



UNIVERSITÄT MANNHEIM

Curie-Weiß Ising Modell

Analyse mittels probabilistischer und
analytischer Methoden

Bachelorarbeit

Fakultät für Wirtschaftsinformatik und Wirtschaftsmathematik

Lehrstuhl für Wahrscheinlichkeitstheorie

Universität Mannheim

Eingereicht von

Elias Reutelsterz

Matrikelnummer: 1683714

Mannheim, 30. Mai 2022

Betreuer: Prof. Dr. Martin Slowik

Eidesstattliche Erklärung

„Ich erkläre an Eides statt, dass ich die hier vorgelegte Bachelor-Thesis selbstständig und ausschließlich unter Verwendung der angegebenen Literatur und sonstigen Hilfsmittel verfasst habe. Die Arbeit wurde in gleicher oder ähnlicher Form keiner anderen Prüfungsbehörde zur Erlangung eines akademischen Grades vorgelegt.“

Ort, Datum

Unterschrift

Inhaltsverzeichnis

Abbildungsverzeichnis	I
1 Einführung Curie-Weiß Ising Modell	1
1.1 Der Magnetismus und seine Modelle	1
1.2 Hamilton-Funktion, Zustandssumme und Gibbs-Maß	3
2 Detaillierte Berechnung der Eigenschaften mithilfe der kombinatorischen Strategie	7
2.1 Eigenschaften für große N ohne externes Magnetfeld	7
2.2 Eigenschaften für große N für ein beliebig starkes externes Magnetfeld	16
2.3 Phasenübergang	22
3 Alternative Lösungsstrategien des Curie-Weiß Ising Modells	25
3.1 Hubbard-Stratonovich Transformation	25
3.2 Austauschbare Paare von Stein	28
3.3 Interpolationsverfahren	34
3.3.1 Existenz des Grenzwerts des magnetischen Drucks	34
3.3.2 Berechnung obere und untere Schranke	38
3.3.3 Cavity Methode	40
4 Ausblick und Fazit	46
4.1 Ausblick Hamilton-Jacobi Lösungsstrategie	46
4.2 Fazit	49
A Anhang	II
A.1 inhaltlicher Anhang	II
A.2 Code für die Plots	V
Literatur	VI

Abbildungsverzeichnis

1.1	Vollständiger Graph	1
1.2	Ising Modell Gitter \mathbb{Z}^2	2
2.1	Gibbs-Maß mit $h = 0$	7
2.2	Funktion $I_{\beta,0}(m_N)$ mit $h = 0$	12
2.3	Mean-Field Gleichung: Schnittpunkte mit $h = 0$	14
2.4	Gibbs-Maß mit $h = 0.001$	16
2.5	Mean-Field Gleichung: Schnittpunkte mit $h = 0.05$	19
2.6	Funktion $I_{\beta,h}(m)$ mit $h = 0.05$	19
2.7	Funktion $m_\beta(h)$ mit β konstant	22
2.8	Funktion $m(\beta, h)$ mit β variabel	22

1 | Einführung Curie-Weiß Ising Modell

1.1 Der Magnetismus und seine Modelle

Das Curie-Weiß Ising Modell beschäftigt sich mit einer Menge von Teilchen/Atomen/Molekülen, welche jeweils einen magnetischen Spin tragen. Dieser kann entweder $+1$, genannt „spin-up“, oder -1 , genannt „spin-down“ betragen. Dementsprechend definiert man den Zustandsraum der magnetischen Spins $\sigma := (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ für $N \in \mathbb{N}$ Objekte durch

