Onsager 論文の Dual Transformation について

2017.6.10　　鈴木　実

1　はじめに

Onsager の 2 次元イジングモデルの厳密解に関する論文 [1] の中に (p. 123)，Dual Transformation （双対変換）という節がある．この節は説明が不足している（と思われる）ため，かなりわかりにくい（と思う）．そこで，以下では，不足している部分を補足して何が dual transformation であるのか説明してみよう．

2　演算子の自己同型置換

Onsager の論文 [1] では，1，s_j，C_j，s_jC_j という四元数演算子が現れる．さらに，分配関数は

$$A = \sum_{i=1}^{n} s_i s_{i+1} \tag{1}$$

$$B = \sum_{i=1}^{n} C_i \tag{2}$$

と定義される演算子 A と B を用い，さらにこれから，

$$V_1 = (2\sinh 2H)^{n/2} \exp(H^* B) \tag{3}$$

$$V_2 = \exp(H' A) \tag{4}$$

とする V_1，V_2 を用いて表される

$$V = V_1 V_2 \tag{5}$$

の固有値から求めることができる．ただし，式 (3) で H^* は Krammers-Wannier による H の * 変換である[1]．つまり，系の分配関数は Tr V^n で与えられるから，V の固有値の n 乗の和である．したがって，V の固有値を知ることが重要である．

Onsager は V_1 と V_2 には

$$s_1 s_2, s_2 s_3, \ldots, s_n s_1; \quad C_1, C_2, \ldots, C_n \tag{9}$$

という演算子が用いられ，その間には

$$s_1 s_2 s_2 s_3 \ldots s_n s_1 = s_1^2 s_2^2 \ldots s_n^2 = 1 \tag{10}$$

$$C_1 C_2 \ldots C_n = C = 1 \tag{11}$$

という条件と次の演算子の列における隣同士の反交換関係があり，それ以外は可換という関係が存在する．

$$s_n s_1,\ C_1,\ s_1 s_2,\ C_2,\ \ldots,\ s_{n-1} s_n,\ C_n,\ (s_n s_1,\ \ldots) \tag{12}$$

[1] * 変換は，一見，複素共役と思い違いしやすいので注意を要する．* 変換は次のように定義される．

$$H^* = \tanh^{-1}(\mathrm{e}^{-2H}) \tag{6}$$

なお，この式で H について解くと，

$$H = \tanh^{-1}(\mathrm{e}^{-2H^*}) \tag{7}$$

となる．これから

$$H^{**} = (H^*)^* = H \tag{8}$$

という関係が導ける．

さらに，$s_{n+j} = s_j$，$C_{n+j} = C_j$ という周期的条件が満たされる．

さて，V は式 (12) の n 対の演算子で表現される．この n 対の演算子は線形独立である．(式 (7), (8) を考慮すると，そのうち $n-1$ 対の演算子が線形独立である．) 演算子は添字の n を法として周期的であるから，式 (12) の順番を変えないように演算子を置換すると，この 1 組の演算子を用いた式の演算は変わらない．ただし，V が同一になるとは必ずしもいえない．これを Onsager は，このような演算子の置換は自己同型 (automorphism) であると表現している．

この部分は少しわかりにくいと思われる．わかりやすい例として，3 次元デカルト座標の変換を挙げることができるかもしれない．例えば，$x \to y$, $y \to z$, $z \to x$, と座標変換すれば，x，y，z の関数やベクトルの和や差，ベクトル積やスカラー積などの演算の仕方は変わらない．このような座標変換によって，x，y，z の関数の対称関数やベクトル積やスカラー積は不変である．しかし，一般には対称でない関数はこのような座標変換で関数は変化する．たとえば，通常のベクトルを考えると，座標変換によりベクトルの方向が変化する．座標変換と座標を用いた関数の間にはそういう関係がある．あるいは逆に，ある関数が座標変換による変化の有無を見ることによりその関数の対称性というものが判断できる，ということもできる．

