統計物理学 II　課題レポート

05-242628 三田村彰大

January 13, 2026

Contents

大問 1

(a)

今、$x > 0$ に対し $\ln x \leq x - 1$ であるから、これを変形して以下を得る。

$$\ln x \geq 1 - \frac{1}{x} \tag{1}$$

これを用いれば KL 情報量は次のように変形することが可能である。

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}\left(P||Q\right) &\coloneqq \sum_{S\in\Omega} P\left(S\right)\ln\frac{P\left(S\right)}{Q\left(S\right)} &(2)\\ &\geq \sum_{S\in\Omega} P\left(S\right)\left(1 - \frac{Q\left(S\right)}{P\left(S\right)}\right) &(3)\\ &= \sum_{S\in\Omega} P\left(S\right) - \sum_{S\in\Omega} Q\left(S\right) &(4)\\ &= 1 - 1 &(5)\\ &= 0 &(6) \end{aligned}$$

よって $D_{\mathrm{KL}}\left(P||Q\right) \geq 0$ は示される。

※$P\left(S\right) > 0 \Rightarrow Q\left(S\right) > 0$ であるから（3）の log が発散することはない。
※（1）の等号は $x = 1$ のみで成立するから、これが（3）において $P\left(S\right)/Q\left(S\right) = 1$ の形で効いてくることを考えると等号成立条件は以下となる。

$$D_{\mathrm{KL}}\left(P||Q\right) = 0 \quad iff: \forall_{S:P(S)>0}\ P\left(S\right) = Q\left(S\right) \tag{7}$$

すなわち支持上で確率が一致するとき $D_{\mathrm{KL}}\left(P||Q\right) = 0$ となるのであり、これは KL 情報量が二つの確率分布の「距離のようなもの」を表していることを考えれば当然である。

(b)

具体的に Tr を計算すれば (a) に帰着できる*1。そのためにまず、KL 情報量を次のように二項に分けて計算する。

$$\begin{aligned} D_{\mathrm{KL}}\left(\rho||\sigma\right) &\coloneqq \mathrm{Tr}\left[\rho\left(\ln\rho - \ln\sigma\right)\right] &(8)\\ &= \mathrm{Tr}\left[\rho\ln\rho\right] - \mathrm{Tr}\left[\rho\ln\sigma\right] &(9) \end{aligned}$$

*1 計算については [1] を参考にした。（大問 1 をそのまんま解説しているような資料。ついうっかり見つけてしまった…）

まず（9）第一項について計算する。ρ の固有値を p_i、ユニタリな固有ベクトルを $|i\rangle$ と書くと、（9）第一項は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\left[\rho\ln\rho\right] &= \sum_i \langle i|\,\rho\ln\rho\,|i\rangle &(10)\\
&= \sum_i \langle i|\left(\sum_j p_j\,|j\rangle\langle j|\right)\left(\sum_k \ln p_k\,|k\rangle\langle k|\right)|i\rangle &(11)\\
&= \sum_{i,j,k} p_j\ln p_k\,\delta_{ij}\delta_{jk}\delta_{ki} &(12)\\
&= \sum_i p_i\ln p_i &(13)
\end{aligned}$$

次に、(9) 第二項を計算するために σ の固有値を $q_{i'}$、固有ベクトルを $|i'\rangle$ と書く。これを用いれば、(9) 第二項は次のようになる。

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\left[\rho\ln\sigma\right] &= \sum_i \langle i|\,\rho\ln\sigma\,|i\rangle &(14)\\
&= \sum_i \langle i|\left(\sum_j p_j\,|j\rangle\langle j|\right)\left(\sum_{k'} \ln q_{k'}\,|k'\rangle\langle k'|\right)|i\rangle &(15)
\end{aligned}$$

ただし $\sum_i$ が ρ の固有状態についての和であるのに対し、$\sum_{k'}$ のように $'$ がついたものは σ の固有状態についての和を表すものとする。

ここで、σ の固有ベクトルを ρ の固有関数系によって展開した際の係数を与えるユニタリ行列を $U=\{u\}_{ij}$ とする。すなわち $|i'\rangle=\sum_j u_{i'j}\,|j\rangle$ である。よって（15）は引き続き次のように計算される。

$$\begin{aligned}
(15) &= \sum_i \langle i|\left(\sum_j p_j\,|j\rangle\langle j|\right)\left(\sum_{k'} \ln q_{k'}\sum_m u^*_{k'm}\,|m\rangle\sum_n u_{k'n}\,\langle n|\right)|i\rangle &(16)\\
&= \sum_{i,j,k',m,n} p_j\ln q_{k'}\; u^*_{k'm}u_{k'n}\delta_{ij}\delta_{jm}\delta_{ni} &(17)\\
&= \sum_{i,k'} p_i|u_{k'i}|^2\ln q_{k'} &(18)\\
&= \sum_{i,j'} p_i a_{ij'}\ln q_{j'} &(19)
\end{aligned}$$

ただし途中で $|u_{k'i}|^2 =: a_{ik'}$ と置いている。またみやすさのため $k'\to j'$ と置き直している。この時 U はユニタリであったからその行・列ベクトルは正規化されているはずなので、$\sum_i a_{ij'}=\sum_{j'} a_{ij'}=1$ となる。

この時 (13) から (19) を引いたものが KL 情報量であるが、余計な項 $a_{ij'}$ さえ入っていなければ (a) の確率分布の場合の KL 情報量と同じ形になることがわかる。よってこの $a_{ij'}$ を吸収するために次のような量を導入する。

$$P_{ij'} = p_i a_{ij'}\ ,\ Q_{ij'} = q_{j'} a_{ij'} \tag{20}$$

この時、次が成立する。(証明は Appendix を参照。)

$$\sum_{i,j'} P_{ij'} = \sum_{i,j'} Q_{ij'} = 1\ ,\ \forall_{ij'};\ P_{ij'}>0 \Rightarrow Q_{ij'}>0 \tag{21}$$

