Mallilla on toivottu kvalitatiivinen faasitransitio paramagneettisen ja ferromagneettisen käyttäytymisen välillä, ja sen kriittinen käyttäytyminen vastaa Ising mallin käyttäytymistä korkeissa dimensioissa, vaikkakaan dimensioista $d = 1, 2, 3$ se ei anna aivan oikeita kvantitatiivisia tuloksia.

3.2. Curie–Weiss mallin määritelmä ja keskeisiä ominaisuuksia

Mallissamme on N *alkeismagneettia* (*spiniä*), joiden kunkin mahdolliset ovat $+1$ ja -1 . Todennäköisyysavaruus on siis periaatteessa $\Omega_N = \{-1, +1\}^N$ ja systeemin tila $\underline{\sigma} = (\sigma_i)_{i=1}^N \in \Omega_N$. *Curie–Weiss-mallissa* tilan energiaksi määritellään

$$H_N(\underline{\sigma}) = -\frac{J}{N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i,$$

ja parametrejä $J > 0$ ja $B \in \mathbb{R}$ kutsutaan *kytkentävoimakkuudeksi* ja *ulkoiseksi magneettikentäksi*, vastaavasti. Boltzmannin jakauma parametrilla β on nyt todennäköisyysmitta $\mu_\beta^{(N)}$ joukolla Ω_N , jossa yksidioiden todennäköisyydet ovat

$$\mu_\beta^{(N)}[\{\underline{\sigma}\}] = \frac{1}{Z_N(\beta)} e^{-\beta H_N(\underline{\sigma})}$$

ja partitiofunktio $Z_N(\beta)$ normalisoi kokonaistodennäköisyyden ykköseksi,

$$Z_N(\beta) = \sum_{\underline{\sigma} \in \Omega_N} e^{-\beta H_N(\underline{\sigma})}.$$

Voimme sopivalla yksiköiden valinnalla olettaa $J = 1$.

Kun emme välitä alkeismagneeteista yksilöinä, riittää systeemin tilan kuvaamiseen yksi satunnaismuuttuja, *empiirinen magnetisaatio*

$$M_N = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i.$$

Tämä on siis alkeismagneettien satunnaisten arvojen otoskeskiarvo, mutta toisin kuin otoskeskiarvojen tarkasteluissa Osan I Luvussa 4, summan termit eivät nyt ole riippumattomia — ja juuri siitä ferromagneettisessa vuorovaikutuksessa onkin kyse!

Curie–Weiss mallista tulemme todistamaan seuraavat termodynaamista rajaa ($N \rightarrow \infty$) koskevat tulokset. Kaksi ensimmäistä tulosta hieman eri tavoin ilmaisevat sen, että mallilla on (ilman ulkoista magneettikenttää eli kun $B = 0$) faasitransitio parametern β kriittisessä pisteessä

$$\beta_c = \frac{1}{2},$$

ja mallin käyttäytyminen on

$$\begin{array}{ll} \text{paramagneettinen} & \text{kun } \beta < \beta_c \text{ (ja } B = 0) \\ \text{ferromagneettinen} & \text{kun } \beta > \beta_c \text{ (ja } B = 0) \end{array} .$$

Tarkemmin, ensimmäinen tulos sanoo, että termodynaamisella rajalla ilman ulkoista magneettikenttää empiirinen magnetisaatio keskittyy paramagneettisessa faasissa $\beta < \beta_c$ arvoon nolla, ja ferromagneettisessa faasissa nollasta eroavaan arvoon $\pm \bar{m}(\beta)$ (*spontaani magnetisaatio*), jonka merkki on positiivinen tai negatiivinen todennäköisyydellä puoli. Toinen tulos sanoo, että termodynaamisella rajalla positiivisessa ulkoisessa magneettikentässä $B > 0$ magnetisaatio keskittyy arvoon $\tilde{m}(\beta, B) > 0$, jonka raja kun ulkoinen magneettikenttä poistetaan $B \searrow 0$ on paramagneettisessa faasissa nolla ja ferromagneettisessa faasissa nollasta eroava $\bar{m}(\beta) > 0$. Kolmas tulos koskee kvantitatiivista tietoa kriittisestä käyttäytymisestä, se antaa eräät *kriittiset eksponentit*, jolle käytämme merkintöjä \mathfrak{b} ja \mathfrak{d} .² Tuloksen mukaan lähellä kriittistä pistettä spontaani magnetisaatio käyttäytyy seuraavasti: $\bar{m}(\beta) \sim |\beta - \beta_c|^{\mathfrak{b}}$ ja $\tilde{m}(\beta_c, B) \sim |B|^{1/\mathfrak{d}}$, missä $\mathfrak{b} = \frac{1}{2}$ ja $\mathfrak{d} = 3$.