式 (12) の順番を維持すればどの演算子から始めても自己同型変換が可能である．(つまり，変換の offset を任意にとることができる．) さらに，方向を逆にしてもよい．したがって，次のような [原論文の式 (36)] 演算子の置換をしても自己同型であり，演算子相互の演算の内容は変わらない．

$$s_j s_{j+1} \to C_{k\pm j}, \quad C_j \to s_{k\pm(j-1)} s_{k\pm j} \tag{O-36}$$

式 (12) の演算子を円周に等間隔で配置すれば，式 (O-36) の置換は後に述べられている回転群の dihedral symmetry (rotation-reflection symmetry 回映) と見ることができる．

実際に，自己同型となる演算子の置換を V に当てはめると，実は 2 種類の変化しか生じない．すなわち，変化がない場合（もともとの関数と同じ）と A と B を交換した場合である．式 (O-36) で示される変換は A と B が交換する場合である．

次節で演算子を変換して生じる V の変化，具体的には V の固有値の変化を計算するが，この変化というのは求める物理量の（演算子に関する）対称性が低い場合と高い場合の差を示すことになる．つまり，この差がなくなる時が対称性が変わるときで，このことから転移温度の条件を探ることができる，ということになる．

3 変換演算子と固有値の置換

自己同型変換の式 (O-36) により，次の V[原論文の式 (29)]

$$V(H', H) = V_2 V_1 = (2\sinh 2H)^{n/2} \exp(H'A) \exp(H^* B) \tag{13}$$

が変換されるとしよう．(V の第 1 引数が A の係数，第 2 引数の * 変換が B の係数になっている．) このとき，変換の演算子を $\mathscr{R}$ として，変換後の演算子を

$$\mathscr{R}[V(H', H)] \tag{14}$$

と表すことにしよう．そうすると，

$$\mathscr{R}[V(H', H)] = (2\sinh 2H)^{n/2} \exp(H'B) \exp(H^* A) \tag{15}$$

である．A と B は可換ではないので式 (13) と式 (15) は等しくない．明らかに，

$$\mathscr{R}^2[V(H', H)] = (2\sinh 2H)^{n/2} \exp(H'A) \exp(H^* B) = V(H', H) \tag{16}$$

であるから，

$$\mathscr{R}^2 = 1 \tag{17}$$

である．

周期的 2 次元格子の分配関数は

$$\cdots V_2 V_1 V_2 V_1 V_2 V_1 V_2 V_1 \cdots \tag{18}$$

であるから，周期の単位として $V = V_2 V_1$ をとっても，$V' = V_1 V_2$ をとっても結果は同じである．つまり，$V(H', H)$ と $V'(H', H)$ の固有値は等しくなければならない．ここで，$V'(H', H)$ は

$$V'(H', H) = V_1 V_2 = (2\sinh 2H)^{n/2} \exp(H^* B) \exp(H' A) \tag{19}$$

である．$V(H', H)$ および $V'(H', H)$ とも，第 1 引数が A の係数に，第 2 引数が B の係数になることに注意すると，

$$V(H^*, H'^*) = (2\sinh 2H'^*)^{n/2} \exp(H^* A) \exp(H' B) \tag{20}$$

$$V'(H^*, H'^*) = (2\sinh 2H'^*)^{n/2} \exp(H' B) \exp(H^* A) \tag{21}$$

であることがわかる．ただし，ここで式 (8) を用いた．したがって，式 (15) から，

$$\mathscr{R}[V(H^*, H'^*)] = (2\sinh 2H'^*)^{n/2} \exp(H^* B) \exp(H' A) = \frac{(\sinh 2H'^*)^{n/2}}{(\sinh 2H)^{n/2}} V'(H', H) \tag{22}$$

という関係が成り立つ．ここで係数を簡単にするため，

$$\beta = \frac{(\sinh 2H'^*)^{n/2}}{(\sinh 2H)^{n/2}} = \frac{1}{(\sinh 2H \sinh 2H')^{n/2}} \tag{23}$$

