

# О ВЫЧИСЛЕНИИ РЕШЕТОЧНОЙ СТАТИСТИЧЕСКОЙ СУММЫ С ПОМОЩЬЮ КВАДРАТУР ГАУССА

А. К. Журавлев \*

*Институт физики металлов им. М. Н. Михеева  
Уральского отделения Российской академии наук  
620137, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 10 апреля 2025 г.,  
после переработки 17 июня 2025 г.  
Принята к публикации 17 июня 2025 г.

Разработан метод построения сходящейся при всех температурах последовательности приближений для статистической суммы решетки конечных размеров. Он заключается в конструировании квадратурной формулы гауссова типа, узлы и веса которой вычисляются по набору моментов плотности состояний, доступному из высокотемпературного разложения для статистической суммы. Подробно рассмотрено применение метода для вычисления свободной энергии и теплоемкости в модели Изинга.

DOI: 10.31857/S0044451025080176

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема изучения свойств систем с сильным взаимодействием между частицами является одной из самых сложных в статистической физике. Как правило, аналитических методов исследования здесь оказывается недостаточно и приходится прибегать к численным. Методов, результаты которых в принципе могут неограниченно приближаться к точному решению, не так много. Это прямая точная диагонализация, которая наталкивается на проблему экспоненциального роста размерности гильбертова пространства с ростом размера системы и поэтому ограничена лишь малыми кластерами [1]. Это и весьма популярный метод Монте-Карло [2], который, однако, сталкивается с трудностями для квантовых фермионных систем при низких температурах из-за так называемой «проблемы знака» [3].

Кроме того, существуют регулярные разложения по какому-либо параметру модели [4]. Разложение по степеням константы связи обычно дает расходящийся ряд [5]. Существует и разложение в ряд по степеням обратной температуры  $\beta = 1/T$ , привлекательной особенностью которого является возможность относительно дешевого (без экспоненциального роста требований к компьютерной памяти)

вычисления коэффициентов этого разложения [6]. Оно применимо к целому ряду моделей, в частности Изинга [7, 8], Гейзенберга [9, 10], Хаббарда [11, 12]. Возникающие ряды для удельной свободной энергии, теплоемкости или магнитной восприимчивости также получают расходящимися. Из них, используя аппроксимации Паде [13] и вводя дополнительные предположения об общем виде исследуемой физической величины в области фазового перехода, получают значения ее критических показателей, то есть фактически информацию о ее поведении лишь в ближайшей окрестности выше температуры фазового перехода [14].

В представленной работе предлагается подходящий для любых температур метод, в котором проблемы с расходимостями при низких температурах ( $\beta \rightarrow \infty$ ) избегаются путем замены разложения статистической суммы по степеням  $\beta$  на квадратурную формулу для нее.

Рассмотрим решеточную модель с плотностью состояний  $W(\varepsilon)$ , отличной от нуля в пределах отрезка  $[\varepsilon_{min}, \varepsilon_{max}]$ . Для ее статистической суммы

$$Z = \int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{max}} e^{-\beta\varepsilon} W(\varepsilon) d\varepsilon \quad (1)$$

формальное разложение в ряд Тейлора по  $\beta$  дает известное выражение:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mu_n}{n!} (-\beta)^n, \quad (2)$$

\* E-mail: a.k.zhuravlev@mail.ru

где

$$\mu_n = \int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{max}} \varepsilon^n W(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3)$$

Запишем для интеграла (1) квадратурную формулу

$$\int_{\varepsilon_{min}}^{\varepsilon_{max}} e^{-\beta\varepsilon} W(\varepsilon) d\varepsilon \approx \sum_{i=0}^{M-1} w_i e^{-\beta\varepsilon_i}. \quad (4)$$

Пусть  $\varepsilon_0$  – наименьший из всех узлов  $\varepsilon_i$ . Тогда для свободной энергии можно записать выражение

$$F = -T \ln Z \approx \varepsilon_0 - \frac{1}{\beta} \ln \sum_{i=0}^{M-1} w_i e^{-\beta(\varepsilon_i - \varepsilon_0)}, \quad (5)$$

в котором все экспоненты затухают с ростом  $\beta$ , и проблем с бесконечностями при  $\beta \rightarrow \infty$  нет вообще.