さらに、$\sum_i a_{ij'} = \sum_{j'} a_{ij'} = 1$ から下が従う。

$$\sum_{i,j'} P_{ij'} \ln P_{ij'} \;=\; \sum_i p_i \ln p_i + \sum_{i,j'} p_i a_{ij'} \ln a_{ij'} \tag{22}$$

$$\sum_{i,j'} P_{ij'} \ln Q_{ij'} \;=\; \sum_{i,j'} p_i a_{ij'} \ln q_{j'} + \sum_{i,j'} p_i a_{ij'} \ln a_{ij'} \tag{23}$$

よってこれを用いれば、(13) − (19) で表される KL 情報量は次のようになる。

$$D_{\mathrm{KL}}(\rho||\sigma) = \mathrm{Tr}[\rho \ln \rho] - \mathrm{Tr}[\rho \ln \sigma] \tag{24}$$

$$= \sum_i p_i \ln p_i - \sum_{i,j'} p_i a_{ij'} \ln q_{j'} \tag{25}$$

$$= \sum_{i,j'} P_{ij'} \ln P_{ij'} - \sum_{i,j'} P_{ij'} \ln Q_{ij'} \tag{26}$$

$$= \sum_{i,j'} P_{ij'} \ln \frac{P_{ij'}}{Q_{ij'}} \tag{27}$$

この時（21）に述べた通り、$P_{ij'}, Q_{ij'}$ は総和が 1 となることや台の広さについての条件 $P > 0 \Rightarrow Q > 0$ を満たしている。このことから、$P_{ij'}, Q_{ij'}$ は $\{i, j'\}$ を状態と考えた時の確率分布と考えてよく、（27）は $P_{ij'}, Q_{ij'}$ はこれらの確率分布に対する KL 情報量であるから結局小問 (a) の議論に帰着される。よって

$$D_{\mathrm{KL}}(\rho||\sigma) \;=\; \sum_{i,j'} P_{ij'} \ln \frac{P_{ij'}}{Q_{ij'}} \;\geq\; 0 \tag{28}$$

となる。

(c)

$F_{\mathrm{v}} - F$ が KL 情報量に帰着することを示せばいい。まず一般に、$F_{\mathrm{v}} - F$ を次のように変形する。

$$F_{\mathrm{v}} - F = F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 - F \tag{29}$$

$$= F_0 - F + \langle H \rangle_0 - \langle H_0 \rangle_0 \tag{30}$$

$$= -\frac{1}{\beta} \ln Z_0 + \frac{1}{\beta} \ln Z + \langle H \rangle_0 - \langle H_0 \rangle_0 \tag{31}$$

$$= \frac{1}{\beta} \Big(\langle -\ln Z_0 \rangle_0 - \langle -\ln Z \rangle_0 - \langle -\beta H \rangle_0 + \langle -\beta H_0 \rangle_0 \Big) \tag{32}$$

$$= \frac{1}{\beta} \left\langle \left(\ln e^{-\beta H_0} - \ln Z_0 \right) - \left(\ln e^{-\beta H} - \ln Z \right) \right\rangle_0 \tag{33}$$

$$= \frac{1}{\beta} \left\langle \ln \frac{e^{-\beta H_0}}{Z_0} - \ln \frac{e^{-\beta H}}{Z} \right\rangle_0 \tag{34}$$

※ ただし（34）で $\ln e^{-\beta H_0} - \ln Z_0 = \ln\left(e^{-\beta H_0}/Z_0\right)$ と変形しているが、一般に量子系で $\ln A - \ln B = \ln(A/B)$ は成立しない。今回は Z_0, Z スカラーであるためにこの操作が量子の場合でも保証されている。

特に古典統計においては物理量 A に対して H_0 による熱平均は次のように計算される。

$$\langle A \rangle_0 = \sum_{S \in \Omega} P_0(S) A \tag{35}$$

ただし $P_0(S)$ は H_0 による分布で状態 S が実現される確率である。また $P_0(S)$ と、それから H による分布で状態 S が実現される確率 $P(S)$ はそれぞれ $P_0(S) = e^{-\beta H_0(S)}/Z_0$、$P(S) = e^{-\beta H(S)}/Z$ となる。よって古典統計では次を得る。

$$(34) = \frac{1}{\beta} \sum_{S \in \Omega} \left[P_0(S) \Big(\ln P_0(S) - \ln P(S) \Big) \right] \tag{36}$$

$$= \frac{1}{\beta} \sum_{S \in \Omega} P_0(S) \ln \frac{P_0(S)}{P(S)} \tag{37}$$

以上より、次を得る。

$$F_{\mathrm{v}} - F \;=\; \frac{1}{\beta}\, D_{\mathrm{KL}}\left(P_0 || P\right) \tag{38}$$

よって $D_{\mathrm{KL}}(P_0||P) \geq 0$ であるから $F_{\mathrm{v}} \geq F$ となり、古典統計における GBF 不等式が従う。

次に量子統計の場合について考える。この場合、物理量 A に対して H_0 による熱平均は次のように計算される。

$$\langle A \rangle_0 = \mathrm{Tr}\left(\rho_0 A\right) \tag{39}$$

ただし ρ_0 は H_0 より定まる密度行列である。また、ρ_0 と、それから H により定まる密度行列 ρ はそれぞれ $\rho_0 = e^{-\beta H_0}/Z_0$、$\rho = e^{-\beta H}/Z$ となる。よって量子統計では次を得る。

$$(34) = \frac{1}{\beta}\, \mathrm{Tr} \left[\rho_0 \left(\ln \rho_0 - \ln \rho \right) \right] \tag{40}$$