とおく[2]．そうすると式 (22) から，

$$\mathscr{R}[V(H^*, H'^*)] = \beta V'(H', H) \tag{24}$$

と書くことができる．つまり，$\mathscr{R}[V(H^*, H'^*)]$ の固有値は $V'(H', H)$ の固有値の β 倍と等しくなければならない．$V(H', H)$ の n 個の固有値を $\lambda_i \ \ (i = 1, \ldots, n)$ としよう．そうすると，$V'(H', H)$ の固有値は $\lambda_i \ \ (i = 1, \ldots, n)$ を置換したものである．すなわち，$\mathscr{R}[V(H^*, H'^*)]$ の固有値は $\beta\lambda_i \ \ (i = 1, \ldots, n)$ を置換したものである．

分配関数を計算する場合，式 (15) から，$V(H', H)$ を成分として用いても $V'(H', H)$ を用いても同じ結果が得られる．つまり，$V(H', H)$ と $V'(H', H)$ の n 個の固有値は同じ組み合わせでなければならない．$\mathscr{R}[V(H^*, H'^*)]$ は $V(H', H)$ から連続的に変化するので，$\mathscr{R}[V(H^*, H'^*)]$ の固有値は $\lambda_i \ \ (i = 1, \ldots, n)$ から連続的に変化したものである．したがって，$\mathscr{R}[V(H^*, H'^*)]$ の固有値を $\lambda'_i \ \ (i = 1, \ldots, n)$ とすると，

$$\lambda'_i = p_i \lambda_i \ \ (i = 1, \ldots, n) \tag{25}$$

とすることができる．p_i は係数で一般に i に依存するとしよう．このとき式 (24) は，$p_i \lambda_i = \beta \lambda_j$ となる j が存在することを意味する．つまり，変換 $\mathscr{R}$ により，

$$\lambda_1, \cdots, \lambda_i, \cdots, \lambda_n$$

が置換されて

$$\lambda_{r_1}, \cdots, \lambda_j, \cdots, \lambda_{r_n}$$

[2] 第 2 式は，次の原論文の式 (17) を用いた．

$$\sinh 2H \sinh 2H^* = 1$$

これにより，原論文の式 (38) の係数が得られる．この式は式 (6) より，

$$\frac{\mathrm{e}^{H^*} - \mathrm{e}^{-H^*}}{\mathrm{e}^{H^*} + \mathrm{e}^{-H^*}} = \mathrm{e}^{-2H}, \qquad \frac{\mathrm{e}^{H^*} + \mathrm{e}^{-H^*}}{\mathrm{e}^{H^*} - \mathrm{e}^{-H^*}} = \mathrm{e}^{2H},$$

となり，辺々差し引けば得られる．

となり，その係数 p_i が一定の β に変わる置換は変換 $\mathscr{R}$ によって決まるが，p_i は変換 $\mathscr{R}$ に依存しない．変換 $\mathscr{R}$ に依存しない p_i が変換 $\mathscr{R}$ によって i に依存せず一定の β に変わる．これは，もともと p_i が一定であれば成り立つ．つまり，$p_i = \beta$ であって変換 $\mathscr{R}$ は固有値の置換であれば成り立つ．また，$\mathscr{R}^2 = 1$ であることから，$\mathscr{R}$ は 3 個以上の部分巡回置換ではなく，対間の置換でなければならない．

4 変換演算子と行列表現

前節の結果を行列表現による方法で導くことを考えてみよう．$V(H^*, H'^*)$ が対角化される基底ベクトルが採用されていると考える．この基底ベクトルのもとでは $V(H', H)$ は対角化されている．このとき，$V(H^*, H'^*)$ の固有値は対角線上に

$$V(H^*, H'^*) = \begin{pmatrix} p_1\lambda_1 & & & & \\ & p_2\lambda_2 & & 0 & \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & \ddots & \\ & & & & p_n\lambda_n \end{pmatrix} \tag{26}$$

となる．$\lambda_i \;\; (i = 1, \ldots, n)$ は $V(H', H)$ の固有値である．前節と同じ理由で $V(H^*, H'^*)$ の固有値は $V(H', H)$ の固有値と連続的につながっている．