Lause II.24. *Olkoon $\beta > 0$ kiinnitetty ja $B = 0$. Kun $N \rightarrow \infty$, Curie-Weiss mallin empiiriset magnetisaatiot M_N konvergoivat heikosti kohti satunnaismuuttujaa M_∞ , jonka jakauma riippuu β :sta seuraavasti:*

- Jos $\beta < \beta_c$, niin $M_\infty = 0$ melkein varmasti.
- Jos $\beta > \beta_c$, niin on olemassa spontaani magnetisaatio $\bar{m} = \bar{m}(\beta) > 0$ siten, että $\mathbf{P}[M_\infty = +\bar{m}] = \frac{1}{2}$ ja $\mathbf{P}[M_\infty = -\bar{m}] = \frac{1}{2}$.

Lause II.25. *Olkoon $\beta > 0$ ja $B > 0$ kiinnitettyjä. Kun $N \rightarrow \infty$, Curie-Weiss mallin empiiriset magnetisaatiot M_N konvergoivat heikosti kohti vakiota $\tilde{m}(\beta, B) > 0$. Kun $B \searrow 0$, pätee*

$$\lim_{B \searrow 0} \tilde{m}(\beta, B) = \begin{cases} \bar{m}(\beta) > 0 & \text{jos } \beta > \beta_c \\ 0 & \text{jos } \beta < \beta_c \end{cases},$$

missä $\bar{m}(\beta) > 0$ on sama spontaani magnetisaatio kuin edellisessä lauseessa.

Lause II.26. *Edellisissä tuloksissa esiintyvillä funktioilla \bar{m} ja \tilde{m} on seuraavat asymptotiikat kriittisen pisteen $\beta = \beta_c = \frac{1}{2}$, $B = 0$ läheisyydessä:*

$$\begin{array}{ll} \lim_{\beta \searrow \beta_c} \frac{\bar{m}(\beta)}{|\beta - \beta_c|^{\mathfrak{b}}} \neq 0 & \text{missä } \mathfrak{b} = \frac{1}{2} \\ \lim_{B \searrow 0} \frac{\tilde{m}(\beta_c, B)}{B^{1/\mathfrak{d}}} \neq 0 & \text{missä } \mathfrak{d} = 3. \end{array}$$

²Näille kriittisille eksponenteille yleensä käytetyt symbolit ovat β ja δ , joilla kuitenkin valitettavasti on myös muita vakiintuneita merkityksiä. Välttääksemme sekaannusta valitsemme siksi yllä olevat vastaavat tyylliteltyt kirjaisimet.

3.3. Curie–Weiss mallin analyysiä

Aloitamme huomaamalla, että energia voidaan kirjoittaa muodossa

$$H_N(\underline{\sigma}) = -N \left(M_N(\underline{\sigma})^2 + B M_N(\underline{\sigma}) \right) = N \Psi(M_N(\underline{\sigma})),$$

missä $\Psi(m) = -m^2 - Bm$.

Siksi partitiofunktioinkin voidaan kirjoittaa muodossa

$$Z_N(\beta) = \sum_{m \in \mathcal{M}_N} z_N(m) e^{-N\beta\Psi(m)},$$

missä empiirisen magnetisaation kaikkien mahdollisten arvojen joukko on

$$\mathcal{M}_N = \left\{ \frac{-N}{N}, \frac{2-N}{N}, \frac{4-N}{N}, \dots, \frac{N-2}{N}, \frac{N}{N} \right\}$$

eli $\begin{cases} \mathcal{M}_N = [-1, 1] \cap \frac{2}{N}\mathbb{Z} & \text{jos } N \text{ on parillinen} \\ \mathcal{M}_N = [-1, 1] \cap \frac{2}{N}(\mathbb{Z} + \frac{1}{2}) & \text{jos } N \text{ on pariton} \end{cases}$

ja

$$z_N(m) = \# \left\{ \underline{\sigma} \in \Omega_N \mid \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i = m \right\} = \binom{N}{N\frac{1+m}{2}} = \frac{N!}{(N\frac{1+m}{2})! (N\frac{1-m}{2})!}.$$

on binomikerroin, joka kertoo kuinka moni spinkonfiguraatio tuottaa empiirisen magnetisaation arvoksi m .