よって量子統計においても KL 情報量を用いて $F_{\mathrm{v}} - F$ を表すことができて、次を得る。

$$F_{\mathrm{v}} - F \;=\; \frac{1}{\beta}\, D_{\mathrm{KL}}\left(\rho_0 || \rho\right) \tag{41}$$

よってやはり $D_{\mathrm{KL}}(\rho_0||\rho) \geq 0$ であるから $F_{\mathrm{v}} \geq F$ となり、量子統計においても GBF 不等式が従う。

(d)

参照しやすいようにハミルトニアンを書き下しておく。

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i \tag{42}$$

$$H_0 = -\Lambda \sum_i S_i \tag{43}$$

(d-1)

$m=\langle S_i\rangle_0$ は次のように計算される。

$$
\begin{aligned}
\langle S_i\rangle_0 &= \frac{1}{Z_0}\sum_{\{S\}} S_i e^{-\beta H_0(S)} &(44)\\
&= \frac{1}{Z_0}\sum_{\{S\}} S_i e^{\beta\Lambda\sum_{j=1}^{N} S_j} &(45)\\
&= \frac{1}{Z_0}\sum_{\{S\}} S_i \prod_{j=1}^{N} e^{\beta\Lambda S_j} &(46)
\end{aligned}
$$

さらに、(46) の総和・総乗から S_i だけを取り出すと、次のように計算できる。

$$
\begin{aligned}
(46) &= \frac{1}{Z_0}\sum_{\{S/S_i\}}\sum_{S_i=\pm 1} S_i\cdot e^{\beta\Lambda S_i}\prod_{j\neq i} e^{\beta\Lambda S_j} &(47)\\
&= \frac{1}{Z_0}\sum_{S_i=\pm 1} S_i e^{\beta\Lambda S_i}\left(\sum_{\{S/S_i\}}\prod_{j\neq i} e^{\beta\Lambda S_j}\right) &(48)\\
&= \frac{1}{Z_0}\sum_{S_i=\pm 1} S_i e^{\beta\Lambda S_i}\left(\prod_{j\neq i}\sum_{S_j=\pm 1} e^{\beta\Lambda S_j}\right) &(49)\\
&= \frac{1}{Z_0}\sum_{S_i=\pm 1} S_i e^{\beta\Lambda S_i}\left(2\cosh\beta\Lambda\right)^{N-1} &(50)\\
&= \frac{1}{Z_0} 2\sinh\beta\Lambda\left(2\cosh\beta\Lambda\right)^{N-1} &(51)
\end{aligned}
$$

さらに、Z_0 については

$$
Z_0=\sum_{\{S\}} e^{-\beta H_0(S)}=\sum_{\{S\}}\prod_{j=1}^{N} e^{\beta\Lambda S_j}=\prod_{j=1}^{N}\sum_{S_j=\pm 1} e^{\beta\Lambda S_j}=\left(2\cosh\beta\Lambda\right)^{N} \tag{52}
$$

と計算できる。よって (51) に代入して、最終的に

$$
\langle S_i\rangle_0=\tanh\beta\Lambda \tag{53}
$$

を得る。

(d-2)

定義より、変分自由エネルギー密度 $f_{\mathrm{v}}(\Lambda)$ は次のようになる。

$$
\begin{aligned}
f_{\mathrm{v}} &= \frac{1}{N}\left(F_0+\langle H-H_0\rangle_0\right) &(54)\\
&= \frac{\langle H\rangle_0}{N}-\left(\frac{\langle H_0\rangle_0}{N}-\frac{F_0}{N}\right) &(55)
\end{aligned}
$$

よってそれぞれの項ごとに計算する。

まず $\langle H\rangle_0$ については次のように計算できる。

$$\langle H\rangle_0 = \sum_{\{S\}} \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0(S)} H(S) \tag{56}$$

$$= \frac{1}{Z_0} \sum_{\{S\}} e^{-\beta H_0(S)} \left(-J \sum_{\langle i,j\rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i \right) \tag{57}$$

$$= \frac{1}{Z_0} \sum_{\{S\}} e^{-\beta H_0(S)} \left(-J \sum_{\langle i,j\rangle} \langle S_i\rangle_0 \langle S_j\rangle_0 - B \sum_i \langle S_i\rangle_0 \right) \tag{58}$$

$$= \frac{1}{Z_0} \sum_{\{S\}} e^{-\beta H_0(S)} \left(-J \frac{Nz}{2} m^2 - BNm \right) \tag{59}$$

よって（59）の括弧の中身は定数であるから総和記号の外へと持ち出せて、結果的に Z_0 が打ち消し合うよって $1/N$ をかけて $\langle H\rangle_0/N$ を次のように得る。

$$\frac{\langle H\rangle_0}{N} = -\frac{zJ}{2} m^2 - Bm \tag{60}$$

次に $\langle H_0\rangle_0$ について計算すると次のようになる。

$$\langle H_0\rangle_0 = \sum_{\{S\}} \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0(S)} H_0(S) \tag{61}$$

$$= \frac{1}{Z_0} \sum_{\{S\}} e^{-\beta H_0(S)} \left(-\Lambda \sum_i \langle S_i\rangle_0 \right) \tag{62}$$

$$= \frac{1}{Z_0} \sum_{\{S\}} e^{-\beta H_0(S)} (-\Lambda N m) \tag{63}$$

よって同様に Z_0 が打ち消されるので $\langle H_0\rangle_0/N$ は次のようになる。

$$\frac{\langle H_0\rangle_0}{N} = -\Lambda m \tag{64}$$

特に今 $m = \tanh \beta\Lambda$ であるから逆関数を考えて $\beta\Lambda = \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m}$ となる。よってこれを（64）に代入して m による表式を得ることができる。

$$\frac{\langle H_0\rangle_0}{N} = -\frac{1}{\beta} \left(\frac{m}{2} \ln(1+m) - \frac{m}{2} \ln(1-m) \right) \tag{65}$$

