无序中的对称性
——诺奖得主帕里西工作解读

李欣阳[1,2]　金瑜亮[1,2,†]

(1　中国科学院理论物理研究所　北京　100190)

(2　中国科学院大学　北京　100049)

Symmetry in disorder
——on the 2021 Nobel Prize in Physics

LI Xin-Yang[1,2]　JIN Yu-Liang[1,2,†]

(1　Institute of Theoretical Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(2　University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

2021－12－15收到

† email: yuliangjin@itp.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20220105

摘　要　2021年度诺贝尔物理学奖授予三位科学家，真锅淑郎(Syukuro Manabe)、克劳斯·哈塞尔曼(Klaus Hasselmann)和乔治·帕里西(Giorgio Parisi)，以表彰他们“发现了气候和其他复杂现象中的隐藏模式”。其中帕里西获得二分之一的奖金，获奖理由是“发现从原子到行星尺度的物理系统中无序和涨落之间的相互影响”。帕里西的自旋玻璃理论深刻地揭示了无序体系中的隐藏对称性，为文章介绍的重点。

关键词　诺贝尔物理学奖，无序体系，对称性，相变，自旋玻璃

Abstract　The Nobel Prize in Physics 2021 was awarded to three scientists, Syukuro Manabe, Klaus Hasselmann and Giorgio Parisi, because “they found hidden patterns in the climate and in other complex phenomena”. Giorgio Parisi received half of the prize, “for the discovery of the interplay of disorder and fluctuations in physical systems from atomic to planetary scales”. Parisi’s theory on spin glasses deeply revealed the hidden symmetry in disordered systems, which is the focus of this article.

Keywords　Nobel Prize in Physics, disordered system, symmetry, phase transition, spin glass

1　相变、序参量与对称性破缺

在自然界和日常生活中，我们随处可见相变——物质从一种相变为另一种相。一个最常见的例子就是水：液态水既可以通过降温结成冰，也可以通过加热蒸发为水蒸气。这两个相变过程(液相到固相、液相到气相)都伴随着某些宏观物理量(例如密度)的突变，被称为非连续相变或一级相变。有意思的是，在水的相图上(图1)，代表气液相变的线终止于374 ℃附近(这个终点称为临界点)。在临界点，并没有任何物理量发生不连续的变化，但是某些物理量(如压缩系数)发散，在临界温度之上，气液不可分。物质经过临界点的过程称为连续相变或二级相变。

另一个重要的相变例子是铁磁相变，即磁铁

(铁磁相)在升温过程中失去磁性变为顺磁相的过程。首先发现这个现象的是著名物理学家皮埃尔·居里，因而，铁磁相变发生的温度被称为“居里温度”。铁磁相变是一个连续相变，在居里温度处，磁化率发散。

在相变发生的过程中，外界条件(例如温度)是连续变化的，然而物质的状态却可以发生突然的改变，以至于某些物理量发生不连续的变化或者发散。解释这种“神奇”的现象长期以来都是一个让物理学家着迷的问题。19世纪30年代，前苏联的天才物理学家列夫·朗道提出了“序参量”的概念，并且建立了朗道相变理论[1]。根据朗道理论，相变的过程必然伴随着某种“序”的变化。例如，液态的水分子是杂乱无章地排列的，而一旦结冰，它们就会规则有序地排列在晶格位置(分子会在晶格位置附近振动，但不会远离)，因而水结冰的液固相变过程中产生了晶体序，如图2所示。而在铁磁相变的过程中(图3)，原子的自旋指向由顺磁相中的随机状态变为指向某一特定方向，因而铁磁相变伴随着自旋指向序的产生，从而导致了材料的宏观磁性(自发磁化)。根据朗道理论，序参量在连续/非连续相变中，分别发生连续/非连续的变化。