Rajan $N \rightarrow \infty$ analysoimista varten tarvitsemme binomikertoimien asymptotiikkaa. Muistutamme, että Stirling approksimaatiosta $n! \sim \left(\frac{n}{e}\right)^n \sqrt{2\pi n}$ (Lemma I.80) seuraa suoraviivaisesti Lause I.84, jonka mukaan

$$\log(z_N(m)) = N(\log(2) - I(m)) + o(N), \quad (\text{II.30})$$

missä $I(m)$ on Cramèr entropia

$$I(m) = \frac{1+m}{2} \log(1+m) + \frac{1-m}{2} \log(1-m). \quad (\text{II.31})$$

Huomautamme, että $I: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ on jatkuva: raja-arvot $m \rightarrow +1$ ja $m \rightarrow -1$ saadaan käyttäen tuttua logaritmin ominaisuutta $x \log(x) \rightarrow 0$ kun $x \searrow 0$.

Magneettinen Gibbsin vapaa energia $F_N = -\frac{1}{\beta} \log(Z_N)$, tai paremminkin sen osuus $\frac{1}{N} F_N$ yhtä alkeismagneettia kohti, voidaan nyt laskea rajalla $N \rightarrow \infty$ partitiofunktioista

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, B) &= \sum_{m \in \mathcal{M}_N} z_N(m) e^{-N\beta\Psi(m)} \\ &= \sum_{m \in \mathcal{M}_N} \exp\left(-N\beta(g(\beta, m) - Bm) + o(N)\right), \end{aligned} \quad (\text{II.32})$$

missä

$$g(\beta, m) = \frac{I(m) - \log(2)}{\beta} - m^2 \quad (\text{II.33})$$

on nk. magneettinen Helmholtzin vapaa energia. Seuraava Propositio sanoo, että Gibbsin vapaa energia $f = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} F_N$ on Helmholtzin vapaan energian g Legendre-muunnos.

Propositio II.27. *Olkoon $\beta > 0$ ja $B \in \mathbb{R}$. Kun $N \rightarrow \infty$, pätee*

$$f(\beta, B) := \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{-1}{\beta N} \log(Z_N(\beta, B)) \right) = \inf_{m \in [-1, 1]} (g(\beta, m) - Bm).$$

Todistus. Yhtälön todistamiseksi todistamme erikseen epäyhtälöt molempiin suuntiin. Aloitetaan vapaan energian alarajasta, joka saadaan ylärajasta partitiofunktiolle

$$\begin{aligned} Z_N(\beta, B) &= \sum_{m \in \mathcal{M}_N} \exp[-N\beta(g(\beta, m) - Bm) + o(N)] \\ &\leq (N+1) \max_{m \in \mathcal{M}_N} (\exp[-N\beta(g(\beta, m) - Bm) + o(N)]). \end{aligned}$$

Ottamalla tästä puolittain logaritmit, jakamalla N :llä, ja keräämällä erikseen termit, jotka häviävät rajalla $N \rightarrow \infty$, saadaan

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \log(Z_N(\beta, B)) &\leq \beta \max_{m \in \mathcal{M}_N} (-g(\beta, m) + Bm) + o(1) \\ &\leq \beta \sup_{m \in [-1, 1]} (-g(\beta, m) + Bm) + o(1). \end{aligned}$$

Jakamalla edelleen $-\beta$:lla ja viemällä $N \rightarrow \infty$ saadaan haluttu alaraja Gibbsin vapaalle energialle $f(\beta, B)$

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{-1}{\beta N} \log(Z_N(\beta, B)) \geq \inf_{m \in [-1, 1]} (g(\beta, m) - Bm).$$

Vapaan energian yläraja saadaan vastaavasti partitiofunktion alaraja-arviosta, jossa partitiofunktiota arvioidaan summan suurimmalla termillä

$$Z_N(\beta, B) \geq \max_{m \in \mathcal{M}_N} (\exp[-N\beta(g(\beta, m) - Bm) + o(N)]).$$

Jälleen ottamalla logaritmi ja jakamalla N :llä, saamme

$$\frac{1}{N} \log(Z_N(\beta, B)) \geq -\beta \max_{m \in \mathcal{M}_N} (g(\beta, m) - Bm) + o(1).$$

