円卓モデル（または Ising model）のまとめ (2009/6/13)

記号などがややこしいので、まとめておく（けっこう長くなった）。時間発展のことは書かず、定常分布だけに話を絞る。

状態　テーブルに並んだ人（あるいは、一列に並んだスピン）を $x = 1, 2, \ldots, N$ と番号づける。N と 1 は隣り合っているとする。

各々の人（スピン）は二つの状態をとる。これを状態変数 $\sigma_x = \pm 1$ で表現する。全ての人の状態をずらりと並べたものを

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N) \tag{1}$$

と書こう。

全ての $\boldsymbol{\sigma}$ の集合を $\mathcal{S}$ と書く。たとえば、$N = 3$ のときの $\mathcal{S}$ を根性で書けば、

$$\mathcal{S} = \{(1,1,1),(1,1,-1),(1,-1,1),(-1,1,1),(-1-1,1),(-1,1,-1),(1,-1,-1),(-1,-1,-1)\} \tag{2}$$

となる。一般に $\mathcal{S}$ の要素は 2^N 個ある。

定常分布　講義で定義した「両隣の人をみて、そろえようとする」時間発展の結果として得られる定常分布を $\boldsymbol{p}^{(\mathrm{s})} = (p^{(\mathrm{s})}_{\boldsymbol{\sigma}})_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}}$ とする。

具体的には、任意の $\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}$ が実現する確率は、

$$p^{(\mathrm{s})}_{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{Z(\kappa, h)} \exp\left[\frac{\kappa}{2}\sum_{x=1}^{N}\sigma_x\sigma_{x+1} + h\sum_{x=1}^{N}\sigma_x\right] \tag{3}$$

であり（σ_{N+1} がでてきたら σ_1 と解釈する）、

$$Z(\kappa, h) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \exp\left[\frac{\kappa}{2}\sum_{x=1}^{N}\sigma_x\sigma_{x+1} + h\sum_{x=1}^{N}\sigma_x\right] \tag{4}$$

は規格化因子である[1]。(4) での和は 2^N 通りの状態すべてについとる。$\kappa \geq 0$ と $h \in \mathbb{R}$ はモデルを特徴づけるパラメターである。

ちょっと抽象的過ぎるので、具体的にみてみよう。また $N = 3$ とする。(3), (4) の指数関数の中身は、ベタに書けば、

$$\frac{\kappa}{2}(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_1) + h(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3) \tag{5}$$

[1]統計力学では「分配関数」と呼ばれる。

ということ。ここに、たとえば $\boldsymbol{\sigma} = (1,1,1)$ を代入すれば $3\kappa/2+3h$ という値が得られ、$\boldsymbol{\sigma} = (1,-1,-1)$ を代入すれば $-\kappa/2-h$ という値が得られる。同様に計算して、規格化因子 (4) を求めれば、

$$Z(\kappa,h) = e^{3\kappa/2+3h} + 3e^{-\kappa/2+h} + 3e^{-\kappa/2-h} + e^{3\kappa/2-3h} \tag{6}$$

となる。そして、上で見た状態が出現する確率は、それぞれ、$p^{(\mathrm{s})}_{(1,1,1)} = e^{3\kappa/2+3h}/Z(\kappa,h)$, $p^{(\mathrm{s})}_{(1,-1,-1)} = e^{-\kappa/2-h}/Z(\kappa,h)$ ということになる。このように N が小さいときでも相当にややこしい式が出てきて、これを見ていても、何がどうなっているのかよく分からない。まして、N を大きくしたときの挙動を知るのは簡単ではない。

「磁化」に関する不等式　対称性の破れ具合を示す量を

$$m_N(\kappa,h) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \sigma_1\, p^{(\mathrm{s})}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \sigma_1 \exp[(\kappa/2)\sum \sigma_x\sigma_{x+1} + h\sum \sigma_x]}{Z(\kappa,h)} \tag{7}$$

と定義する（Ising model では磁化と呼ばれる量）。これは定常分布における σ_1 の期待値だが、別に $x=1$ が特別なのではなく、任意の x について σ_x の期待値を取っても全く同じ値になる。つまり、

$$m_N(\kappa,h) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \sigma_x\, p^{(\mathrm{s})}(\boldsymbol{\sigma}) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \left(\frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N}\sigma_x\right) p^{(\mathrm{s})}(\boldsymbol{\sigma}) \tag{8}$$