Сложность в том, что плотность состояний  $W(\varepsilon)$  и, следовательно, подынтегральная функция в (4) в явном виде не известны. В данной работе показано, как, тем не менее, найти узлы  $\varepsilon_i$  и веса  $w_i$  квадратуры, зная лишь моменты плотности состояний  $\mu_n$ .

## 2. ВЫВОД ОСНОВНЫХ ФОРМУЛ МЕТОДА

Рассмотрим квадратурную формулу (4). Классическая формула Гаусса имеет место для случая, когда  $W(\varepsilon) = 1$ . В этом случае узлы квадратуры являются нулями полинома Лежандра степени  $M$ . Существует и обобщение квадратурного правила Гаусса на случай произвольной  $W(\varepsilon)$ , согласно которому сначала нужно построить набор ортогональных полиномов:

$$\begin{aligned} p_{-1}(\varepsilon) &\equiv 0, \quad p_0(\varepsilon) \equiv 1, \\ p_{j+1}(\varepsilon) &= (\varepsilon - a_j)p_j(\varepsilon) - b_j p_{j-1}(\varepsilon), \quad j = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6)$$

где

$$\begin{aligned} a_j &= \frac{\int \varepsilon p_j^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon}{\int p_j^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon}, \quad j = 0, 1, \dots, \\ b_j &= \frac{\int p_j^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon}{\int p_{j-1}^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon}, \quad j = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (7)$$

(все интегралы берутся от  $\varepsilon_{min}$  до  $\varepsilon_{max}$ ), а затем решить задачу о нахождении собственных значений и векторов трехдиагональной матрицы, составленной из коэффициентов  $a_j$  и  $b_j$ :

$$\begin{pmatrix} a_0 & \sqrt{b_1} & & & \\ \sqrt{b_1} & a_1 & \sqrt{b_2} & & \\ & \sqrt{b_2} & a_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \sqrt{b_{M-1}} \\ & & & \sqrt{b_{M-1}} & a_{M-1} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} v_{i0} \\ v_{i1} \\ v_{i2} \\ \vdots \\ v_{i,M-1} \end{pmatrix} = \varepsilon_i \begin{pmatrix} v_{i0} \\ v_{i1} \\ v_{i2} \\ \vdots \\ v_{i,M-1} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Тогда собственные значения этой матрицы будут искомыми узлами квадратуры  $\varepsilon_i$ , а из нормированных на единицу собственных векторов  $\mathbf{v}_i$  можно получить ее веса  $w_i = v_{i0}^2 \int W(\varepsilon) d\varepsilon$  (подробный вывод имеется в §4.5 книги [15]).

В нашем случае явный вид функции  $W(\varepsilon)$  неизвестен. Но для вычислений коэффициентов  $a_j$  и  $b_j$  по (7) нужна не она сама, а интегралы от нее, которые можно выразить через известные моменты  $\mu_n$ , используя (3). В итоге, последовательно вычисляя  $p_j(\varepsilon)$ , получаем  $a_j$  и  $b_j$  согласно соотношениям (6) и (7):

$$\begin{aligned} a_0 &= \frac{\int \varepsilon p_0^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon}{\int p_0^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon} = \frac{\int \varepsilon W(\varepsilon) d\varepsilon}{\int W(\varepsilon) d\varepsilon} = \frac{\mu_1}{\mu_0}, \\ p_1(\varepsilon) &= (\varepsilon - a_0)p_0(\varepsilon) = (\varepsilon - a_0), \\ a_1 &= \frac{\int \varepsilon p_1^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon}{\int p_1^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon} = \frac{\mu_3 - 2a_0\mu_2 + a_0^2\mu_1}{\mu_2 - 2a_0\mu_1 + a_0^2\mu_0}, \\ b_1 &= \frac{\int p_1^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon}{\int p_0^2(\varepsilon) W(\varepsilon) d\varepsilon} = \frac{\mu_2 - 2a_0\mu_1 + a_0^2\mu_0}{\mu_0}, \\ p_2(\varepsilon) &= (\varepsilon - a_1)p_1(\varepsilon) - b_1 p_0(\varepsilon) = (\varepsilon - a_1)(\varepsilon - a_0) - b_1, \dots \end{aligned} \quad (9)$$

Формула для весов примет вид  $w_i = \mu_0 v_{i0}^2$ .