次に $F_0 = -1/\beta \ln Z_0$ について計算することを考えるが、Z_0 は（52）で計算した通りであるのでこれはすぐに求まり、よって次を得る。

$$\frac{F_0}{N} = -\frac{1}{N\beta} \ln (2\cosh \beta\Lambda)^N = -\frac{1}{\beta} \ln (2\cosh \beta\Lambda) \tag{66}$$

特に今 $\cosh x = \left(1 - \tanh^2 x\right)^{-1/2}$ の関係があるから、

$$(66) = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ 2 \left(1 - \tanh^2 \beta\Lambda\right)^{-1/2} \right\} = -\frac{1}{\beta} \ln \left\{ 2 \left(1 - m^2\right)^{-1/2} \right\} \tag{67}$$

として m による表式を得ることができる。よってこれを整理すれば以下のようになる。

$$\frac{F_0}{N} = -\frac{1}{\beta}\left(\ln 2 - \frac{1}{2}\ln\left(1+m\right) - \frac{1}{2}\ln\left(1-m\right)\right) \tag{68}$$

よって（65）（68）から次を得る。

$$\frac{\langle H_0\rangle_0}{N} - \frac{F_0}{N} = -\frac{1}{\beta}\left(\frac{1+m}{2}\ln\frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2}\ln\frac{1-m}{2}\right) \tag{69}$$

特にこれを与えられた Shannon エントロピーと比べれば

$$\frac{\langle H_0\rangle_0}{N} - \frac{F_0}{N} = T\sigma\left(m\right) \tag{70}$$

を得る。

よって（60）（70）を（55）に代入して変分自由エネルギーが次のように求まる。

$$f_{\mathrm{v}} = -\frac{zJ}{2}m^2 - Bm - T\sigma\left(m\right) \tag{71}$$

(d-3)

$f_{\mathrm{v}}\left(m\right)$ を最小化する m を求める。すなわち、$\partial f_{\mathrm{v}}/\partial m = 0$ を解けば良い。よって今実際に（71）を m について偏微分すれば以下のよう。（ただし $\sigma\left(m\right)$ の微分については Appendix を参照。）

$$\frac{\partial f_{\mathrm{v}}}{\partial m} = -zJm - B + \frac{1}{\beta}\tanh^{-1} m \ = \ 0 \tag{72}$$

よってこれを整理して以下の自家無撞着方程式を得る。

$$m = \tanh\left(\beta\left(zJm + B\right)\right) \tag{73}$$

(d-4)

今回用いた変分法の平均場 Λ は「自由エネルギーに関して最もいい近似を与える」という意味を持ち、分子平均場に比べ近似の手法が明確である。また、近似は試行ハミルトニアン H_0 に依存するため、H_0 を変更することで近似の精度を自在に調整することが容易であるのも変分法の平均場近似の利点であると推察される。加えて、例えば外場が 0 の時の自己無撞着方程式を見ると m の解が複数存在することがわかるが、この時変分法の平均場であれば m は自由エネルギーを最小にするという要件が加わるので直ちに採用すべき解がわかる。以上が変分法による平均場近似の定式化のメリットに関する考察である。

大問 2

(a)

K' が満たす次の方程式について考える。

$$Ae^{K'\sigma_i\sigma_j} = \sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm} e^{K(\sigma_i\sigma_1+\sigma_i\sigma_2+\sigma_1\sigma_2+\sigma_j\sigma_1+\sigma_j\sigma_2)} \tag{74}$$

今右辺について総和を展開すると、下記を得る。(Appendix 参照。)

$$Ae^{K'\sigma_i\sigma_j} = e^K\left\{e^{2K(\sigma_i+\sigma_j)} + e^{-2K(\sigma_i+\sigma_j)}\right\} + 2e^{-K} \tag{75}$$

よって $\sigma_i = \sigma_j = +$ を代入すれば $Z_+ = Ae^{K'}$ についての式が得られ、同様に $\sigma_i = +$, $\sigma_j = -$ を代入すれば $Z_- = Ae^{-K'}$ についての式が得られる。よって次を得る。

$$Z_+ = Ae^{K'} = e^{5K} + 2e^{-K} + e^{-3K} \tag{76}$$
$$Z_- = Ae^{-K'} = 2e^K + 2e^{-K} \tag{77}$$

よってこれを用いれば $\tanh K$ が次のように求まる。

$$\tanh K' = \frac{e^{K'} - e^{-K'}}{e^{K'} + e^{-K'}} = \frac{Z_+ - Z_-}{Z_+ + Z_-} = \frac{e^{5K} - 2e^K + e^{-3K}}{e^{5K} + 2e^K + 4e^{-K} + e^{-3K}} \tag{78}$$

よって左辺は $t' = \tanh K'$ より t' についての式となっていて、右辺についても今 $t = \tanh K$ から $K = \operatorname{artanh} t = 1/2\ln(1+t/1-t)$ であるから K を t で置き換えることができるので、これにより $t' = f(t)$ という形の式が得られることになる。実際に (78) の K を t で置き換えると以下のような式を得ることができる。(計算は Appendix 参照。)

$$t' = \frac{2t^2}{t^3 + t^2 - t + 1} \tag{79}$$

これが求める繰り込み群方程式である。

(b)

固定点で $t = t' = t_0$ となるからこれを (79) に代入して固定点に関する次の方程式を得る。

$$t_0 = \frac{2t_0^2}{t_0^3 + t_0^2 - t_0 + 1} \tag{80}$$

この時 $t_0 = 0$ は自明な解である。よって $t_0 \neq 0$ と考え (80) を変形すると

$$(t_0 - 1)\left(t_0^2 + 2t_0 - 1\right) = 0 \tag{81}$$

を得る。よって $t_0 = 1$ も解となっていることに気づくが、これは $K \to \infty$ の解であるから自明な解である。よって $t_0 \neq 0, 1$ な解について考えると $t_0 = -1 \pm \sqrt{2}$ が解として現れ、特に今 $t = \tanh K \in (0,1)$ であるから $-1-\sqrt{2}$ は意味を持たず $t_0 = -1+\sqrt{2}$ が非自明な解として得られる。