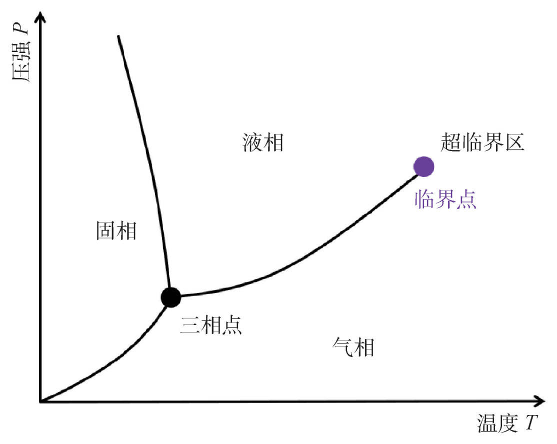

图1 水的相图

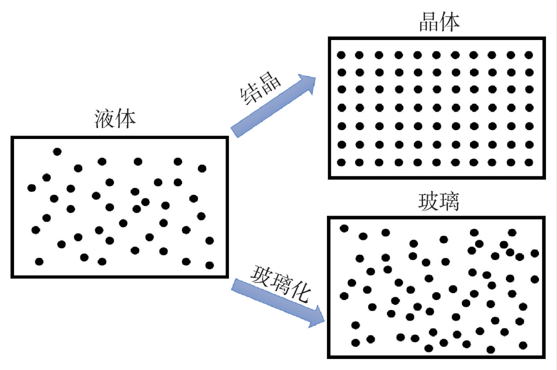

图2 结晶与玻璃化

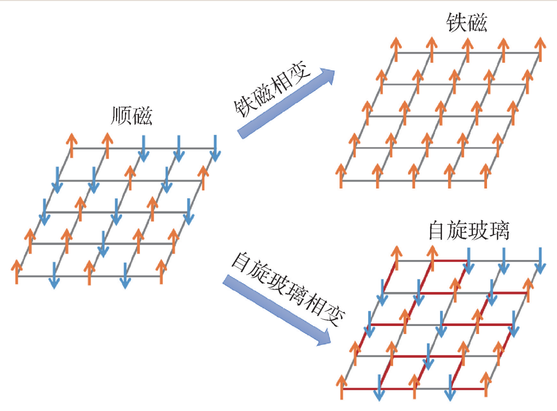

图3 铁磁相变和自旋玻璃相变。灰色的边代表铁磁相互作用 $J_{ij}=1$，红色的边代表反铁磁相互作用 $J_{ij}=-1$

相变过程中序的产生对应着某种对称性的破缺。例如，水具有平移和旋转对称性——由于水分子在空间是均匀无序分布的，整个体系在做任意的平移或旋转之后不变，然而一旦水结冰，平移和旋转对称性就破缺了(图2)，体系只有在特定的平移或旋转下才能保持不变(要求所有的分子在平移或旋转之后还处在晶格格点上)。类似地，顺磁相具有镜像反演对称性——所有自旋翻转后体系不变，而在铁磁相中这种对称性破缺——镜像反演操作后整个体系的磁化强度会改变符号(图3)。基于序参量和对称性破缺，朗道理论揭示了相变这一日常现象的深刻本质。

2 玻璃化和无序系统

伟大的物理理论往往有令人惊叹的普适性，朗道理论也不例外。几乎所有已知的两相之间的转变过程都可以被纳入朗道相变理论的框架。然而，似乎存在一个例外——玻璃化。高温下熔融的二氧化硅液体经过淬火(快速降温)形成石英玻璃，这个过程称为玻璃化。液体和玻璃(固体)在宏观性质上有着显著的不同，然而在微观分子的排列上似乎都是杂乱无章的(图2)。类似地，顺磁

相也可以通过自旋玻璃相变在低温下变为自旋玻璃相(图3)。自旋玻璃没有宏观的自发磁性(类似顺磁)，然而所有自旋几乎都是“冻”住、不会随着时间演化而翻转的(类似铁磁)。

如果朗道理论还是正确的，那么玻璃化过程对应了哪种序的产生、以及哪种对称性的破缺？事实上，玻璃态代表了一类复杂体系，称为“无序系统”。无序系统具有不同于简单体系(如气体、液体、顺磁等)的宏观性质，但是微观状态上似乎又是杂乱而没有规律的。这有悖于物理学家对于相变的理解：新相的产生必须有对应序的产生和对称性的破缺。最终，乔治·帕里西提供了答案。而他也因为“找到了无序复杂系统中隐藏的模式”而获得了2021年的诺贝尔物理学奖(图4)。