Таким образом, зная  $2M$  моментов  $\mu_n$ , по (9) и (8) можно найти  $M$  пар  $\{\varepsilon_i, w_i\}$ . После чего статистическая сумма  $Z$  и свободная энергия  $F$  вычисляются по формулам (4) и (5), внутренняя энергия

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right) \approx \frac{1}{Z} \sum_{i=0}^{M-1} w_i \varepsilon_i e^{-\beta\varepsilon_i} \quad (10)$$

и теплоемкость

$$\begin{aligned} C &= \frac{\partial U}{\partial T} \approx \\ &\approx \beta^2 \left[ \frac{1}{Z} \sum_{i=0}^{M-1} w_i \varepsilon_i^2 e^{-\beta\varepsilon_i} - \left( \frac{1}{Z} \sum_{i=0}^{M-1} w_i \varepsilon_i e^{-\beta\varepsilon_i} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

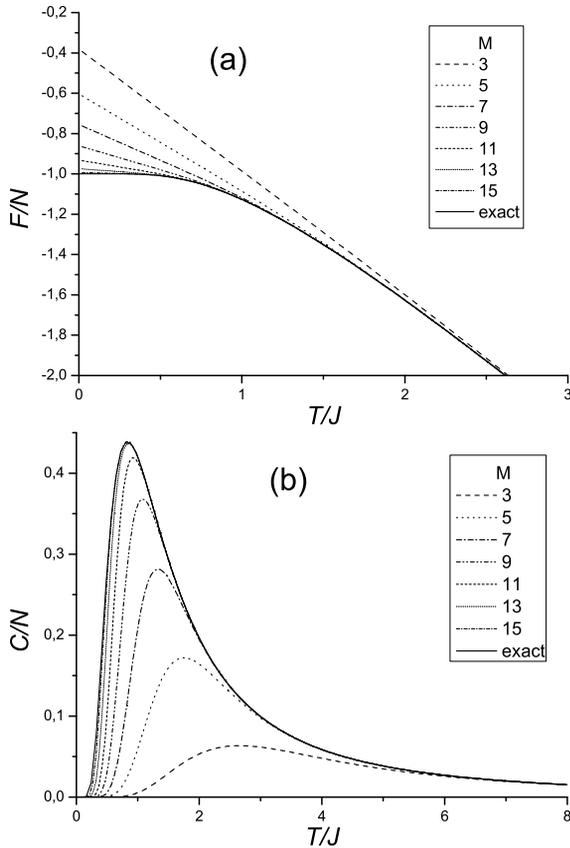


Рис. 1. Последовательность приближений и точное решение для свободной энергии (а) и теплоемкости (б) одномерной модели Изинга при  $N = 20$

Сходимость процесса к точному решению при увеличении  $M$  гарантируется тем, что гауссова квадратура при увеличении числа узлов сходится к точному значению интеграла.

### 3. ТЕСТИРОВАНИЕ МЕТОДА

Рассмотрим применение описанного метода к вычислению статистической суммы, свободной энергии и теплоемкости простейшей решеточной модели с взаимодействием – модели Изинга. Для нее достаточно легко получить точные решения, с которыми можно сравнить полученные результаты.