である。

　さて、対称性を使えば $m_N(\kappa,0)=0$ となること、そして、

$$\lim_{h\to 0} m_N(\kappa,h) = 0 \tag{9}$$

となることは、すぐにわかる。問題は、先に系のサイズを無限にする極限をとった、

$$\lim_{h\to 0}\lim_{N\nearrow\infty} m_N(\kappa,h) \tag{10}$$

が、どうふるまうかである（この次に扱うモデルでは、まさにこの量がゼロでなくなって、対称性の自発的破れを示す）。

　これを調べるために、任意の N と任意の $h\ge 0$ について、

$$0 \le m_N(\kappa,h) \le e^{\kappa}\tanh h \tag{11}$$

が成り立つことをこれから示す（tanh の定義は (17) を見よ）。全ての状態変数を反転する変換をつかえば、$m_N(\kappa,-h) = -m_N(\kappa,h)$ が言えるから（そして、$\tanh(-h) = \tanh h$ だから）、$h\le 0$ については、

$$0 \le -m_N(\kappa,h) \le -e^{\kappa}\tanh h \tag{12}$$

である。よって、任意の $h \in \mathbb{R}$ について、

$$|m_N(\kappa, h)| \le e^{\kappa} \, |\tanh h| \tag{13}$$

となる。これより、任意の $\kappa \ge 0$ について、

$$\lim_{h \to 0} \lim_{N \nearrow \infty} m_N(\kappa, h) = 0 \tag{14}$$

がいえる。つまり、この系は、対称性の自発的破れを示さない。

正確な値　ちなみに（ここでの議論には不要なのだが)、$m_N(\kappa, h)$ を正確に計算することもできる[2]。特に N が大きい極限では簡単な形になり、

$$\lim_{N \nearrow \infty} m_N(\kappa, h) = \frac{\sinh h}{\sqrt{(\sinh h)^2 + e^{-2\kappa}}} \tag{15}$$

である。不等式 (11) の上界と正確な表式 (15) は h の一次では完全に一致することに注意しよう。

ただし、(15) のように正確な表式が求められるのは系が一次元であることを特殊性である。一方、これから紹介する上界の導出は、そのまま高次元の問題にも拡張できる（そして、κ が十分に小さいときには対称性の自発的破れがないことを証明できる)。

(11) の証明：証明は少し面倒だが、無限自由度がからみあって相互作用する系について厳密な評価をしようというのだから、多少のことは仕方がない。

まず、任意の $\alpha \in \mathbb{R}$ と $\sigma = \pm 1$ について、

$$e^{\alpha\sigma} = e^{\alpha} \frac{1+\sigma}{2} + e^{-\alpha} \frac{1-\sigma}{2} = \frac{e^{\alpha} + e^{-\alpha}}{2} \left(1 + \frac{e^{\alpha} - e^{-\alpha}}{e^{\alpha} + e^{-\alpha}} \sigma \right) = (\cosh\alpha) \, \{1 + (\tanh\alpha)\, \sigma\} \tag{16}$$

となることに注意する。ここで、

$$\cosh\alpha := \frac{e^{\alpha} + e^{-\alpha}}{2}, \quad \sinh\alpha := \frac{e^{\alpha} - e^{-\alpha}}{2}, \quad \tanh\alpha := \frac{\sinh\alpha}{\cosh\alpha} = \frac{e^{\alpha} - e^{-\alpha}}{e^{\alpha} + e^{-\alpha}} \tag{17}$$

によって、ハイパボリックコサイン、ハイパボリックサイン、ハイパボリックタンジェントを定義した。

(16) を利用して、(3), (4) に登場する指数関数の部分を次のように変形する。

$$\begin{aligned} \exp\left[\frac{\kappa}{2} \sum_{x=1}^{N} \sigma_x \sigma_{x+1} + h \sum_{x=1}^{N} \sigma_x \right] &= \prod_{x=1}^{N} \exp[\frac{\kappa}{2} \sigma_x \sigma_{x+1}] \prod_{x=1}^{N} \exp[h\sigma_x] \\ &= \{\cosh \frac{\kappa}{2} \, \cosh h\}^N \prod_{x=1}^{N} \{1 + \tau \sigma_x \sigma_{x+1}\} \prod_{x=1}^{N} \{1 + \eta \sigma_x\} \end{aligned} \tag{18}$$