$$\Sigma_N := \{\pm 1\}^N.$$

Im Modell werden gewisse Eigenschaften dieser Objekte und deren Beziehung zueinander untersucht. Dabei wird in der Regel eine sehr hohe Anzahl von Objekten untersucht (bspw. Wasserstoff wiegt $1,00794 \frac{g}{Mol}$ und 1 Mol beinhaltet $6.02214076 \cdot 10^{23}$ Atome). Man kann diese Menge auf zwei verschiedene Sichtweisen betrachten. Einerseits kann eine mikroskopische/endliche Sichtweise genau aussagen, welches Objekt sich in welchem Zustand befindet und man kann direkt und deterministisch eine Aussage über die Beziehung zweier solcher Objekte zueinander treffen. Andererseits kann man sich den Stoff als Ganzes in der makroskopischen/infinitesimalen Sichtweise anschauen. In diesem Fall lässt sich mit Wahrscheinlichkeiten beschreiben, in welchem Gesamtzustand sich die Objekte befinden. In den Berechnungen wird aufgrund der in der Praxis hohen Anzahl der betrachteten Objekte schlussendlich der Grenzwert $\lim_{N \rightarrow \infty}$ benutzt.

Dem Curie-Weiß Ising Modell liegt die Annahme zugrunde, dass von jedem Objekt auf jedes andere ein gleich großer magnetischer Effekt ausgeht. Dies kann man mit einem vollständigen Graphen darstellen, in dem alle Kantengewichte gleich groß sind:

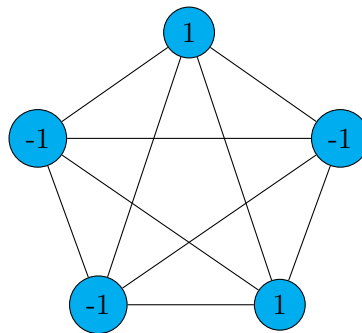


Abbildung 1.1: Vollständiger Graph, $N = 5$

Ein Vorteil dieses Modells ist die Invarianz gegenüber Permutation der Spin-Konfiguration, da durch die Gleichheit der Kantengewichte nur die Summe der Spins entscheidend ist.

Dies ist eine Vereinfachung eines allgemeineren Ferromagnetismus-Modells, in dem spezifische Gewichte eingesetzt werden können, unter anderem abhängig von den Abständen der Objekte. So stellt beispielsweise das Ising Modell Objekte in einem Gitter \mathbb{Z}^d dar, in welchem nur die jeweiligen Nachbarn beeinflusst werden:

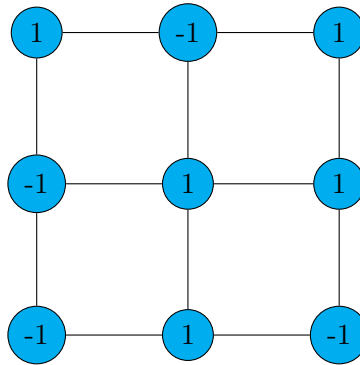


Abbildung 1.2: Ising Modell Gitter \mathbb{Z}^2

Die Fragestellung hinter dem Curie-Weiß Ising Modell ist nun, welche Auswirkung die Temperatur und ein externes magnetisches Feld auf die magnetischen Spins in der makroskopischen Sichtweise haben. Beispielsweise können Konfigurationen auftreten, in denen alle Teilchen den gleichen Spin haben, also ferromagnetisch sind, da sie auch ohne externes Magnetfeld noch magnetisch sind. Mit dem im Allgemeinen als inverse Temperatur bezeichneten Parameter $\beta = \frac{1}{T} \in \mathbb{R}_{>0}$ (wobei T die Temperatur in Kelvin $\in \mathbb{R}_{>0}$ anzeigt) und der Stärke des externen magnetischen Felds $h \in \mathbb{R}$ können verschiedene Zustände in der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Spin-Konfiguration erkannt werden. Mithilfe der Berechnung der sog. kritischen Temperatur β_c kann ein Phasenübergang von zwei verschiedenen Zuständen nachgewiesen werden:

- Wenn $\beta \leq \beta_c$ gilt, sind die verschiedenen Spin-Konfigurationen in etwa gleichverteilt, jedoch verschoben um das externe magnetische Feld h . Die Verteilung sollte nicht mit der Verteilung des Wahrscheinlichkeitsmaßes der Summe der Spins verwechselt werden, da diese von der Menge der Kombinationsmöglichkeiten der Spins abhängt, welche die gleiche Summe bilden. Die Gleichverteilung der Konfigurationen drückt sich im Wahrscheinlichkeitsmaß als Binomialverteilung aus.