#### 3.1. Одномерная модель Изинга

Возьмем замкнутую в кольцо изинговскую цепочку из  $N$  узлов, энергия которой дается выражением

$$E_N = -J \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (12)$$

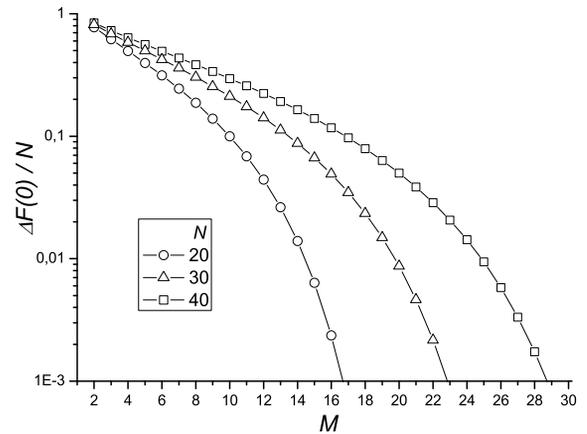


Рис. 2. Разность между приближенным и точным значениями удельной свободной энергии при  $T = 0$  в зависимости от числа узлов квадратуры  $M$  при различных длинах цепочки  $N$

( $\sigma_i$  может принимать значения  $\pm 1$ ). Для нее известно точное выражения для статистической суммы [16]:

$$Z_N = (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^N + (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^N. \quad (13)$$

Моменты  $\mu_n$  можно получить, разлагая (13) в ряд по  $\beta$ . Для нечетных  $n$  имеем  $\mu_n = 0$ , для четных –

$$\begin{aligned} \mu_0 &= 2^N, \quad \mu_2 = 2^N N J^2, \\ \mu_4 &= 2^N (3N^2 - 2N) J^4, \\ \mu_6 &= 2^N (15N^3 - 30N^2 + 16N) J^6, \\ \mu_8 &= 2^N (105N^4 - 420N^3 + 588N^2 - 272N) J^8, \\ \mu_{10} &= 2^N (945N^5 - 6300N^4 + 16380N^3 - \\ &\quad - 18960N^2 + 7936N) J^{10}, \dots \end{aligned} \quad (14)$$

Несмотря на громоздкость выражений для моментов, формулы для коэффициентов трехдиагональной матрицы (8), вычисленные с помощью компьютерной алгебры, получаются весьма компактными ( $n \leq N$ ):

$$a_n = 0, \quad b_n = n(N - n + 1)J^2. \quad (15)$$

Результаты расчетов свободной энергии и теплоемкости для  $N = 20$  представлены на рис. 1.

Последовательности сходятся к соответствующим точным решениям при всех температурах, при высоких температурах быстрее, чем при низких. Также исследована скорость сходимости для свободной энергии при нулевой температуре (рис. 2) и обнаружено, что для достижения одной и той же точности необходимо число узлов квадратуры, примерно пропорциональное размерам кластера.

### 3.2. Модель Изинга на квадратной решетке

Моменты  $\mu_n$  здесь можно получить из разложения для статистической суммы  $N$ -узельной решетки:

$$Z = 2^N (\cosh \beta J)^{N_b} \sum_r n(r) v^r, \quad (16)$$

где  $N_b$  – число межузельных связей,  $n(r)$  – число замкнутых графов из  $r$  связей, которые можно разместить на решетке,  $n(0) = 1$ ,  $v = \text{th}(\beta J)$  [17]. В частности, для квадратной решетки с периодическими граничными условиями (геометрия тора) при выполнении условия  $r < \sqrt{N}$  справедлива общая формула

$$Z = 2^N (\text{ch } \beta J)^{2N} \left( 1 + Nv^4 + 2Nv^6 + \frac{N(N+9)}{2}v^8 + 2N(N+6)v^{10} + \frac{N(N^2+39N+224)}{6}v^{12} + \dots \right) \quad (17)$$

(в случае  $r \geq \sqrt{N}$  нужно еще добавить графы, которые пересекают границу и опоясывают тор). Раскладывая это выражение в ряд (2) по  $\beta$ , получаем значения  $\mu_n$ .

Кроме того, для небольших кластеров сколь угодно много моментов можно получить непосредственно по формуле (3) после вычисления  $W(\varepsilon)$  полным перебором всех возможных конфигураций  $\{\sigma_i\}$ . Именно так было сделано при расчете термодинамических величин для кластеров  $4 \times 4$  и  $6 \times 6$ . Результаты расчетов свободной энергии качественно выглядят так же, как в одномерном случае (рис. 1 а), и на отдельном рисунке не приводятся.