Funktio $m \mapsto g(\beta, m) - Bm$ on jatkuva välillä $[-1, 1]$. Kompaktisuudesta seuraa, että se saavuttaa miniminsä. Joukossa \mathcal{M}_N on pisteitä, jotka ovat enintään etäisyydellä $\frac{2}{N}$ pisteestä, jossa minimi saavutetaan, ja jatkuvuuden perusteella siis

$$\min_{m \in \mathcal{M}_N} (g(\beta, m) - Bm) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \inf_{m \in [-1, 1]} (g(\beta, m) - Bm).$$

Jakamalla taas $-\beta$:lla ja viemällä $N \rightarrow \infty$ saadaan haluttu yläraja Gibbsin vapaalle energialle $f(\beta, B)$

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{-1}{\beta N} \log(Z_N(\beta, B)) \leq \inf_{m \in [-1, 1]} (g(\beta, m) - Bm).$$

Saamistamme epäyhtälöistä päättelemme, että vapaan energian määrittelevä raja $f(\beta, B) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{-1}{\beta N} \log(Z_N(\beta, B)) \right)$ on olemassa ja sille pätee väitetty kaava. \square

Tulkinnasta toteamme tässä, että Helmholtzin vapaa energia g ilmaisee empiirisen magnetisaation suurten poikkeamien tahdin: karkeasti sanottuna todennäköisyys että magnetisaatio saa tietyn arvon on eksponentiaalisen pieni

$$\mu_{\beta, B}^{(N)}[M_N \approx m] \sim \exp[-N\beta(g(\beta, m) - Bm - f(\beta, B))].$$

Tarkemmin tämä on muotoiltu seuraavassa.

Propositio II.28. *Kaikilla avoimilla joukoilla $A \subset [-1, 1]$ pätee*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{-1}{N} \log \left(\mu_{\beta, B}^{(N)}[M_N \in A] \right) = \beta \left[\inf_{m \in A} (g(\beta, m) - Bm) - f(\beta, B) \right].$$

Todistus. Todennäköisyys sille, että $M_N \in A$ on

$$\mu_{\beta,B}[M_N \in A] = \frac{1}{Z_N(\beta,B)} \sum_{m \in A \cap \mathcal{M}_N} z_N(m) e^{N\beta(m^2+Bm)}.$$

Arvoimalla oikealla puolella esiintyvää summaa samoin kuin edellisen lauseen todistuksessa, saamme

$$\frac{1}{N} \log \left(\sum_{m \in A \cap \mathcal{M}_N} z_N(m) e^{N\beta(m^2+Bm)} \right) = -\beta \inf_{m \in A} (g(\beta, m) - Bm) + o(1).$$

Väitetty kaava seuraa ottamalla logaritmi todennäköisyydestä ja käyttämällä myös edellistä tulosta partitiofunktion logaritmin asymptotiikalle. \square

Voimme sitten todistaa päätuloksemme. Nimittäin Helmholtzin vapaan energian minimi (eli suurten poikkeamien tahdin nollakohdat) kertovat mihin pisteisiin M_N :n jakauma konsentroituu — kaikkialla muualla jakauma antaa eksponentiaalisen pieniä todennäköisyyksiä. Helmholtzin vapaan energian minimi löydetään suoraviivaisilla laskuilla. Muotoilemme näistä asioista seuraavat aputulokset.

Lemma II.29. *Oletetaan, että reaaliarvoiset satunnaismuuttujat $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ suppenevat heikosti, $X_n \xrightarrow{w} X$, ja että ne toteuttavat suurten poikkeamien yläraja-arvion*

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{\log \mathbb{P}[X_n \in A]}{n} \leq -\inf_{x \in A} \phi(x) \quad \text{kaikilla avoimilla } A \subset \mathbb{R},$$

missä suurten poikkeamien tahtifunktio $\phi: \mathbb{R} \rightarrow [0, \infty)$ on jatkuva. Silloin raja-satunnaismuuttuja X saa arvoja joukossa $N = \{x \in \mathbb{R} \mid \phi(x) = 0\}$, eli pätee $\mathbb{P}[X \in N] = 1$.

