

# 1P04 三次元イジングモデルの分配関数の候補として提出された積分表示式の数値計算

○村上 弘

首都大学東京 数理情報科学専攻 (〒192-0397 八王子市南大沢1-1)

## 【概要】

三次元 Ising モデルの分配関数の厳密解として鳴海等により解析的な三次元積分表示式が提出された。まずその被積分関数の積分領域内の特異点の位置を決定した。温度に依り特異点は二個、あるいは重なって一個、または存在しない。非積分関数が領域内部に特異性を持つ積分なので、まず被積分関数の周期性から元の積分領域をずらして領域を分割すると特異点は直方体領域の端点だけにあるようにできる。そこで各部分領域での積分の近似値を端点特異性に強い二重指数型数値積分公式を用いて計算したものを合計して全体の積分の近似値を求めた。物理的な量である内部エネルギーや比熱は、分配関数の温度パラメタについての一階、二階の導関数から導かれるが、それら是对応する積分表示式から直接的な数値積分で、あるいは数値積分の数値微分で求められる。

## 【はじめに】

論文 [1] により提案された三次元イジングモデルの分配関数の対数は  $\ln Z \approx \ln 2 + (1/2)I(K)$  である。但し、 $I(K) \equiv \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ln\{f(\phi)\} d\phi_1 d\phi_2 d\phi_3$ 。積分中の対数関数の引数  $f(\phi) = f(\phi_1, \phi_2, \phi_3)$  は  $f(\phi) = \prod_{i=1}^3 \cosh(2K_i) - \sum_{i=1}^3 \sinh(2K_i) \cos \phi_i + \prod_{i=1}^3 \sinh(2K_i) \cdot \cos(\sum_{i=1}^3 \phi_i)$  で、等方的な立方格子の場合には  $K=K_1=K_2=K_3$  で、 $f(\phi) = \cosh^3(2K) - \sinh(2K) \sum_{i=1}^3 \cos \phi_i + \sinh^3(2K) \cos(\sum_{i=1}^3 \phi_i)$  となる。物理的には  $K_i \equiv J_i/(k_B T)$  で ( $T$  は絶対温度,  $k_B$  はボルツマン定数), 等方的な問題では温度の単位をとりなせば  $K = 1/T$  にできる。  $f(\phi)$  は各積分変数  $\phi_1, \phi_2, \phi_3$  について周期  $2\pi$  の連続関数で、 $I(K)$  は各積分変数についての一周期分の定積分である。

定積分  $I(K)$  は、ある  $K$  の値に於いて関数  $f(\phi)$  が積分領域で正値なら、その  $K$  の近傍で解析的で、 $I(K)$  の  $m$  階の導関数値は  $(\frac{d}{dK})^m I(K) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{g(\phi)}{\{f(\phi)\}^m} d\phi_1 d\phi_2 d\phi_3$  となる。ここで  $g(\phi)$  は変数  $\phi$  と  $K$  について連続で、具体的な式を構成できる関数である。  $K = 0$  のときは  $f(\phi)$  は定数関数 1 であるから正値。そこで  $K$  の値を零から連続的に増加させて、 $f(\phi)$  の最小値が初めて零になるときの  $K$  の値を  $\hat{K}$  とする。そのような  $\hat{K}$  が存在すれば、 $I(K)$  の任意階の導関数値は  $K < \hat{K}$  では有限であるから、ある階数の導関数値が発散するならば、そのときは  $K \geq \hat{K}$  である。

注:  $K = \hat{K}$  のときに  $I(K)$  のある階数以下の導関数値が有限、あるいは任意階の導関数値が有限の可能性はある。また  $f(\phi)$  の最小値が負となるような  $K$  の値に対しては、積分  $I(K)$  に含まれる対数関数の引数は負になるので物理的な意味がつけ難い。まとめると、提案された分配関数  $Z$  の積分表示式が合理的なものであるためには、まず任意の  $K (> 0)$  に対して  $f(\phi)$  の最小値  $f_{\min}$  が非負であることが必要である。そうして  $f_{\min} > 0$  とするような  $K$  に於いては分配関数の任意階の導関数値が有限になるので相転移は起きない。つまり  $K$  に於いて分配関数のある階数の導関数値が発散していれば  $f_{\min} = 0$  である。そこで、まず  $f(\phi)$  の非負性を示して、最小値が零になる  $K$  の条件と零点の位置を決定する。

## 【 $f(\phi)$ の非負性と零点の決定】

関数  $f(\phi)$  が非負であることは厳密に示すことができる。その方針は、関数の最小値は極値でもあるから、積分変数についての偏導関数値をすべて零とおくと、 $\sin \phi_1 = \sin \phi_2 = \sin \phi_3 = \sinh^2(2K) \sin(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3)$  が得られる。さらにこの式の値を  $\sin \theta$  とおくと、 $\phi_k = \theta$  か  $\phi_k = \pi - \theta$  が  $k=1, 2, 3$  で成り立つのでそれを用いて場合分けをすると、 $f$  が最小となるのは  $\phi_1 = \phi_2 = \phi_3$  の場合に限り、さらに  $f$  の最小値が非負にな

ることが示せて、 $f$  の最小値が零となる必要十分条件を  $\theta$  を用いた式で表すことができる。  $f(\phi)$  が零点を持つ必要十分条件は  $\tanh(2K) \geq 1/2$ , つまり  $\hat{K} = (1/2) \operatorname{artanh}(1/2) = 0.27465$  である。三次元の積分領域を  $[-\pi, \pi]^3$  とするとき、積分領域内の  $f$  の零点は、  $K < \hat{K}$  のときには存在せず、  $K = \hat{K}$  のときには原点だけであり、  $K > \hat{K}$  のときには  $(\theta, \theta, \theta)$  と  $(-\theta, -\theta, -\theta)$  の二個である。ただし  $\theta = \arccos\{\frac{1}{2\tanh(2K)}\}$  である。