На рис. 3 приведены результаты расчетов для теплоемкости, сравниваемые с точным решением, полученным суммированием по всем возможным конфигурациям  $\{\sigma_i\}$ . При любой температуре последовательности приближений сходятся к соответствующим точным решениям. Зависимость скорости сходимости от температуры и размера кластера аналогична обнаруженной для одномерного случая.

### 4. О ПРИБЛИЖЕННОМ ВЫЧИСЛЕНИИ МОМЕНТОВ ВЫСОКИХ ПОРЯДКОВ

При тестировании метода было обнаружено, что для достижения фиксированной точности результата требуется число моментов, пропорциональное размеру кластера. На практике же, как правило, удается вычислить лишь один-два десятка членов

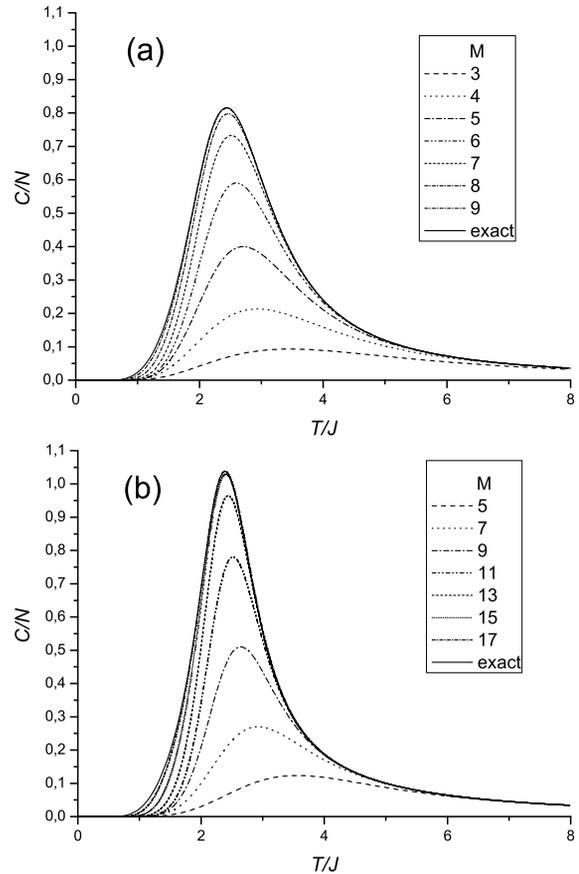


Рис. 3. Теплоемкость для квадратных решеток размерами  $4 \times 4$  (а) и  $6 \times 6$  (б)

высокотемпературного разложения. Поэтому необходимо обсудить возможность построения экстраполяции для  $\mu_n$  при больших  $n$ .

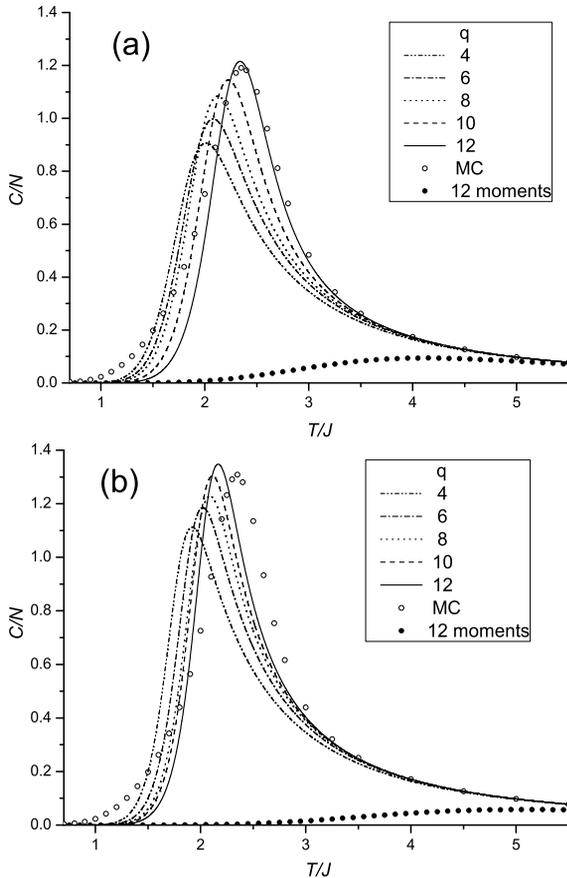
В качестве одного из возможных подходов к решению этой задачи отметим, что существует способ представить  $\mu_n$  в виде суммы слагаемых, зависящих от различных степеней размера кластера  $N$ , и последовательно учитывать в этих суммах слагаемые с наивысшими степенями  $N$ .