Todistus. Määritellään avoimet joukot $A_\varepsilon = \{x \in \mathbb{R} \mid \phi(x) > \varepsilon\}$, kun $\varepsilon > 0$. Koska $\inf_{x \in A_\varepsilon} \phi(x) \geq \varepsilon$ (jatkuvuuden perusteella), päätelemme suurten poikkeamien yläraja-arviosta, että $\mathbb{P}[X_n \in A_\varepsilon] \rightarrow 0$ kun $n \rightarrow \infty$ (nämä todennäköisyydet menevät nollaan vieläpä eksponentiaalisen nopeasti). Silloin Lauseen I.41 karakterisaation (iv) perusteella $\mathbb{P}[X \in A_\varepsilon] \leq \liminf \mathbb{P}[X_n \in A_\varepsilon] = 0$. Koska joukon N komplementti on muotoa A_ε olevien joukkojen numeroituva yhdiste, saamme halutun johtopäätöksen

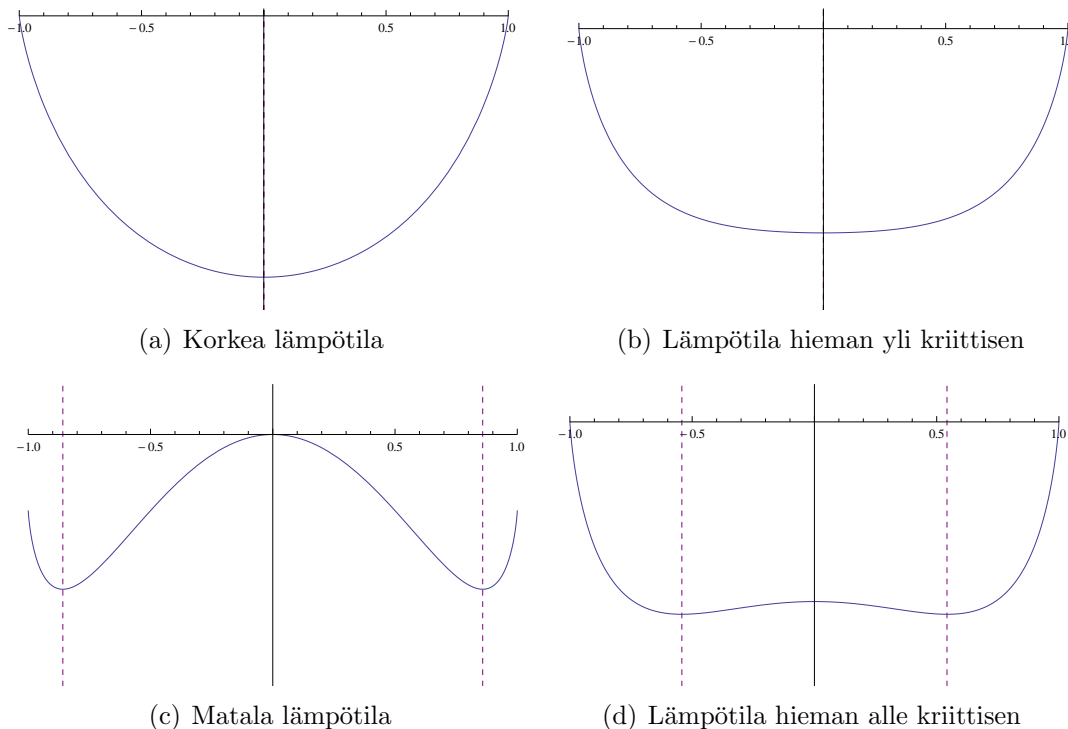
$$\mathbb{P}[X \notin N] = \mathbb{P}\left[X \in \bigcup_{k=1}^{\infty} A_{1/k}\right] \leq \sum_{k=1}^{\infty} \underbrace{\mathbb{P}[X \in A_{1/k}]}_{=0} = 0.$$

\square

Kuva II.6 havainnollistaa Helmholtzin vapaan energian $m \mapsto g(\beta, m)$ minimien riippuvuutta parametrilla β , ja tarvittavat ominaisuudet on muotoiltu seuraavassa aputuloksessa.

Lemma II.30. *Kiinnitettyllä $\beta > 0$ ja $B = 0$, Helmholtzin vapaan energian $g(\beta, m) = \frac{I(m) - \log(2)}{\beta} - m^2$ määrittelemälle suurten poikkeamien tahtifunktiolle $\phi(m) = \beta(g(\beta, m) - f(\beta, 0))$ pätee:*

- $\phi: [-1, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ on jatkuva ja sen minimiarvo on 0.
- Jos $\beta \leq \frac{1}{2}$, funktion ϕ ainoa nollakohta on pisteessä $m = 0$.
- Jos $\beta > \frac{1}{2}$, niin yhtälöllä $\phi'(m) = 0$ on yksikäsitteinen positiivinen ratkaisu $m = \bar{m}(\beta)$, ja funktion ϕ ainoat nollakohdat ovat pisteissä $m = +\bar{m}(\beta)$ ja $m = -\bar{m}(\beta)$.