結局  $K < \hat{K} = 0.27465$  の範囲には  $I(K)$  の特異性がない（臨界点はない）ことが示せたが、この結果はこれまでの（文献 [2] などにある）「繰り込み群モンテカルロ法」による相転移温度  $T_c = 4.51154$  4, つまり  $K_c = 1/T_c = 0.22165$  36 と比べると値が約 1.24 倍も異なる。その理由は今のところ不明である。

### 【数値積分による「提案式」からの比熱等の計算】

上述の非積分関数の特異点の位置に対する知識から、被積分関数  $(\frac{d}{dK})^m \ln f(\phi)$  の各積分変数に対する周期性を用いて、積分領域をずらすあるいはずらしてから分割して積分を求めると、直方体状の積分領域の角点だけに特異性を持つ積分の計算に帰着できる。具体的には  $K \leq \hat{K}$  の場合は積分領域  $[-\pi, \pi]^3$  を  $[0, 2\pi]^3$  と変更して数値積分を行う。また  $K > \hat{K}$  の場合は  $\theta = \arccos\{\frac{1}{2\tanh(2K)}\}$  とすると、積分領域  $[-\pi, \pi]^3$  における特異点は  $(\theta, \theta, \theta)$  と  $(-\theta, -\theta, -\theta)$  だけにあるから、各変数について長さ  $2\pi$  の積分区間  $[-\pi, \pi]$  を、周期性を用いてずらして、二つの区間  $[-\theta, \theta]$  と  $[\theta, 2\pi - \theta]$  に分割する。すると全体で 8 個の直方体領域が生じる（実際には積分変数に対する対称性を用いると、独立に求めなければならない部分領域の数値積分は 8 個から 4 個に減らすことができる）。直方体領域の角点だけに特異性を持つ被積分関数の数値積分は、端点特異性に強い「高橋と森による二重指数型数値積分公式」の三次元直積版で計算した。

以下に数値積分で求めた  $\ln Z(K)$  の二階導関数値の横軸を逆温度  $K = 1/T$  にとったグラフ（図 1）とそれから導かれる比熱  $C = K^2(d/dK)^2 \ln Z(K)$  を温度  $T = 1/K$  を横軸にとってプロットしたグラフ（図 2）を示す。図 1 のグラフで  $K = \hat{K}$  における  $\ln Z(K)$  の二階の導関数値のピークが有界であるのかあるいは弱い対数的な発散をしているのかを決定することは数値積分の結果からだけでは困難である。

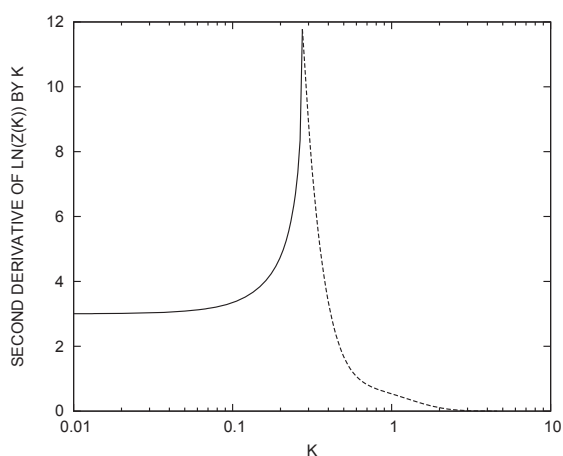


図 1: 逆温度  $K = 1/T$  に対する  $\ln Z(K)$  の二階微分値（鳴海の提案式からの数値積分結果）

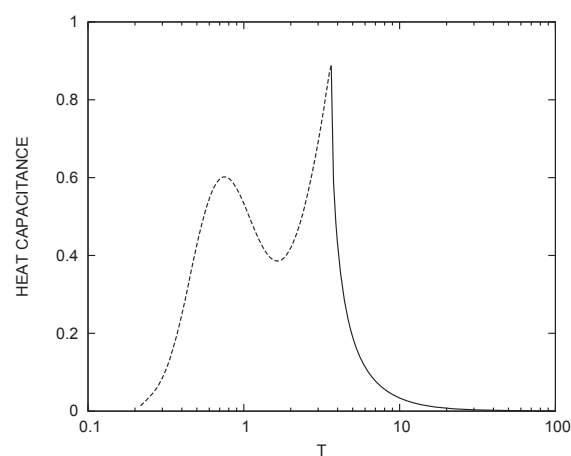


図 2: 温度  $T = 1/K$  に対する熱容量  $C = K^2(d/dK)^2 \ln Z(K)$  の値（鳴海の提案式からの数値積分結果）

## 参 考 文 献

- [1] 鳴海 英之, 細矢 治夫, 境界条件を伴う 3 次元イジングモデルの解, (A Solution of 3d-Ising Model with Boundary Conditions) *J. Comput. Chem. Jpn.*, Vol.13, No.6, (2014) pp.295–296.
- [2] Z.Y. Xie, J. Chen, M.P. Qin, J.W. Zhu, L.P. Yang and T. Xiang, “Coarse-graining renormalization by higher-order singular value decomposition”, *Phys. Rev. B* **86**, (30th July 2012) 045139.