Введем приведенные моменты  $\tilde{\mu}_n = \mu_n / \mu_0$ . По ним можно построить кумулянты  $I_n$ , определяемые [18, 19] равенством

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} \tilde{\mu}_n = \exp \left[ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\beta^n}{n!} I_n \right], \quad (18)$$

из которого можно получить [20] рекуррентные соотношения:

$$I_n = \tilde{\mu}_n - \sum_{p=0}^{n-2} \binom{n-1}{p} I_{p+1} \tilde{\mu}_{n-p-1}. \quad (19)$$



**Рис. 4.** Теплоемкость для квадратных решеток размерами  $8 \times 8$  (а) и  $10 \times 10$  (б): линии — вычисления по приближенным моментам, полученным из  $q$  точных кумулянтов; светлые точки — расчет методом Монте-Карло; темные точки — вычисления по 12 точным моментам

Используя тот факт, что для решеточных моделей величина кумулянта прямо пропорциональна числу узлов решетки

$$I_n = c_n N \tag{20}$$

(см., например, [21]), запишем явные выражения для нескольких первых моментов:

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}_1 &= c_1 N, \quad \tilde{\mu}_2 = c_1^2 N^2 + c_2 N, \\ \tilde{\mu}_3 &= c_1^3 N^3 + 3c_1 c_2 N^2 + c_3 N, \\ \tilde{\mu}_4 &= c_1^4 N^4 + 6c_1^2 c_2 N^3 + (3c_2^2 + 4c_1 c_3) N^2 + c_4 N, \\ \tilde{\mu}_5 &= c_1^5 N^5 + 10c_1^3 c_2 N^4 + (15c_1 c_2^2 + 10c_1^2 c_3) N^3 + \\ &+ (10c_2 c_3 + 5c_1 c_4) N^2 + c_5 N. \end{aligned} \tag{21}$$

Как видно,  $\tilde{\mu}_n$  является многочленом по степеням  $N$ , в котором через первые удельные кумулянты  $c_1, \dots, c_q$  верно выражаются коэффициенты при наибольших степенях  $N$  — с  $N^n$  до  $N^{n-q+1}$  включительно.

Допустим, нами точно вычислены моменты  $\tilde{\mu}_n$  (и, следовательно, кумулянты  $I_n$ ) до  $q$ -го порядка. Положим  $I_n = 0$  для всех  $n > q$ . Теперь, используя (19), можно построить бесконечную последовательность приближенно вычисленных моментов  $\tilde{\mu}_n^{(q)}$ , в которой  $\tilde{\mu}_n^{(q)} = \tilde{\mu}_n$  для  $0 \leq n \leq q$  и

$$\tilde{\mu}_n^{(q)} = \sum_{p=0}^{q-1} \binom{n-1}{p} I_{p+1} \tilde{\mu}_{n-p-1}^{(q)} \tag{22}$$

для  $n > q$ , и уже по ним вычислить сколь угодно много узлов и весов квадратуры.