[2] これはほとんどの統計力学の教科書に書いてある。たとえば、田崎「統計力学 II」（培風館）の 11 章を見よ（と宣伝)。

ここで、

$$\tau = \tanh \frac{\kappa}{2}, \quad \eta = \tanh h \tag{19}$$

とした。さて、ここで (4) の和をとるのだが、前の係数が邪魔なので、

$$\tilde{Z} := \{\cosh \frac{\kappa}{2}\, \cosh h\}^{-N} Z(\kappa, h) = \sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \left(\prod_{x=1}^{N} \{1 + \tau\sigma_x\sigma_{x+1}\} \prod_{x=1}^{N} \{1 + \eta\sigma_x\} \right) \tag{20}$$

という量を考えよう。まず、丸括弧の中の量をひたすら展開する。$\{1 + \tau\sigma_x\sigma_{x+1}\}$ については、1 をとるか $\tau\sigma_x\sigma_{x+1}$ をとるか、$\{1 + \eta\sigma_x\}$ については、1 をとるか $\eta\sigma_x$ をとるかで、全部で 2^{2N} 通りの項の和に展開できる。雰囲気がわかるように一部だけを書くと、

$$\tilde{Z} = \sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \bigl(1 + \tau\sigma_1\sigma_2 + h\sigma_1 + \cdots + \tau h\sigma_1\sigma_2\sigma_2 + \tau h^2\sigma_1\sigma_2\sigma_1\sigma_2 + \cdots + \tau^2 h\sigma_3\sigma_4\sigma_6\sigma_7\sigma_9 + \cdots\bigr) \tag{21}$$

という具合。展開して得られる項は、一般に $\tau^L\, h^M\, \prod_{x=1}^{N}(\sigma_x)^{n_x}$ という形をしている（L, M, $n_1, \ldots, n_N$ は非負の整数）。ここで、和の順番を交換し、展開した項の各々について、全ての $\boldsymbol{\sigma}$ についての和を実行することを考えよう。すると、

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \left(\tau^L\, h^M \prod_{x=1}^{N} (\sigma_x)^{n_x} \right) &= \sum_{\sigma_1=\pm1} \sum_{\sigma_2=\pm1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm1} \left(\tau^L\, h^M \prod_{x=1}^{N} (\sigma_x)^{n_x} \right) \\ &= \tau^L\, h^M \left(\sum_{\sigma_1=\pm1} (\sigma_1)^{n_1} \right) \left(\sum_{\sigma_2=\pm1} (\sigma_2)^{n_2} \right) \cdots \left(\sum_{\sigma_N=\pm1} (\sigma_N)^{n_N} \right)\end{aligned} \tag{22}$$

のように、各々の σ_x についての和を別個にとればいいことがわかる。各々の和の計算は（異常に）簡単で

$$\sum_{\sigma=\pm1} \sigma^n = (1)^n + (-1)^n = \begin{cases} 2 & n\,\text{が偶数} \\ 0 & n\,\text{が奇数} \end{cases} \tag{23}$$

となる。これをかけ合わせるのだから、(22) の結果は、

$$\sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}} \left(\tau^L\, h^M \prod_{x=1}^{N} (\sigma_x)^{n_x} \right) = \begin{cases} \tau^L\, h^M\, 2^N & n_1, n_2, \ldots, n_N\,\text{がすべて偶数} \\ 0 & n_1, n_2, \ldots, n_N\,\text{の中に一つでも奇数がある} \end{cases} \tag{24}$$

とまとめられる。

さて、これを利用すれば、(20) の和をまったく異なった形で表現できる。ともかく結果を書いてしまうと、

$$\tilde{Z} = 2^N \sum_{\substack{G\subset\{(1,2),(2,3),\ldots,(N,1)\} \\ H\subset\{1,2,\ldots,N\} \\ (\text{ただし}\ \partial G = H)}} \tau^{|G|}\, \eta^{|H|} \tag{25}$$