- Wenn $\beta > \beta_c$ gilt, kann man jedoch Häufungspunkte erkennen, die sich bei den Konfigurationen befinden, welche die minimale freie Energie des Systems besitzen.

Die Lokalisierung dieser Punkte erfolgt nicht direkt über die Summe der Energiezustände X (die ein System abhängig von den Parametern β, h, N und der Spinkonfiguration σ trägt) selbst, sondern über die Verschiebung $\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(X)$.

Schwerpunkt dieser Arbeit ist es, verschiedene Strategien für die Berechnung dieser Formel vorzustellen. Diese reichen von rein analytischen, über kombinatorischen bis hin zu stochastischen Methoden. Hierbei wird zuerst sehr detailliert die kombinatorische Methode aus [10, Statistical Mechanics of Lattice Systems Kapitel 2.1 - 2.4 von Sacha Friedli und Yvan Velenik] vorgestellt. Daraufhin folgen zwei weitere Ansätze aus [10, Kapitel 2.5]: die Hubbard Stratonovich Methode und die Methode von Stein mithilfe austauschbarer Paare. Außerdem wird die Cavity-Methode aus [3] und [12] vorgestellt, dessen Anwendung sich auf das komplexere Sherrington-Kirkpatrick Modell übertragen lässt. Die Notationen der verschiedenen Quellen werden vereinheitlicht. Zum Schluss wird ein Ausblick zu der Hamilton-Jacobi Lösungsstrategie gegeben, welche vielfältige andere Anwendungen bietet. Für die Erforschung und Anwendung dieser Methodik wurde an Giorgio Parisi 2021 der Nobelpreis für Physik verliehen.

1.2 Hamilton-Funktion, Zustandssumme und Gibbs-Maß

Die mathematischen Konstrukte des Curie-Weiß Ising Modells werden in den folgenden Kapiteln dieser Arbeit durchweg benutzt. Daher werden diese zunächst eingeführt und erklärt.

Definition 1.2.1. (Hamilton-Funktion)

Die sogenannte **Hamilton-Funktion** $H : \Sigma_N \rightarrow \mathbb{R}$ ordnet jeder Spin-Konfiguration einen Energiewert in Abhängigkeit von der inversen Temperatur β und dem externen magnetischen Feld h zu:

$$H_{N,\beta,h}(\sigma) := -\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

Diese formale Darstellung verdeutlicht den im vorigen Kapitel erwähnten Vorteil des Curie-Weiß Ising Modells: die Invarianz bezüglich Permutation. Man kann schnell in die makroskopische Sichtweise wechseln, indem man die Hamilton-Funktion nicht abhängig von der Spin-Konfiguration selbst, sondern in Abhängigkeit der Magnetisierungsdichte m_N beschreibt.

Definition 1.2.2. (*Magnetisierungsdichte*)

Sei die **Magnetisierungsdichte** $m_N : \Sigma_N \rightarrow [-1, 1]$ gegeben durch:

$$m_N := m_N(\sigma) = \frac{M_N}{N}$$

mit der Magnetisierung $M_N : \Sigma_N \rightarrow [-N, N]$:

$$M_N := M_N(\sigma) = \sum_{i=1}^N \sigma_i$$

so ergibt sich für die Hamilton-Funktion

$$\begin{aligned} H_{N,\beta,h}(\sigma) &= -\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &= -\frac{\beta}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \cdot \sum_{j=1}^N \sigma_j \right) - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &= -\frac{\beta}{2N} M_N^2 - h M_N \\ &= -\frac{\beta}{2} N m_N^2 - h N m_N . \end{aligned}$$