帕里西的理论基于自旋玻璃模型，而在介绍这个模型之前，我们先需要了解它的“初级版本”——伊辛模型。

3　相变的基本模型——伊辛模型

伊辛模型(也叫楞次—伊辛模型)是统计物理中最重要的模型之一，最初由德国物理学家威廉·楞次为研究铁磁相变而引入(1920年)。体系的构成十分简单，即由 N 个位于格点上的自旋 s_i 周期性排列而成。自旋的方向可以为向上或向下，分别用 $s_i=+1$、$s_i=-1$ 来表示。任意两个相邻的自旋 s_i、s_j 之间有相互作用 $-J_{ij}s_is_j$，其中 $J_{ij}=J$ 为常数(一般取 J=1，代表铁磁相互作用)。在没有外磁场的情况下(本文不讨论存在外场的情况)，体系的哈密顿量为

$$H=-\sum_{\langle ij\rangle}J_{ij}s_is_j\ , \tag{1}$$

其中 $\langle ij\rangle$ 表示对所有近邻的自旋对求和。伊辛模型可存在两种不同的相，一个是无序的顺磁相($m=0$)，另一个则是有序的铁磁相($m>0$ 或 $m<0$)，由序参量磁化强度

$$m=\frac{1}{N}\left\langle\sum_{i=1}^{N}s_i\right\rangle \tag{2}$$

表征，其中〈 〉代表热力学系综平均。物理学家最感兴趣的问题是，从(1)式的哈密顿量出发，统计物理理论能否给出顺磁与铁磁之间的相变(即 m 从0变到有限值)？

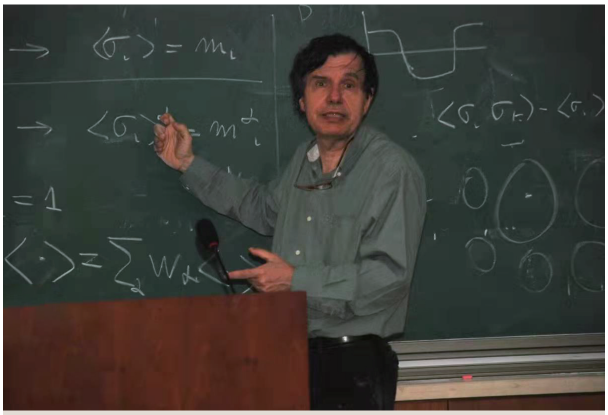

图4　2008年，帕里西在中国科学院理论物理研究所讲课

早在1925年，楞次的学生恩斯特·伊辛就得到了一维伊辛模型的严格解。他发现，一维伊辛模型不会发生相变——在任意温度下，一维伊辛模型的稳态都是顺磁态。不过，伊辛把这个结论做了错误的推广，认为在其他维度下，这个模型也没有相变。直到1944年，拉斯·昂萨格(1968年诺贝尔化学奖得主)发表了二维伊辛模型的解析解[2]，严格证明了二维伊辛模型在有限温度下存在二级相变，这也使得二维伊辛模型成为第一个在有限温度下呈现连续相变的模型。1952年，李政道和杨振宁(1957年诺贝尔物理学奖得主)提出了李杨相变理论[3, 4]，尝试从数学上解释伊辛模型在热力学极限下(无穷大体系)存在相变的原因。然而，尽管无数伟大的物理学家做了不懈的尝试，目前为止，三维伊辛模型还无法严格求解。

4　自旋玻璃模型

自旋玻璃模型与伊辛模型只有一个很“微小”的不同：(1)式中自旋 s_i、s_j 间的相互作用 J_{ij} 为随机数(通常为高斯分布或二项式分布)。这个模型是由Edwards和Anderson二人于1975年引入的，因此被称为Edwards—Anderson模型(简称EA模型)[5]。同年，Sherrington和Kirkpatrick二人引入了EA模型的平均场形式，也就是将非近邻自旋间的相互作用也考虑在内，即(1)式中的 $\langle ij\rangle$ 包括所有自旋对，且 J_{ij} 满足高斯分布，$P(J_{ij})=$

$\frac{1}{J}\sqrt{\frac{N}{2\pi}}\exp\left[-\frac{N}{2J^2}\left(J_{ij}-\frac{J_0}{N}\right)^2\right]$，其中 J_0/N 和 J^2/N 分别为 $P(J_{ij})$ 的平均值和方差。这个模型被称为Sherrington—Kirkpatrick模型(简称SK模型)[6]。本文只讨论平均场自旋玻璃理论，即SK模型的解。