$V(H^*, H'^*)$ に対する変換 $\mathscr{R}$ は同じ次数の行列 R を用いて，

$$R^{-1}V(H^*, H'^*)R \tag{27}$$

と行列表現することができる．$\mathscr{R}^2 = 1$ であることから，

$$R^{-2}V(H^*, H'^*)R^2 = V(H^*, H'^*) \tag{28}$$

となる．あるいは

$$V(H^*, H'^*)R^2 = R^2V(H^*, H'^*) \tag{29}$$

である．$V(H^*, H'^*)$ は H と H' をパラメータとして連続的に変化する行列であり，これと可換な定数の行列は単位行列しかない．したがって，

$$R^2 = E \tag{30}$$

である．これから

$$R^{-1} = R \tag{31}$$

である．

式 (21) より，

$$R^{-1}V(H^*, H'^*)R = \beta V'(H', H) \tag{32}$$

となる．式 (13)，式 (19) より $V(H^*, H'^*)$ および $V'(H', H)$ は正行列で，かつその成分は H と H' をパラメータとして広い範囲で変化する．このとき，R は限られた場合を除き，非負行列である．(一般に R が非負行列であることを示すことができるかもしれないが，今すぐには思いつかない.）いまは R が非負行列である場合を考えよう．$R^{-1} = R$ であるから，R^{-1} も非負行列である．非負行列の逆行列が非負行列であるときは単項行列 (monomial matrix，各行各列において 0 でない成分は 1 個のみの行列) である．$R^2 = E$ であるから，0 でない成分は 1 となる．このような単項行列は一般に置換行列 (permutation matrix) であるが，いまの場合

$R^2 = E$ が成り立つから対称行列である．つまり，R は置換対称行列で，置換は対間のみで 3 個以上の巡回置換は対象とならない．これが $\mathscr{R}$ を行列表示した場合の R の性質である．たとえば，

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{33}$$

のような行列である．

上で述べたような R の行列において，i 行 j 列と j 行 i 列が 1 の場合，$R^{-1}VR$ の R^{-1} は V の i 行と j 行を置換し，R は V の i 列と j 列を置換する．したがって，V が対角行列の場合 $R^{-1}VR$ は，i 行 j 列と j 行 i 列の 1 に関して，i 行 i 列と j 行 j 列の対角項が置換される．他の R の要素についても同様に置換されるので，V の固有値は変わらないが，順番あるいは位置が変化する．

行列 R で変換 $\mathscr{R}$ を表現したとき，$V(H^*, H'^*)$ と $V(H', H)$ のそれぞれの固有値の間の関係を調べてみよう．前節と同じように，$V(H^*, H'^*)$ が対角化される基底が選ばれているとする．(もし，$V(H', H)$ が対角化される基底が選ばれていないときには，$V(H^*, H'^*)$ が対角化される基底への変換行列を T として，R の替わりに $T^{-1}RT$ を使えばよい.)

このとき，式 (32) より，$\beta V'(H', H)$ の固有値は $V'(H^*, H'^*)$ の固有値を対置換した（巡回置換ではない）固有値であることがわかる．$V'(H', H)$ の固有値は順番を除けば $V(H', H)$ の固有値と同じである．そこで，$V(H^*, H'^*)$ の一つの固有値 $p_i\lambda_i$ が置換されて $V(H', H)$ の λ_r に対応したとしよう．すなわち，

$$p_i\lambda_i = \beta\lambda_r \tag{34}$$

である[3]．前節と同様の考え方で，p_i は $V(H', H)$ のみに依存し，R には関係しない．R を変えて λ_r が λ_s に変わっても p_i は変わらない．つまり，$p_i = p$ は一定である．$\lambda_i \neq \lambda_r$ とすると，p は一定であるから λ_i と λ_r の比は他の組み合わせについても常に一定でなければならない．しかし，一般にはそのようなことはない．したがって，$p = \beta$ にならざるを得ない．一方，R は変換 (O-36) によって決まり，一般に r は R に依存し，p_i は R に依存しない．これから，$p_i = \beta$ とすれば $i = r$ が自然に成り立つ．