In der Regel wird nicht direkt die Hamilton-Funktion, sondern die verschobene Darstellung $e^{-H_{N,\beta,h}}$ betrachtet, um Rückschlüsse auf das Maximum der Wahrscheinlichkeitsdichte der Zustände zu ziehen. Aus diesem Grund wird im nächsten Schritt das Gibbs-Maß eingeführt, welches durch die Zustandssumme über den gesamten Zustandsraum normiert wird.

Definition 1.2.3. (*Zustandssumme, Gibbs-Maß*)

Sei die **Zustandssumme** oder auch **Partitionssumme** $Z_{N,\beta,h} \in \mathbb{R}$ definiert durch:

$$Z_{N,\beta,h} := \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp(-H_{N,\beta,h}(\sigma))$$

und das **Gibbs-Maß** $\mu_{N,\beta,h} : \Sigma_N \rightarrow \mathbb{R}$, nach dessen die $\sigma \in \Sigma_N$ verteilt sind, definiert durch:

$$\mu_{N,\beta,h}(\sigma) := \frac{\exp(-H_{N,\beta,h}(\sigma))}{Z_{N,\beta,h}}$$

Der Erwartungswert bezüglich des Gibbs-Maßes wird wie folgt notiert:

Sei $f : \Sigma_N \rightarrow \mathbb{R}$ messbar, so gilt

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{N,\beta,h} &:= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} f(\sigma) \mu_{N,\beta,h}(\sigma) \\ &= \frac{\sum_{\sigma \in \Sigma_N} f(\sigma) \exp(-H_{N,\beta,h}(\sigma))}{Z_{N,\beta,h}}. \end{aligned}$$

Des Weiteren wird für diverse spätere Berechnungen die freie Energie der Spin-konfiguration benötigt. Diese wird auf der makroskopischen Ebene mit der Magnetisierungsdichte m_N definiert, die per Definition nur in folgender Menge liegen kann:

$$m_N \in A_N := \left\{ -1 + \frac{2k}{N} : k = 0, \dots, N \right\} \subset [-1, 1]$$

In verschiedenen Berechnungen wird jedoch ein beliebiges $m \in [-1, 1]$ betrachtet, welches nicht zwingend in A_N liegen muss. Um es von $m_N \in A_N$ unterscheiden zu können, wird es in diesen Fällen mit m gekennzeichnet.

Definition 1.2.4. (*freie Energie, Energie, Entropie*)

Somit wird die **freie Energie** definiert mit

$$f_\beta(m) := \beta e(m) - s(m)$$

und deren beide Bestandteile wie folgt:

die **Energie** mit

$$e(m) := -\frac{1}{2}m^2$$

die **Entropie** mit

$$s(m) := -\frac{1-m}{2} \log\left(\frac{1-m}{2}\right) - \frac{1+m}{2} \log\left(\frac{1+m}{2}\right)$$

Schnell fällt auf, dass die Randwerte $m \in \{-1, 1\}$ in $s(m)$ nicht definiert sind. Daher wird die Approximation gewählt: $\lim_{m \downarrow -1} s(m) = 0$ und $\lim_{m \uparrow 1} s(m) = 0$. Also sei $s(-1) = s(1) := 0$ definiert.