有意思的是，哈密顿量中看起来微小的变化，就导致自旋玻璃模型与伊辛模型的低温物理性质发生了巨大的改变。在零温条件下($T=0$ K)，对于伊辛模型而言，如果所有自旋的方向全部相同，那么体系的哈密顿量取得最小值，体系处于铁磁相。不过，对于自旋玻璃而言，自旋对间相互作用的随机性使得体系的能量最小值并不容易寻找。不妨看一个简单的例子。图5(b)展示了一个由2×2个自旋构成的二维自旋玻璃模型，其中自旋间的相互作用 J_{ij} 有正值(设为1)也有负值(设为−1)。可以看到，无论四个自旋怎么取，都无法满足使所有相互作用 $-J_{ij}s_is_j$ 都为最小值−1，这与图5(a)中展示的伊辛模型的情形显然不同。这种现象被称为“阻挫”。可以想象，随着体系的增大，图5(b)中类似的阻挫也会迅速增加。事实上，从计算复杂度理论的角度来看，求解自旋玻璃基态(能量最低)是一个NP完备问题。这意味着，随着 N 的增大，即使对于最好的算法来说，寻找所有基态所花的时间也会指数级 $\exp(cN)$ 增长，其中 c 为常数。

5 自旋玻璃相变、复本交叠序参量与复本对称性破缺

由于阻挫的存在，自旋玻璃模型在低温下的稳定构型看起来是无序的(自旋指向随机)。然而

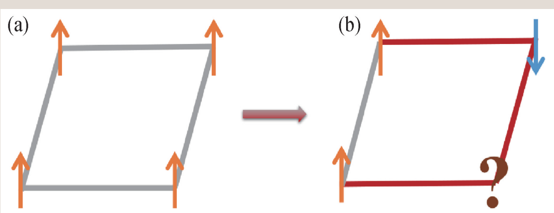

图5 阻挫现象 (a)伊辛模型，无阻挫；(b)自旋玻璃模型，有阻挫

从动力学的角度来讲，几乎所有的自旋都是不动的，因而低温的自旋玻璃相(类比玻璃)与高温的顺磁相(类比液体)明显不同。从顺磁相到自旋玻璃相的过程看起来是一种无序到无序的相变，伊辛模型的序参量磁化强度(2)式不再有效，因为 m 在两相中都为零。那么，自旋玻璃相变到底对应了什么序参量的变化和哪种对称性破缺呢?

在统计物理框架下，计算体系的热力学性质一般要从自由能出发。由于无序相互作用的存在，自旋玻璃的自由能需要对满足给定随机分布的所有 $\{J_{ij}\}$ 作平均(称为淬火平均，用方括号[ ]表示)：

$$[F]=-k_BT[\log Z] \quad , \tag{3}$$

其中，k_B 是玻尔兹曼常数，Z 是配分函数。淬火平均的自由能(3)式一般情况下无法直接求得。为此，Edwards和Anderson二人巧妙地提出了“复本技巧”[5]：

$$[\log Z]=\lim_{n\to 0}\frac{[Z^n]-1}{n} \quad , \tag{4}$$

将 $[\log Z]$ 转化为可计算的 $[Z^n]$。物理上，相当于构造原系统的 n 个复本(n 为正整数)，再计算这 n 个复本的总配分函数 Z^n 及其无序平均值，最后外推至 $n\to 0$ 的情形。

复本构造使得讨论无序自旋玻璃相的序参量和对称性重新成为可能。帕里西等提出了复本间的交叠序参量来表征自旋玻璃的相变[7, 8]，

$$q_{\alpha\beta}=\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left[m_i^\alpha m_i^\beta\right] \quad , \tag{5}$$

其中，$m_i^\alpha=\langle s_i^\alpha\rangle$，代表复本 α 中第 i 个自旋的局域磁化强度。尽管自旋玻璃相的宏观磁化强度为零，复本交叠序参量可以不为零。

基于复本交叠序参量(5)式我们可以讨论复本对称性。由于复本代表了相空间(体系所有可能状态的集合)的取样，所以复本对称性实际上表征了相空间的对称性，而不是真实空间的对称性。最初，Edwards和Anderson假设了自旋玻璃相中复本对称[5]，即 $q_{\alpha\beta}$ 的值不依赖于复本 α、β 的选择，称为Edwards—Anderson序参量 $q_{\alpha\beta}=q$。

基于复本对称假设的计算给出了非常有趣的

结果：存在一个临界温度 T_c，在这个温度之上 q 为零，之下则大于零。因而 T_c 代表了自旋玻璃的相变温度；该相变对应的序参量为复本交叠序参量——朗道理论的普适性再次被验证。