また、それぞれの固定点の安定性については、$dt'/dt|_{t=t_0}$ を評価すればいい。すなわち $|dt'/dt|_{t=t_0}| < 1$ では安定

固定点、$|dt'/dt|_{t=t_0}| > 1$ では不安定な固定点であると考えられる。今実際（79）を用いて $dt'/dt|_{t=t_0}$ を求めると、

$$\left.\frac{dt'}{dt}\right|_{t=t_0} = -\frac{1}{2}\left(3t_0^2 + 2t_0 - 5\right) \qquad (\text{ただし } t_0 \neq 0\text{。} t_0 = 0 \text{ では } dt'/dt|_{t=t_0} = 0\text{。}) \tag{82}$$

のようになる。（計算は Appendix 参照。）よってそれぞれの固定点の安定度は次のようになる。

$$t_0 = 0 \quad \to \quad dt'/dt|_{t=t_0} = 0 \quad :\text{安定} \tag{83}$$

$$t_0 = 1 \quad \to \quad dt'/dt|_{t=t_0} = 0 \quad :\text{安定} \tag{84}$$

$$t_0 = -1 + \sqrt{2} \quad \to \quad dt'/dt|_{t=t_0} = 2\sqrt{2} - 1 \quad :\text{不安定} \tag{85}$$

よって確かに $t_0 = -1 + \sqrt{2}$ が臨界固定点であることがわかる。

(c)

繰り込み群方程式は $\delta t' = (dt'/dt)\,\delta t$ のように線形化されるから、(b) で求めた微分係数から非自明点近傍での線形化された t に関する繰り込み群方程式は

$$\delta t' = \left(2\sqrt{2} - 1\right)\delta t \tag{86}$$

となる。また今 $\lambda_t = dK'/dK|_{K=K_c}$ について、

$$\frac{dK'}{dK} = \frac{dK'}{dt'}\frac{dt'}{dt}\frac{dt}{dK} \tag{87}$$

であるが、

$$\frac{dK'}{dt'} = \frac{d}{dt'}\operatorname{artanh} t' = \frac{1}{1 - t'^2} \tag{88}$$

$$\frac{dt}{dK} = \frac{d}{dK}\tanh K = 1 - \tanh^2 K = 1 - t^2 \tag{89}$$

であるから固定点で $K = K_c$ となっている時 $t = t'$ であるから

$$\frac{dK'}{dt'}\frac{dt}{dK} = \frac{1}{1 - t'^2}\left(1 - t^2\right) = 1 \tag{90}$$

となる。よって（87）を見ると、$K = K_c$ で $dK'/dK = dt'/dt$ となることがわかる。よって

$$\lambda_t = \left.\frac{dK'}{dK}\right|_{K=K_c} = \left.\frac{dt'}{dt}\right|_{t=t_0} = 2\sqrt{2} - 1 \approx 1.828\ldots \tag{91}$$

となる。よって λ_t が求まれば順次 y_t、ν が求まり、

$$y_t \approx 0.871\ldots\,, \quad \nu \approx 1.15\ldots \tag{92}$$

を得る。また K_c の具体的な値については、

$$K_c = \operatorname{artanh} t_0 = \frac{1}{2}\ln\left.\frac{1 + t_0}{1 - t_0}\right|_{t_0 = -1+\sqrt{2}} = \frac{1}{2}\ln\left(1 + \sqrt{2}\right) \tag{93}$$

となるので $d=2$ 次元正方格子の厳密解と完全に一致していることがわかる。よって文献値からの誤差は次のよう。

	MK 階層格子	文献値	相対誤差
K_c	$\frac{1}{2}\ln\left(1+\sqrt{2}\right)$	$\frac{1}{2}\ln\left(1+\sqrt{2}\right)$	0%
ν	1.15	1	15%

Table1: MK 階層格子についての結果の文献値との比較

(d)

今 t' と t の関係が

$$t' = \tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right) \tag{94}$$

で与えられている。よってこの時

$$t_c - \tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t_c\right) = 0 \tag{95}$$

の解 t_c^{MK} を二分法などにより数値的に求めることができれば、$Kc^{\mathrm{MK}} = \operatorname{artanh} t_c^{\mathrm{MK}}$ として K_c を求めることができる。

また今回の問題設定でも引き続き $t=\tanh K$ は保たれているから $dK'/dK|_{K_c} = dt'/dt|_{t_c}$ が成立し、よって（91）同様に $\lambda_t = dK'/dK|_{K=K_c}$ について $\lambda_t = dt'/dt|_{t=t_c}$ によって求めることができる。今実際に t' の微分を計算すると次を得る。(計算は Appendix を参照)

$$\lambda_t = \left.\frac{dt'}{dt}\right|_{t=t_c} = \frac{2\cdot 2^{d-1}\sqrt{t_c}}{1+t_c} \tag{96}$$

よってこれによって λ_t^{MK} が求まれば y_t^{MK} や ν^{MK} も求まることになる。これを $d=3$ に対して行った結果が次のよう。

K_c^{MK}	0.0653
y_t^{MK}	0.939
ν^{MK}	1.065

Table2: d 次元超立方格子 Ising の MK 近似による結果

(e)

まず t_c^{MK} の存在領域について考える。今 $d=1$ とすると、(94) 式は $t'=t^2$ となり、t は区間 $(0,1)$ に解を持たない。よって $d>1$ の場合についての解の存在について考える。まず $t \ll 1$ の領域では（94）の右辺は

$$\tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right) \sim \left(2^{d-1}t\right)^2 < t \tag{97}$$