Definition 1.2.5. (*magnetischer Druck*)

Sei der **magnetische Druck** definiert durch:

$$\Psi_\beta(h) := \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_{\beta,N}(h) := \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h})$$

Bemerkung 1.2.6. In der Literatur werden verschiedene Notationen für die Hamilton-Funktion verwendet. Beispielsweise wird in Friedli-Velenik [10] der Faktor $\frac{\beta}{2}$ durch $d\beta$ ersetzt, wobei β in diesem Fall als inverse Temperatur gekennzeichnet ist. Außerdem wird die Summe im vorderen Term nicht halbiert, was jedoch äquivalent ist. Hintergrund dessen ist: da $\sigma_i \sigma_j = \sigma_j \sigma_i$ und $\sigma_i \sigma_i = 1$ folgt, dass

$$\frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j = \frac{1}{N} \left(2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma_i \sigma_j + \sum_{i=1}^N \sigma_i \sigma_i \right) = 1 + \frac{2}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma_i \sigma_j.$$

Die rechte Schreibweise ohne die Abweichung 1 wird in der Ausarbeitung von Adriano Barra [3] verwendet und für große N als äquivalent angesehen. Der Faktor 2 macht keinen Unterschied in der Berechnung der Eigenschaften, da er ganz einfach in die Definition von β einfließt.

2 | Detaillierte Berechnung der Eigenschaften mithilfe der kombinatorischen Strategie

2.1 Eigenschaften für große N ohne externes Magnetfeld

In diesem Kapitel wird detailliert die kombinatorische Lösungsstrategie ohne externes magnetisches Feld ($h = 0$) aus [10, vgl. Kapitel 2.2] vorgestellt.

Durch die Symmetrie des Gibbs-Maßes mit $h = 0$ gilt für alle möglichen Werte der Magnetisierungsdichte $M_N \in A_N$ gemäß [10, S. 59]

$$\mu_{N,\beta,0}(\{\sigma \in \Sigma_N : m_N(\sigma) = M_N\}) := \mu_{N,\beta,0}(m_N(\sigma) = M_N) = \mu_{N,\beta,0}(m_N(\sigma) = -M_N)$$

für den Erwartungswert $\langle m_N(\sigma) \rangle_{N,\beta,0} = 0$.

In Abbildung 2.1 ist das Gibbs-Maß in Abhängigkeit von der Magnetisierungsdichte $m_N(\sigma) \in A_N$ dargestellt. Wie in der Einleitung bereits erwähnt, sieht man hier die Besonderheit des Phasenübergangs. Mit $\beta = 0.98$ ist ein einziger Häufungspunkt um $m_N(\sigma) = 0$ zu sehen, der hauptsächlich durch die Unterschiede der Permutationshäufigkeiten mit $m_N(\sigma) = M_N$ zu erklären ist. Im dritten Plot mit $\beta = 1.02$ sind zwei Hochpunkte mit $m_N(\sigma) \neq 0$ zu sehen.

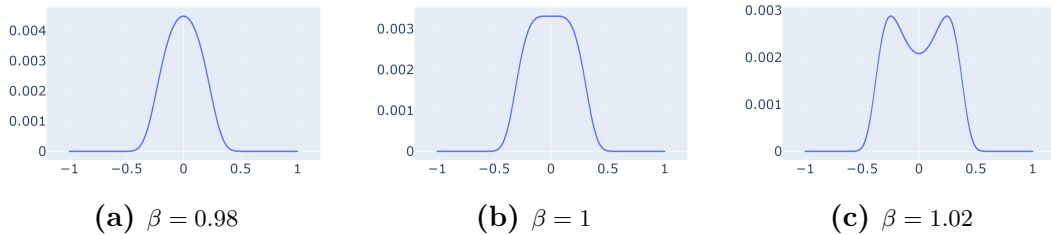


Abbildung 2.1: Gibbs-Maß $\mu_{N,\beta,h}(m_N)$ mit $N = 1000$ und $h = 0$

Es folgen zunächst technische Aussagen, die in den kommenden Sätzen aufgegriffen und benutzt werden.