である。もちろん、これでは訳がわからないので説明しよう。

G は、全ての隣りあう点のペアの集合 $\{(1,2),(2,3),(3,4),\ldots,(N-1,N),(N,1)\}$ の任意の部分集合で、$|G|$ はその要素の数を表わす。これは、$\prod_{x=1}^{N}\{1+\tau\sigma_x\sigma_{x+1}\}$ を展開したときに、1 ではないほうの項を拾ってきたペア $(x,x+1)$ を列挙したものと思えばいい。さて、G が一つ与えられたとき、点 x が G の中に何回現れているかを調べる。この回数は、0 回、1 回、2 回のいずれかである。∂G とは、G の中にちょうど 1 回だけ現れるような x 全ての集合である（∂G には「G の境界」という意味があるが、それは絵を描くとわかる）。

H は、$\{1,2,\ldots,N\}$ の任意の部分集合で、$|H|$ はその要素の数。これは、$\prod_{x=1}^{N}\{1+\eta\sigma_x\}$ を展開したときに、1 ではないほうの項を拾ってきた x を列挙したものである。

ここで少し考えれば、$\partial G=H$ という条件が、(24) の和がゼロでない条件そのものだということがわかるはずだ。(25) のように、状態変数（場の自由度）についての和を、様々な図形についての和に書き直せたのは興味深い。現代の理論物理学（とくに、場の理論や統計力学）では、このような「図形の足しあげ」を用いた表現が強力な武器として頻繁に使われる。

さて、そろそろ忘れかけているかもしれないが、われわれの目標は (7) の期待値を評価することだった。ここでも、(20) のように、(7) の分子を $\{\cosh\frac{\kappa}{2}\,\cosh h\}^N$ で割った量を考えると、

$$\begin{aligned}\tilde{X} &:= \{\cosh\frac{\kappa}{2}\,\cosh h\}^{-N}\sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}}\sigma_1\exp\left[\frac{\kappa}{2}\sum_{x=1}^{N}\sigma_x\sigma_{x+1}+h\sum_{x=1}^{N}\sigma_x\right]\\ &=\sum_{\boldsymbol{\sigma}\in\mathcal{S}}\left(\sigma_1\prod_{x=1}^{N}\{1+\tau\sigma_x\sigma_{x+1}\}\prod_{x=1}^{N}\{1+\eta\sigma_x\}\right)\end{aligned}\tag{26}$$

と書ける。前と同じように、後ろの積を展開し、$\boldsymbol{\sigma}$ についての和を先にとる。話はほとんど同じだが、もともと σ_1 が一ついるから、$x=1$ については偶奇の条件が変わってくる。そこを落ち着いて処理すると、

$$\tilde{X}=2^N\,\eta\sum_{\substack{G\subset\{(1,2),(2,3),\ldots,(N,1)\}\\ H\subset\{2,3\ldots,N\}\\ (\text{ただし }\partial G=H)}}\tau^{|G|}\,\eta^{|H|}+2^N\sum_{\substack{G\subset\{(1,2),(2,3),\ldots,(N,1)\}\\ H\subset\{2,3,\ldots,N\}\\ (\text{ただし }\partial G=H\cup\{1\})}}\tau^{|G|}\,\eta^{|H|}\tag{27}$$

とまとめられる（図を描いたほうがいい。講義では描きます）。右辺の一つ目は、余分な σ_1 を $(1+\eta\sigma_1)$ の σ_1 を使って打ち消した場合。右辺の二つ目では、G の中に、1 を端にもつような線分が含まれている。

さて、われわれは $\kappa\ge 0$, $h\ge 0$ の状況を扱っていたから、$\tau\ge 0$, $\eta\ge 0$ である。すると、(27) の和の各項はすべて非負であることがわかる。もとになる (26) は、正の量と負の量の和だったことを思い出すと、これは面白い。

こうして、$\tilde{X}\ge 0$ が示された。(7), (20), (26) を見比べれば、

$$m_N(\kappa,h)=\frac{\tilde{X}}{\tilde{Z}}\tag{28}$$

である。もちろん $\tilde{Z} \ge 0$ だから（これは、もとの定義から明らか）、これで $m_N(\kappa, h) \ge 0$ が示された。

次に $m_N(\kappa, h)$ の上界を示そう。(27) の右辺を $\tilde{X}_1 + \tilde{X}_2$ と書く。まず、$\tilde{X}_1$ については、

$$\tilde{X}_1 = 2^N \eta \sum_{\substack{G \subset \{(1,2),(2,3),\ldots,(N,1)\} \\ H \subset \{2,3\ldots,N\} \\ (\text{ただし } \partial G = H)}} \tau^{|G|} \eta^{|H|} \le 2^N \eta \sum_{\substack{G \subset \{(1,2),(2,3),\ldots,(N,1)\} \\ H \subset \{1,2,\ldots,N\} \\ (\text{ただし } \partial G = H)}} \tau^{|G|} \eta^{|H|} = \eta \tilde{Z} \tag{29}$$