KUVA II.6. Curie-Weiss mallin Helmholtzin vapaa energia $m \mapsto g(\beta, m)$ antaa empirisen magnetisaation suurten poikkeamien tahdin: paramagneettisessa faasissa $\beta < \beta_c = \frac{1}{2}$ minimi on pisteessä $m = 0$, ferromagneettisessa faasissa $\beta > \beta_c = \frac{1}{2}$ minimejä on kaksi, $m = \pm \bar{m}(\beta)$. Kuva II.6(a): $\beta = 0.25$, Kuva II.6(b): $\beta = 0.46$, Kuva II.6(d): $\beta = 0.56$, Kuva II.6(c): $\beta = 0.75$.

Todistus. Funktion ϕ jatkuvuus on selvä: muistutamme, että olemme jo todenneet funktion I jatkuvaksi välillä $[-1, 1]$. Proposition II.27 mukaan $f(\beta, 0)$ on funktion $m \mapsto g(\beta, m)$ minimiarvo, joten funktion ϕ minimiarvo on 0, ja olemme todistaneet kohdan (a).

Lisäksi ϕ on C^∞ välillä $(-1, 1)$, ja parillinen $\phi(-m) = \phi(m)$. Siten selvästi $\phi'(0) = 0$. Helpolla laskulla saadaan $I''(m) = \frac{1}{1-m^2}$, josta edelleen saamme $\phi''(m) = \frac{1}{1-m^2} - 2\beta$. Näemme, että $\beta \geq \frac{1}{2}$, pätee $\phi''(m) \geq 0$ ja ainoa minimi on pisteessä $m = 0$. Vastaavasti, kun $\beta < \frac{1}{2}$, toinen derivaatta on negatiivinen origon sisältävällä välillä ja epänegatiivinen muualla, joten funktiolla ϕ on maksimi origossa ja minimi sen derivaatan muissa kahdessa nollakohdassa. \square

Lauseen II.24 todistus. Haluamme osoittaa, että empiriset magnetisaatiot M_N suppenevat heikosti kohti väitettyä jakaumaa. Huomaamme ensinnäkin, että satunnaismuuttujajono $(M_N)_{N \in \mathbb{N}}$ on tiukka, koska kaikkien M_N arvot ovat välillä $[-1, 1]$ (kts. Luku I.3.2). Lauseesta I.51 seuraa, että jokaisella osajonolla $(M_{N_k})_{k \in \mathbb{N}}$ on suppenevia osajonoja. Riittää osoittaa, että jokaisen suppenevan osajonon raja on haluttu.

Tapauksessa $\beta \leq \beta_c = \frac{1}{2}$, jos $M_{N_k} \xrightarrow{w} M_\infty$, pätee Lemman II.29, Proposition II.28 ja Lemman II.30(b) perusteella $\mathbb{P}[M_\infty = 0] = 1$. Koska kaikki osajonorajat ovat haluttua muotoa, tiukkuudesta päättelemme väitetyt suppenemisen $M_N \xrightarrow{w} 0$.

Tapauksessa $\beta > \beta_c = \frac{1}{2}$, jos $M_{N_k} \xrightarrow{w} M_\infty$, pätee Lemman II.29, Proposition II.28 ja Lemman II.30(c) perusteella $\mathbb{P}[M_\infty \in \{-\bar{m}, +\bar{m}\}] = 1$. Lisäksi kun $B = 0$ on voimassa symmetria $\mathbb{P}[M_N < 0] = \mathbb{P}[M_N > 0]$, josta saadaan vastaava ominaisuus rajasatunnaismuuttujalle M_∞ , ja siten $\mathbb{P}[M_\infty = +\bar{m}] = \frac{1}{2} = \mathbb{P}[M_\infty = -\bar{m}]$. Jälleen päättelemme väitetyt heikon suppenemisen. \square

Lauseen II.25 todistus. Todistus on oleellisesti sama kuin edellä, ainoana erona on, että jos $B > 0$, Helmholtzin vapaan energian minimi on pisteessä $\bar{m}(\beta, B) > 0$. □

Lauseen II.26 todistus. ...jätetään harjoitustehtäväksi. □