Lemma 2.1.1. [10, vgl. Exercise 2.1] Für alle $N \geq 12$ existieren Konstanten c_- und c_+ , sodass für alle $m_N \in A_N$ gelte:

$$c_- N^{-\frac{1}{2}} e^{Ns(m_N)} \leq \binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N} \leq c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{Ns(m_N)} \quad (2.1)$$

Beweis. Folgende Werkzeuge und Definitionen werden in der folgenden Berechnung verwendet:

(i) Stirlingformel aus [17, S. 228]: $\sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e}\right)^N \leq N! \leq \sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e}\right)^N e^{\frac{1}{N}} \quad \forall N \in \mathbb{N}$

(ii) $e^{\frac{1}{N}} \leq N^{\frac{1}{2}} \quad \forall N \geq 3$

(iii) Definition freie Energie 1.2.4

(iv) $e^{-\frac{4}{N}} \geq \frac{1}{\sqrt{2}} \Leftrightarrow N \geq \frac{8}{\log(2)} \quad \forall N \geq 12$

Für $m_N = \pm 1$ gilt $\binom{N}{N} = \binom{N}{0} = 1$ und mit der vorangegangenen Definition $s(-1) = s(1) = 0$ wird die Aussage trivial. Daher seien die Randwerte $m_N = \pm 1$ in der folgenden Rechnung ausgeschlossen. Außerdem wird $m_N = m$ zur besseren Übersicht vereinfacht. Zunächst suchen wir die obere Schranke:

$$\begin{aligned} & \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} \\ &= \frac{N!}{\left(\frac{1+m}{2}N\right)! \cdot \left(\frac{1-m}{2}N\right)!} \\ &\stackrel{(i)}{\leq} \frac{\sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e}\right)^N e^{\frac{1}{N}}}{\sqrt{2\pi \frac{1+m}{2}N} \left(\frac{\frac{1+m}{2}N}{e}\right)^{\frac{1+m}{2}N} \cdot \sqrt{2\pi \frac{1-m}{2}N} \left(\frac{\frac{1-m}{2}N}{e}\right)^{\frac{1-m}{2}N}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{1}{N}} \left(\frac{1+m}{2} \frac{1-m}{2}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{1+m}{2}\right)^{-\frac{1+m}{2}N} \left(\frac{1-m}{2}\right)^{-\frac{1-m}{2}N} \\ &\stackrel{(ii)}{\leq} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{4} - \frac{m^2}{4}\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\log\left(\frac{1+m}{2}\right) \frac{1+m}{2}N - \log\left(\frac{1-m}{2}\right) \frac{1-m}{2}N\right) \\ &\stackrel{(iii)}{=} \sqrt{\frac{2}{\pi}} (1-m^2)^{-\frac{1}{2}} e^{Ns(m)} \end{aligned}$$

Mit $m \in A_N / \{\pm 1\}$ und Betrachtung der Funktion folgt, dass das Maximum am Rand des Definitionsbereichs von m liegt.

$$\leq \sqrt{\frac{2}{\pi \left(1 - \left(1 - \frac{2(N-1)}{N}\right)^2\right)}} e^{Ns(m)}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi \left(\frac{4(N-1)}{N} - \frac{4(N-1)^2}{N^2} \right)}} e^{Ns(m)} \\
 &= \sqrt{\frac{2}{\pi} \frac{N^2}{4N-1}} e^{Ns(m)} \\
 &\leq \sqrt{\frac{2}{\pi}} N^{\frac{1}{2}} e^{Ns(m)} \\
 &= c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{Ns(m)}
 \end{aligned}$$

Nun folgt die untere Schranke:

$$\begin{aligned}
 &\binom{N}{\frac{1+m}{2}N} \\
 &= \frac{N!}{\left(\frac{1+m}{2}N\right)! \cdot \left(\frac{1-m}{2}N\right)!} \\
 &\stackrel{(i)}{\geq} \frac{\sqrt{2\pi N} \left(\frac{N}{e}\right)^N}{\sqrt{2\pi \frac{1+m}{2}N} \left(\frac{\frac{1+m}{2}N}{e}\right)^{\frac{1+m}{2}N} e^{\frac{1}{\frac{1+m}{2}N}} \cdot \sqrt{2\pi \frac{1-m}{2}N} \left(\frac{\frac{1-m}{2}N}{e}\right)^{\frac{1-m}{2}N} e^{\frac{1}{\frac{1-m}{2}N}}} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{1+m}{2}\right)^{-\frac{1+m}{2}N} \left(\frac{1-m}{2}\right)^{-\frac{1-m}{2}N} \left(\frac{1+m}{2} \frac{1-m}{2}\right)^{-\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{\frac{1+m}{2}N} - \frac{1}{\frac{1-m}{2}N}}
 \end{aligned}$$

Mit $m \in A_N / \{\pm 1\}$ und Betrachtung der Funktion folgt, dass das

Minimum bei $m = 0 \ \forall N \geq 3$ liegt.

$$\begin{aligned}
 &\geq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} N^{-\frac{1}{2}} e^{Ns(m)} 2e^{-\frac{4}{N}} \\
 &\stackrel{(iv)}{\geq} \frac{1}{\sqrt{\pi}} N^{-\frac{1}{2}} e^{Ns(m)} \\
 &= c_- N^{-\frac{1}{2}} e^{Ns(m)}
 \end{aligned}$$

□

Satz 2.1.2. Für beliebige $\beta > 0$ gilt:

$$\Psi_\beta(0) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,0} = - \min_{m \in [-1,1]} f_\beta(m) \quad (2.2)$$

Darüber hinaus gilt für $J \subset [-1, 1]$:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mu_{N,\beta,0}(m_N \in J) = - \min_{m \in J} I_{\beta,0}(m) \quad (2.3)$$

2 Detaillierte Berechnung der Eigenschaften mithilfe der kombinatorischen Strategie

Die Funktion $I_{\beta,h}(m)$ (zu beachten ist, dass es sich in 2.3 nur um den Fall $h = 0$ handelt) [10, vgl. S. 61] sei definiert durch:

$$I_{\beta,h}(m) := f_{\beta}(m) - hm - \left(\min_{\tilde{m} \in [-1,1]} f_{\beta}(\tilde{m}) - h\tilde{m} \right) \quad (2.4)$$

Beweis. Sei $J \subset [-1, 1]$ ein Intervall. Dann gilt:

$$\mu_{N,\beta,0}(m_N \in J) = \sum_{m \in J \cap A_N} \mu_{N,\beta,0}(m_N = m)$$

Es lässt sich kombinatorisch berechnen, mit wie vielen Möglichkeiten der Spins σ der Wert m angenommen wird.

Sei $A = |\{\sigma_i = 1\}|$ und $B = |\{\sigma_i = -1\}|$, so gilt $A + B = N$ und $A - B = m_N \cdot N$, also folgt $A = \frac{1+m_N}{2}N$.

Die Anzahl der Möglichkeiten ist eine Kombination ohne Wiederholung. Daher folgt, dass genau $\binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N}$ Konfigurationen von $\sigma \in \Sigma_N$ mit $m_N(\sigma) = m$ existieren. Daher kann man die Verteilung von m_N explizit wie folgt ausdrücken:

$$\mu_{N,\beta,0}(m_N(\sigma) = m) = \sum_{\substack{\sigma \in \Sigma_N: \\ m_N(\sigma) = m}} \frac{e^{-H_{N,\beta,0}(\sigma)}}{Z_{N,\beta,0}} = \frac{1}{Z_{N,\beta,0}} \binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N} e^{\frac{\beta}{2}m^2N}$$

Außerdem erhält man:

$$Z_{N,\beta,0} = \sum_{m_N \in A_N} \binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N} e^{\frac{\beta}{2}m_N^2N}$$