となっている。逆に $t\sim 1$ 近傍に着目し $t\approx 1-\varepsilon$ とおくと

$$\tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right) \;\sim\; \tanh^2\left(2^{d-1}\frac{1}{2}\ln\frac{2}{\varepsilon}\right) \tag{98}$$

$$\sim\; 1-4\exp\left\{-2\left(2^{d-1}\frac{1}{2}\ln\frac{2}{\varepsilon}\right)\right\} \;=\; 1-4\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^{2^{d-1}} \;>\; 1-\varepsilon \;=\; t \tag{99}$$

となる。(Appendix 参照。) よって $t-\tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right)$ は $t\in(0,1)$ の間で符号が入れ替わるので、間に解 t_c を持つことがわかる。

具体的に t_c^{MK} や y_t^{MK}、ν^{MK} の d 依存性を求める手法については、(d) で示した数値解析法を d を様々に変えながら行えば良い。よってその結果が以下の Figure1である。

まず特筆すべき事項として、t_c 及び K_c が d の増加とともに指数関数的に減衰していることである。今 $d\to\infty$ との整合性を考えると、d が大きくなるともに隣接サイト数が増え平均場がより良い近似を与えるようになるはずであるから、$K_c=\beta_c J,\beta_c h$ は平均場での臨界温度 $T_c=zJ/k_{\mathrm{B}}$ から導かれるような d 依存性を持つはずである。よって $z\sim d$ から $\beta_c\sim 1/d$ であるから、次のような d 依存性が予想される。

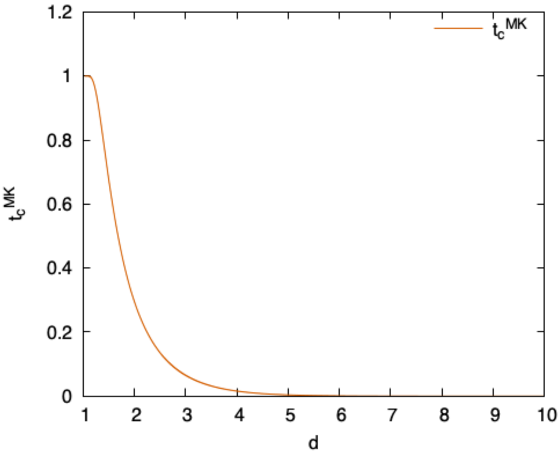
$$K_c\sim 1/d \quad \text{(推測。}d\text{ 大で平均場的?)} \tag{100}$$

しかし先にも述べたように K_c は実際には $K_c\sim e^{-d}$ のように指数的に減衰していることが Figure1dなどからもわかる。

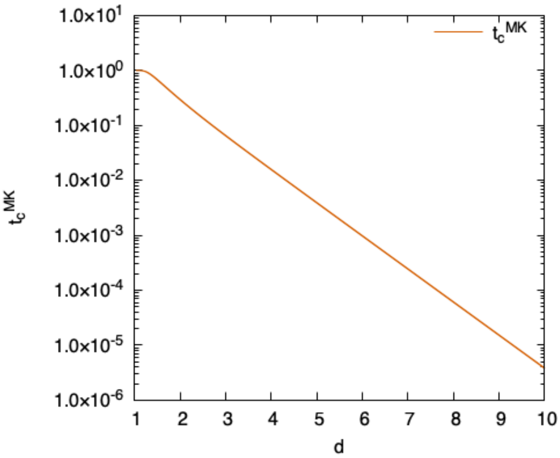
また $d\geq 4$ での振る舞いについて、例えば [3] などを参考にすると、$\nu=1/2$ となることが予想される。しかし Figure1fなどを見ると $d\to\infty$ で $\nu\to 1$ となっておりこの事実と整合しない。