最初に述べたように，分配関数に入るのは固有値の和であるから，いまは，固有値の順序に拘らなければ，式 (34) のままでもよい．このとき，$V(H^*, H'^*)$ の固有値は $\beta\lambda_r$ であることがわかる．あるいは，$V(H', H)$ の固有値に β の因子を乗じたものであるといえる．以上のことから，$V(H', H)$ と $V(H^*, H'^*)$ の固有値の関係がわかった．これにより原論文の式 (38) が成り立つことがわかる．

5　Dual Transformation (双対変換)

$V(H', H)$ と $V'(H', H)$ は共にその n 乗のトレース（跡）が 2 次元格子系の分配関数を表すということから，$V(H', H)$ と $V'(H', H)$ は双対 (dual) の関係にあるということができる．互いに双対な V と V' は式 (O-36) の

[3] α が行列 A の固有値なら，$a\alpha$ は aA の固有値である．

$\mathscr{R}$ によって相互に変換できる．すなわち，

$$\mathscr{R}[V(H',H)] = \beta^{-1}V'(H^*,H'^*) \tag{35}$$

$$\mathscr{R}[V(H^*,H'^*)] = \beta V'(H',H) \tag{36}$$

$$\mathscr{R}[V'(H',H)] = \beta V(H^*,H'^*) \tag{37}$$

$$\mathscr{R}[V'(H^*,H'^*)] = \beta^{-1}V(H',H) \tag{38}$$

のように互いに変換される．あるいは行列表現すると，

$$R^{-1}V(H',H)R = \beta^{-1}V'(H^*,H'^*) \tag{39}$$

$$R^{-1}V(H^*,H'^*)R = \beta V'(H',H) \tag{40}$$

$$R^{-1}V'(H',H)R = \beta V(H^*,H'^*) \tag{41}$$

$$R^{-1}V'(H^*,H'^*)R = \beta^{-1}V(H',H) \tag{42}$$

となる．すなわち，V と V' の間には $\mathscr{R}$ あるいは R により dual transformation (双対変換) により相互に変換が可能である．

双対変換は 1 次独立な演算子の自己同型変換と同値であり，この双対変換により固有値が変化することは演算子の周期的な置換に対し（第 1 節では座標系の回転に例えた）異方的であることを意味する．これから，このような双対変換による差がなくなるときが，異方性が消失する（つまり秩序が消失する）ときと考えることができて，その時の条件が秩序転移の温度を与えると理解される．すなわち，この条件は，$\beta = 1$ のときであり，これから，

$$H = H'^* \tag{43}$$

という転移温度を決定する条件が得られる．あるいは，式 (8) を用いて書き換えればこの条件は

$$H^* = H' \tag{44}$$

となる．この式は原論文の式 (39b) である．相互作用が等方的な場合，$H = H'$ である．原論文ではランダムな場合と書いてあるが，その場合も等方的と理解されるので，$H = H'$ としてよい．その場合，式 (44) は，

$$H = H^* \tag{45}$$

となり，これは原論文の式 (39a) であって，これを式 (6) に代入することにより

$$H = H^* = \frac{1}{2}\ln\cot\frac{\pi}{8} \tag{46}$$

という結果を得ることができる[4] (つまり式 (39a) の第 2 式).

[4]式 (6) に代入して

$$\tanh H = \mathrm{e}^{-2H}$$

となる．これを変形して

$$\frac{\mathrm{e}^{2H}-1}{\mathrm{e}^{2H}+1} = \mathrm{e}^{-2H}$$

である．$x = e^{2H}$ とおくと，$x^2 - 2x - 1 = 0$ となり，この解は

$$x = 1 + \sqrt{2}$$

である．一方，$\tan\pi/4 = 1$ であるので，$\tan\frac{\pi}{8} = y$ とおくと，三角関数の倍角の公式から

$$1 = \frac{2y}{1-y^2}$$

であるから，$y = -1 + \sqrt{2} = 1/x$ であることがわかる．つまり，$x = \cot\pi/8$ となるから上の式が得られる．

参考文献

[1] Lars Onsager, "Crystal Statitics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition", Phys. Rev. **65**, 117-149 (1944). `http://www.totoha.net/archiv/3582.pdf`