复本对称理论虽然可以预测自旋玻璃相变的产生，但是也存在着问题。该理论得到的零温熵 $S(0)=-1/2\pi\approx-0.16$，而按照熵的微观定义，离散变量物理体系的熵不可能为负值，这就是所谓的“负熵灾难”。另外，de Almeida 和 Thouless 发现复本对称解在自旋玻璃相中并不稳定(自由能函数展开式的二阶项前的系数矩阵不正定)[9]。由此，他们找到了复本对称解稳定区间的边界，称为 AT 线。在 AT 线之下，复本对称性破缺！

基于以上结果，可得到平均场自旋玻璃模型的相图(图 6)。在顺磁相中，$m=q=0$；铁磁相中 $m\neq0$，$q>0$。顺磁相和铁磁相中复本对称，自旋玻璃相中复本对称破缺。最后剩下的问题是，自旋玻璃相中复本对称性是如何破缺的？或者说，自旋玻璃相的真正稳定解是怎样的？最终，帕里西找到了答案。

6 无序中的对称性——平均场自旋玻璃模型的帕里西解

既然自旋玻璃相中复本对称性破缺，不妨先假设一种简单的破缺方式：一阶(K=1)复本对称破缺。在该假设下，整个相空间分裂成多个子空间(称为“纯态”)。在子空间内部，复本在任意重排下对称，即只要复本 α、β 属于同一纯态，那么不论它们如何取值，$q_{\alpha\beta}=q_1$。另外，纯态也在任意重排下对称，即只要复本 α、β 属于不同纯态，那么不论它们如何取值，$q_{\alpha\beta}=q_0$(图 7)。可见，一阶复本对称破缺在承认复本对称破缺的前提下，保留了最高的对称性。帕里西计算了一阶复本理论的零温熵，发现 $S(0)$ 从 -0.16 增加到了 -0.01，另外，自旋玻璃相的自由能虽然还是不稳定的，但是更接近稳定(自由能函数展开二阶系数矩阵的本征值虽然仍有负值，但更接近零)。自然地，沿着这一思路，可以进一步考察二阶(K=2)、

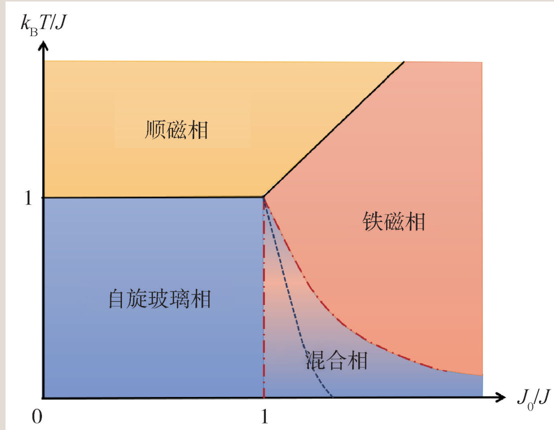

图 6 平均场自旋玻璃模型(SK 模型)相图(其中混合相同时具有自发磁化和复本对称破缺)

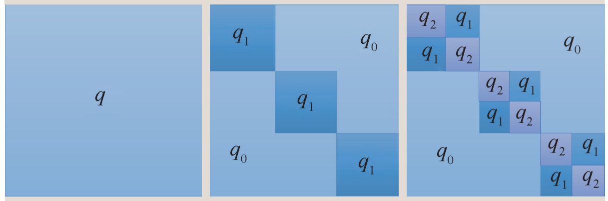

图 7 复本交叠矩阵。从左到右分别为复本对称、一阶复本对称破缺、二阶复本对称破缺

表 1 不同阶复本对称破缺理论得到的零温熵 $S(0)$[7, 8, 10]

K	$S(0)$
0	−0.16
1	−0.01
2	−0.004
∞	0

三阶(K=3)……复本对称破缺(图 7)。帕里西的计算表明，随着破缺阶数的增加，$S(0)$ 逐渐趋向于零(表 1)。

这些尝试让帕里西推测，只有无穷阶($K\to\infty$)复本对称破缺(称为全阶复本对称破缺)才会给出自旋玻璃相的真正严格解。全复本对称破缺的理论确实得到了零温下的熵 $S(0)=0$，而且通过对自由能函数展开分析表明，全复本对称破缺解在低温下是稳定的[7, 8]。另外，全复本对称破缺理论的结果与 SK 模型的模拟结果也很好地吻合。几十年后，帕里西解被数学上严格证明[11]。