よって MK モデルは固定点の存在を予言することはできるが、定量的な振る舞いを整合させることはできないということがわかった。

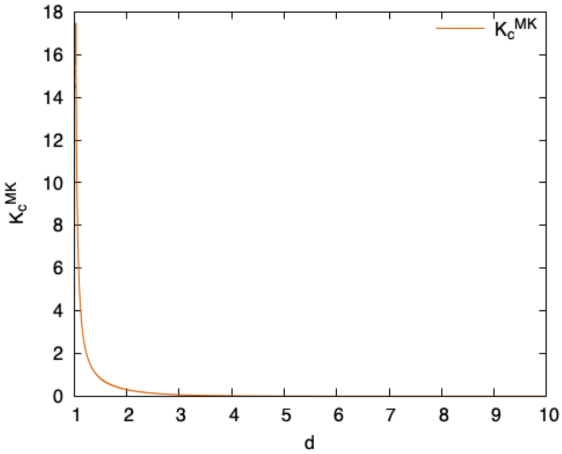
(a) t_c^{MK} の d 依存性



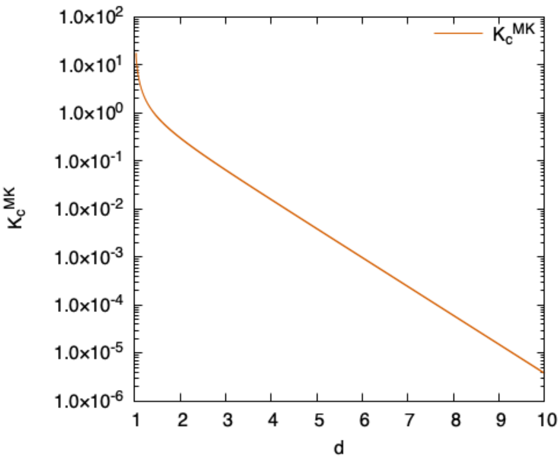
(b) t_c^{MK} の d 依存性（対数グラフ）



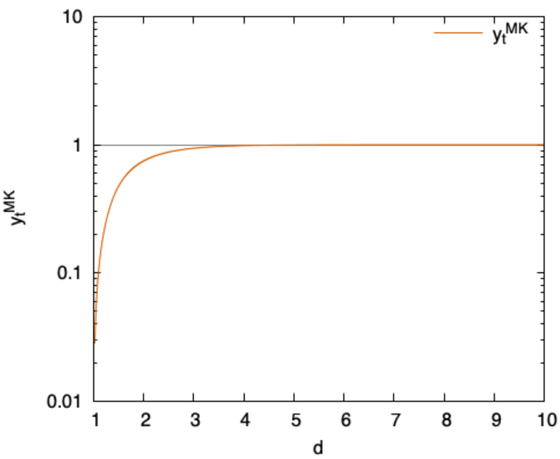
(c) K_c^{MK} の d 依存性



(d) K_c^{MK} の d 依存性 (対数グラフ)



(e) y_t^{MK} の d 依存性



(f) ν^{MK} の d 依存性（対数グラフ）

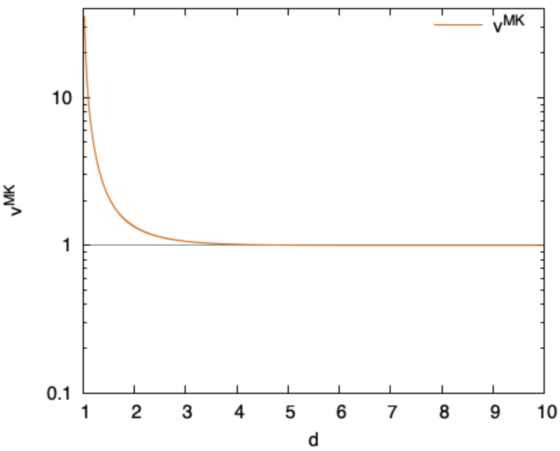


Figure1: d 次元立方格子 Ising 模型に対する MK 近似により得られた諸結果

References

[1] https://kawashima.issp.u-tokyo.ac.jp/wp/wp-content/uploads/2019/04/Lecture02-v04h.pdf

[2] https://www.adv-pip.yz.yamagata-u.ac.jp/~muneki/japanese/lecture/tohoku_univ/2012/Exp-D_StatPhys2012.pdf

[3] https://arxiv.org/pdf/1411.2754

Appendix

大問 1 (b) の補足

本文中の（21）を示す。まず、ρ, σ は密度行列であるからその固有値は確率に対応し、$\sum_i p_i = 1$, $\sum_{j'} q_{j'} = 1$ である。よって $\sum_{j'} a_{ij'} = 1$ を用いれば

$$\sum_{i,j'} P_{i,j'} = \sum_i \sum_{j'} p_i a_{ij'} = \sum_i p_i = 1 \tag{101}$$

のようにして $sum_{i,j'} P_{i,j'} = 1$ を得る。同様にして $sum_{i,j'} Q_{i,j'} = 1$ も示すことができる。

また $\forall_{ij'};\ P_{ij'} > 0 \Rightarrow Q_{ij'} > 0$ の条件については次のように示すないでとができる。まず、問題文の脚注にある条件を今回用いているノーテーションで書き換える。

$$q_{j'} = 0 \ \Rightarrow \ \langle j'|\, \rho \,|j'\rangle = 0 \tag{102}$$

この時右辺を ρ の固有ベクトルを用いた表現に書き換えれば、次のようになる。

$$\langle j'|\, \rho \,|j'\rangle = 0 \ \Leftrightarrow \ \sum_{i,k} u^*_{j'k} u_{j'i} \langle k|\, \rho \,|i\rangle = 0 \ \Leftrightarrow \ \sum_i p_i a_{ij'} = 0 \ \Leftrightarrow \ \sum_i P_{ij'} = 0 \tag{103}$$

よって $P_{ij'} > 0$ が成立するならば $q_{j'} > 0$ でなければならず、この時 $q_{j'} a_{ij'} = Q_{ij'} > 0$ が従う。よって、

$$P_{ij'} > 0 \Rightarrow Q_{ij'} > 0 \tag{104}$$

を得る。

大問 1 (d-3) の補足

$\sigma\,(m)$ の m による微分は次のよう。

$$\frac{d\sigma\,(m)}{dm} = -k_{\mathrm{B}} \left[\frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{2} + \frac{1+m}{2} \cdot \frac{2}{1+m} \cdot \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \ln \frac{1-m}{2} - \frac{1-m}{2} \cdot \frac{2}{1-m} \cdot \frac{1}{2} \right] \tag{105}$$

よってこれを整理して

$$\frac{d\sigma\,(m)}{dm} = -k_{\mathrm{B}} \cdot \frac{1}{2} \ln \frac{1+m}{1-m} = -k_{\mathrm{B}}\, \mathrm{artanh}\, m \tag{106}$$

となり、本文の（72）の式を得る。

大問２ (a) の補足

（75）を示す。今（74）の右辺は $\sigma_1, \sigma_2 = (\pm, \pm)$ の 4 通りに関しての総和となっているからこれを愚直に展開すれば、

$$\sum_{\sigma_1,\sigma_2=\pm} e^{K(\sigma_i\sigma_1+\sigma_i\sigma_2+\sigma_1\sigma_2+\sigma_j\sigma_1+\sigma_j\sigma_2)} \tag{107}$$

$$= e^{K(2\sigma_i+2\sigma_j+1)} + e^{K(-1)} + e^{K(-1)} + e^{K(-2\sigma_i-2\sigma_j-1)} \tag{108}$$

$$= e^{2K\left(\sigma_i+\sigma_j+\frac{1}{2}\right)} + e^{-2K\left(\sigma_i+\sigma_j-\frac{1}{2}\right)} + 2e^{-K} \tag{109}$$

$$= e^{K}\left\{e^{2K(\sigma_i+\sigma_j)} + e^{-2K(\sigma_i+\sigma_j)}\right\} + 2e^{-K} \tag{110}$$