がいえる。ここで、H はもともと $\{2, 3, \ldots, N\}$ の部分集合だったのを、範囲を広げて $\{1, 2, \ldots, N\}$ の部分集合とした。範囲を広げることで余分な非負の項がつけくわわるので、上のような不等式になる。

$\tilde{X}_2$ も同様の思想で上から押さえるのだが、もう少し工夫がいる。まず、$\tilde{X}_2$ に寄与する G は、かならず 1 を端にもつ線分を一つ含んでいる。この線分は、$y \ne 1$ によって、$\{(1,2), (2,3), \ldots, (y-1, y)\}$、あるいは、$\{(y, y+1), (y+1, y+2), \ldots, (N-1, N), (N, 1)\}$ と書ける。この線分のところを分けて和を書き直すと、

$$\begin{aligned}
\tilde{X}_2 &= 2^N \sum_{\substack{G \subset \{(1,2),(2,3),\ldots,(N,1)\} \\ H \subset \{2,3,\ldots,N\} \\ (\text{ただし } \partial G = H \cup \{1\})}} \tau^{|G|} \eta^{|H|} \\
&= \sum_{y=2}^{N} \Biggl\{ \tau^{y-1} \eta \, 2^N \sum_{\substack{G \subset \{(y+1,y+2),\ldots,(N-1,N)\} \\ H \subset \{2,3,\ldots,N\} \\ (\text{ただし } \partial G = H)}} \tau^{|G|} \eta^{|H|} + \tau^{N+1-y} \eta \, 2^N \sum_{\substack{G \subset \{(2,3),\ldots,(y-2,y-1)\} \\ H \subset \{2,3,\ldots,N\} \\ (\text{ただし } \partial G = H)}} \tau^{|G|} \eta^{|H|} \Biggr\} \\
&\le \sum_{y=2}^{N} (\tau^{y-1} + \tau^{N+1-y}) \eta \tilde{Z} \le \left(2 \sum_{k=1}^{\infty} \tau^k \right) \eta \tilde{Z} = \frac{2\tau}{1-\tau} \eta \tilde{Z}
\end{aligned} \tag{30}$$

と評価できる。ここでも、和に余分な物を足すと $\tilde{Z}$ になることを使った。

(29) と (30) をあわせれば、

$$\tilde{X} \le \frac{1+\tau}{1-\tau} \eta \tilde{Z} = e^{\kappa} \eta \tilde{Z} \tag{31}$$

となる。(28) に注意すれば、目標だった (11) がいえた。

レポート問題（その 5）　ここでは、上と同じ系で $h = 0$ とした状況だけを扱う。まず、上と同じ展開の方法を用いて、$Z(\kappa, 0)$ を求めよ。次に、$y \ne z$ について $\sigma_y \sigma_z$ の期待値（これを「σ_y と σ_z の相関関数」と呼ぶことがある）

$$\langle \sigma_y \sigma_z \rangle := \sum_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}} \sigma_y \sigma_z \, p^{(\mathrm{s})}(\boldsymbol{\sigma}) = \frac{\sum_{\boldsymbol{\sigma} \in \mathcal{S}} \sigma_y \sigma_z \exp\bigl[(\kappa/2) \sum \sigma_x \sigma_{x+1}\bigr]}{Z(\kappa, 0)} \tag{32}$$

を求めよ。これをもとに、定常状態において $\sigma_y = \sigma_z$ となる確率を求めよ。

最後の部分へのヒント：$p^{(\mathrm{s})}(\boldsymbol{\sigma})$ で σ_y, σ_z だけを残して、他の全ての変数を ±1 について足しあげたものを $p_{y,z}(\sigma_y, \sigma_z)$ と書く。すると、

$$\langle \sigma_y \sigma_z \rangle = p_{y,z}(1,1) - p_{y,z}(-1,1) - p_{y,z}(1,-1) + p_{y,z}(-1,-1) \tag{33}$$

である（なぜか？）。求める確率は $p_{y,z}(\sigma_y, \sigma_z)$ を使ってどう書けるか？