帕里西对全阶复本对称破缺的设计在 $K\to\infty$ 的情况下保留了最高的对称性。自旋玻璃的相空间分裂成无穷级，每一级都由多个子空间构成，

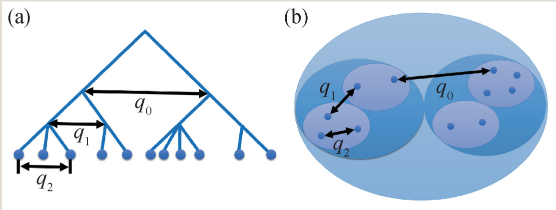

图8　(a)分形的树结构；(b)相空间的超度量性

同一子空间内复本对称(如果复本 α 、β 属于 k 级的同一子空间，则不论 α 、β 如何取，$q_{\alpha\beta}=q_k$)，而子空间之间也具有重排不变性(如果复本 α 、β 属于 k 级不同子空间，则不论 α 、β 如何取，$q_{\alpha\beta}=q_{k-1}$)。这种分裂可以按照分形(自相似)的形式一直进行下去，直到最小的子空间(纯态)。纯态的 $q_{\alpha\beta}$ 回归到Edwards—Anderson序参量 q_{EA} 。

帕里西解数学上十分优美，具有分形特征和超度量性。如图8(a)所示，复本(微观态)以分形树的形式组织。分形树具有自相似的特点：该树的每一分枝都与原树相似，而每一分枝又由相似的子分枝组成。图8(b)则展示了超度量性。如果取出其中任意三个复本，它们两两组合将会得到三个交叠量 q_a 、 q_b 、 q_c 。这三个值之间的关系只有两种可能性：要么 $q_a=q_b=q_c$ ，组成等边三角形；要么 $q_a>q_b=q_c$ ，组成等腰三角形。超度量空间的这种关系对应了普通度量空间的三角不等式，并给出了超度量空间中距离的定义。有意思的是，在普通度量空间中，对于一个行走者来说，即使步长很小，只要坚持不懈地走，总可以走到远方。而在超度量空间中，只要步长是一定的，那么不管走了多久，终点与起点的距离都是一样的(图8(b)中，在任意子空间中任取两点，代表起始态和终态，它们的距离一样)。在超度量空间中，布朗运动(随机行走)并不各态历经。

帕里西的理论对于无序复杂系统的研究产生了深远的影响，已被广泛地应用在各类问题中[7，12—14]，包括玻璃化转变、阻塞相变、进化动力学、优化问题、神经网络、人工智能模型等。

7　结语

顾名思义，“无序”体系看起来杂乱无章。帕里西解的精美结构，并不存在于真实世界的空间中，而在物理学家构建的抽象空间(相空间)中。诗人顾城曾说：“黑夜给了我黑色的眼睛，我却用它寻找光明。”如果说，寻找无序体系中的规律，像在黑夜中探索，那么帕里西的理论，就像是普罗米修斯的火种，带来了最初的光明。

参考文献

[1] Landau L D. Zh. Eksp. Teor. Fiz.，1937，7：19
[2] Onsager L. Physical Review，1944，65(3-4)：117
[3] Yang C N，Lee T D. Physical Review，1952，87(3)：404
[4] Lee T D，Yang C N. Physical Review，1952，87(3)：410
[5] Edwards S F，Anderson P W. Journal of Physics F：Metal Physics，1975，5(5)：965
[6] Sherrington D，Kirkpatrick S. Physical Review Letters，1975，35(26)：1792
[7] Mézard M，Parisi G，Virasoro M A. Spin Glass Theory and Beyond：An Introduction to the Replica Method and Its Applications. World Scientific Publishing Company，1987
[8] Parisi G. Physical Review Letters，1979，43(23)：1754
[9] de Almeida J R L，Thouless D J. Journal of Physics A：Mathematical and General，1978，11(5)：983
[10] Parisi G. Journal of Physics A：Mathematical and General，1980，13(4)：L115
[11] Talagrand M. Ann. Math.，2006，163：221
[12] Parisi G，Urbani P，Zamponi F. Theory of Simple Glasses：Exact Solutions in Infinite Dimensions. Cambridge University Press，2020
[13] Nishimori H. Statistical Physics of Spin Glasses and Information Processing：an Introduction (International Series of Monographs on Physics，111). Clarendon Press，2001
[14] 周海军. 自旋玻璃与消息传递. 北京：科学出版社，2015