С помощью описанной методики были проведены расчеты для квадратных решеток размерами  $8 \times 8$  и  $10 \times 10$ . С помощью разложения формулы (17) в ряд по  $\beta$  были получены точные значения моментов до 12-го порядка. По ним точно вычислялись  $q = 4, 6, \dots, 12$  кумулянтов  $I_n$ . Затем с помощью экстраполяционной формулы (22) вычислялись дополнительные моменты  $\tilde{\mu}_n^{(q)}$  (и строилась квадратура для  $Z$ ) до тех пор, пока не начинало нарушаться (очевидно, как следствие приближенного характера формулы) термодинамическое требование, что свободная энергия должна убывать с ростом температуры. Таким образом, полное число моментов для кластера  $8 \times 8$  возросло до 40, а для кластера  $10 \times 10$  — до 64.

Рассчитанные графики теплоемкости приведены на рис. 4, из которого следует, что экстраполяция привела к качественному улучшению результата по сравнению с полученным непосредственно по 12 моментам. Сформирован пик теплоемкости, положение максимума которого с увеличением числа кумулянтов  $q$  последовательно сдвигается к положению максимума истинного пика (полученного методом Монте-Карло), практически достигая его в случае кластера  $8 \times 8$ , но не в случае кластера  $10 \times 10$ . Это позволяет сделать вывод, что экстраполяции по 12 точным кумулянтам достаточно для получения разумных результатов для кластера  $8 \times 8$ , но для кластера  $10 \times 10$  число кумулянтов следует увеличить.

### 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, предложенный метод дает принципиальную возможность, основываясь на наборе моментов плотности состояний, доступных из высокотемпературного разложения, построить последовательность приближений, сходящуюся при всех температурах к точной статистической сумме конечной решетки и производным от нее величинам

(свободной энергии, теплоемкости). Скорость сходимости тем быстрее, чем выше температура. Для получения высокой точности при низких температурах необходимо число моментов порядка размера кластера. Поэтому был применен кумулянтный способ получения длинных последовательностей приближенных моментов, позволивший получить разумные результаты для среднего размера кластеров по небольшому числу точных моментов.

Описанную методику можно совершенствовать, в частности, пробуя найти лучшую экстраполяционную формулу для моментов высокого порядка. Кроме того, высказанные в статье идеи могут быть полезны при вычислении величин, имеющих интегральное представление, подобное (1).

**Финансирование.** Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России для ИФМ УрО РАН (шифр «Квант», г. р. № 122021000038-7).

## ЛИТЕРАТУРА

1. E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994).
2. D. P. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge (2009).
3. E. Y. Loh, J. E. Gubernatis, R. T. Scalettar, S. R. White, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, *Phys. Rev. B* **41**, 9301 (1990).
4. J. Oitmaa, C. Hamer, and W. Zheng, *Series Expansion Methods For Strongly Interacting Lattice Models*, Cambridge University Press, Cambridge (2006).
5. И. М. Суслов, *ЖЭТФ* **127**, 1350 (2005).
6. H. A. Kramers and G. H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 263 (1941).
7. H.-X. He, C. J. Hamer, and J. Oitmaa, *J. Phys. A* **23**, 1775 (1990).
8. P. Butera and M. Comi, *Phys. Rev. B* **62**, 14837 (2000).
9. A. Lohmann, H. Schmidt, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **89**, 014415 (2014).
10. M. G. Gonzalez, B. Bernu, L. Pierre, and L. Messio, *Phys. Rev. B* **104**, 165113 (2021).
11. D. F. V. ten Haaf and J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. B* **46**, 6313 (1992).
12. M. Bartkowiak, J. A. Henderson, J. Oitmaa, and P. E. de Brito, *Phys. Rev. B* **51**, 14077 (1995).
13. Дж. Бейкер, П. Грейвс-Моррис, *Аппроксимации Паде*, Мир, Москва (1986).
14. *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 3, ed. by C. Domb and M. S. Green, Academic Press, London (1974).
15. W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, Cambridge (1992).
16. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
17. G. F. Newell and E. W. Montroll, *Rev. Mod. Phys.* **25**, 353 (1953).
18. R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100 (1962).
19. А. Н. Малахов, *Кумулянтный анализ случайных негауссовых процессов и их преобразований*, Советское радио, Москва (1978).
20. P. J. Smith, *Amer. Stat.* **49**, 217 (1995).
21. А. К. Журавлев, *ЖЭТФ* **158**, 520 (2020).