として（75）を得る。

次に、（78）から繰り込み群方程式（79）を導出する。まず、$K = \operatorname{artanh} t$ より $e^{2K} = (1+t)/(1-t)$ であるから、（78）式を e^{2K} について整理する。これにより次を得る。

$$t' = \frac{e^{8K} - 2e^{4K} + 1}{e^{8K} + 2e^{4K} + 4e^{2K} + 1} = \frac{r^4 - 2r^2 + 1}{r^4 + 2r^2 + 4r + 1} \tag{111}$$

ただし $e^{2K} = r$ とおいた。今（111）最右辺は $(r+1)$ で割り切れるので、改めて

$$t' = \frac{r^3 - r^2 - r + 1}{r^3 - r^2 + 3r + 1} \tag{112}$$

よってここに $r = (1+t)/(1-t)$ を代入すると右辺の分子と分母は次のようになる。

$$(\text{分子}) = \left(\frac{1+t}{1-t}\right)^3 - \left(\frac{1+t}{1-t}\right)^2 + \left(\frac{1+t}{1-t}\right) + 1 \tag{113}$$

$$= \frac{1}{(1-t)^3}\left\{(1+t)^3 - (1+t)^2(1-t) - (1-t)(1-t)^2 + (1-t)^3\right\} \tag{114}$$

$$= \frac{8t^2}{(1-t)^3} \tag{115}$$

$$(\text{分母}) = \left(\frac{1+t}{1-t}\right)^3 - \left(\frac{1+t}{1-t}\right)^2 + 3\left(\frac{1+t}{1-t}\right) + 1 \tag{116}$$

$$= \frac{1}{(1-t)^3}\left\{(1+t)^3 - (1+t)^2(1-t) + 3(1+t)(1-t)^2 + (1-t)^3\right\} \tag{117}$$

$$= \frac{4\left(t^3 + t^2 - t + 1\right)}{(1-t)^3} \tag{118}$$

よって $t' = (\text{分子})/(\text{分母})$ から

$$t' = \frac{2t^2}{t^3 + t^2 - t + 1} \tag{119}$$

として繰り込み群方程式（79）を得る。

大問 2 (b) の補足

繰り込み群方程式（79）の固定点での微分を計算する。今改めて、繰り込み群方程式は次のよう。

$$t' = \frac{2t^2}{t^3+t^2-t+1} \tag{120}$$

よって固定点での微分は（$t_0 \neq 0$ であれば）以下のように計算できる。

$$\left.\frac{dt'}{dt}\right|_{t_0} = \left.\frac{4t}{t^3+t^2-t+1} - \frac{2t^2\left(3t^2+2t-1\right)}{\left(t^3+t^2-t+1\right)^2}\right|_{t=t_0} \tag{121}$$

特に、t_0 では（120）で $t=t'=t_0$ となることから $1/\left(t_0^3+t_0^2-t_0+1\right) = 1/2t_0$ のような関係が得られるのでこれを（121）に代入して整理することで

$$\left.\frac{dt'}{dt}\right|_{t=t_0} = -\frac{1}{2}\left(3t_0^2+2t_0-5\right) \tag{122}$$

を得る。

大問 2 (d) の補足

d 次元 Ising の MK 近似における繰り込み群固有値を与える計算についてここに記しておく。具体的に今 $\lambda_t = dK'/dK|_{K_c} = dt'/dt_{t_c}$ であり、$t' = \tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right)$ に対して微分は次のようになる。

$$\frac{dt'}{dt} = 2\tanh\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right)\left(1-\tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right)\right)\cdot 2^{d-1}\frac{1}{1-t^2} \tag{123}$$

よって $t=t_c$ で $t_c = \tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t_c\right)$ となるから固定点での微分が次のように求まる。

$$\left.\frac{dt'}{dt}\right|_{t=t_c} = 2\sqrt{t_c}\,(1-t_c)\cdot 2^{d-1}\frac{1}{1-t^2} = \frac{2\cdot 2^{d-1}\sqrt{t_c}}{1+t_c} \tag{124}$$

大問 2 (e) の補足

本文中で用いた $t \sim 1$ での $\tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right)$ の近似について説明する。まず $t = 1-\varepsilon$ とおくとき、

$$\operatorname{artanh} t = \frac{1}{2}\ln\frac{1+t}{1-t} = \frac{1}{2}\ln\frac{2-\varepsilon}{\varepsilon} \sim \frac{1}{2}\ln\frac{2}{\varepsilon} \tag{125}$$

と考えることができる。またこの時 $\operatorname{artanh} t \gg 1$ でもあり、今 $x \gg 1$ に対して

$$\tanh^2 x = 1 - \frac{1}{\cosh^2 x} = 1 - \left(\frac{2}{e^x+e^{-x}}\right)^2 \sim 1 - \left(\frac{2}{e^x}\right)^2 = 1 - 4e^{-2x} \tag{126}$$

と考えることができる。よって本文中で述べたような

$$\tanh^2\left(2^{d-1}\operatorname{artanh} t\right) \;\sim\; \tanh^2\left(2^{d-1}\frac{1}{2}\ln\frac{2}{\varepsilon}\right) \tag{127}$$

$$\sim\; 1 - 4\exp\left\{-2\left(2^{d-1}\frac{1}{2}\ln\frac{2}{\varepsilon}\right)\right\} \;=\; 1 - 4\left(\frac{\varepsilon}{2}\right)^{2^{d-1}} \tag{128}$$

というような近似に至る。

以上