Da für alle $m_N \in A_N$ gilt $\binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N} e^{\frac{\beta}{2}m_N^2N} \geq 0$ und die Partitionssumme mit $|A_N| = N+1$ nur endlich viele Terme beinhaltet, gelten folgende Abschätzungen nach unten und nach oben:

$$\max_{m_N \in A_N} \binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N} e^{\frac{\beta}{2}m_N^2N} \leq Z_{N,\beta,0} \leq (N+1) \max_{m_N \in A_N} \binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N} e^{\frac{\beta}{2}m_N^2N}$$

Mithilfe der Abschätzung 2.1 im vorangegangenen Lemma

$$c_- N^{-\frac{1}{2}} e^{Ns(m_N)} \leq \left(\frac{N}{\frac{1+m_N}{2} N} \right) \leq c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{Ns(m_N)}$$

lassen sich die Konstanten $c_- > 0$ und $c_+ > 0$ finden, welche nun für die Zustandssumme verwendet werden. Zuerst folgt die Berechnung der oberen Schranke:

$$\begin{aligned} Z_{N,\beta,0} &= \sum_{m_N \in A_N} \left(\frac{N}{\frac{m_N+1}{2} N} \right) e^{\frac{\beta}{2} m_N^2 N} \leq \sum_{m_N \in A_N} c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{Ns(m_N)} e^{\frac{\beta}{2} m_N^2 N} \\ &= \sum_{m_N \in A_N} c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{N(s(m_N) + \frac{\beta}{2} m_N^2)} \leq (N+1) c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{N \max_{m_N \in A_N} (s(m_N) + \frac{\beta}{2} m_N^2)} \\ &\leq (N+1) c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{-N \min_{m \in [-1,1]} (-s(m) - \frac{\beta}{2} m^2)} \\ &= (N+1) c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{-N \min_{m \in [-1,1]} f_\beta(m)} \end{aligned}$$

Daraus kann man ableiten, dass gilt:

$$\begin{aligned} &\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,0} \\ &\leq \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \left(\log(c_+) + \log(N+1) + \log \left(N^{\frac{1}{2}} \right) - N \min_{m \in [-1,1]} f_\beta(m) \right) \\ &= - \min_{m \in [-1,1]} f_\beta(m) \end{aligned}$$

Für die untere Schranke wird die Stetigkeit der freien Energie $f_\beta(m) = -\frac{\beta}{2} m^2 - s(m)$ auf $m \in [-1, 1]$ genutzt und es lässt sich $\tilde{m} = \arg \min_{m \in [-1,1]} f_\beta(m) \in [-1, 1]$ finden. Im nächsten Schritt wird die Konvergenz der Funktion $\arg \min_{m_N \in A_N} (f_\beta(m_N))$ in N ausgenutzt. Direkt aus der Definition von A_N und der Stetigkeit von f_N folgt also $\forall \epsilon > 0 \exists n \in \mathbb{N}$, sodass $\forall N > n$ für $m_N = \arg \min_{m_N \in A_N} (f_\beta(m_N))$ gilt $|f_\beta(m_N) - f_\beta(\tilde{m})| \leq \epsilon$.

Somit folgt für $-f_\beta(m)$:

$$Z_{N,\beta,0} \geq c_- N^{-\frac{1}{2}} e^{-N(f_\beta(\tilde{m}) + \epsilon)} \Rightarrow \liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,0} \geq - \min_{m \in [-1,1]} f_\beta(m) - \epsilon.$$

2 Detaillierte Berechnung der Eigenschaften mithilfe der kombinatorischen Strategie

Da ϵ beliebig gewählt wurde, folgt mit $\epsilon \downarrow 0$ aus den beiden Schranken die Behauptung 2.2.

Auf diesem Resultat aufbauend lässt sich die zweite Behauptung 2.3 zeigen:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mu_{N,\beta,0}(m_N \in J) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(\frac{1}{Z_{N,\beta,0}} \cdot \sum_{m \in J \cap A_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{\frac{\beta}{2}m^2N} \right) \\ &= -\min_{m \in J} f_\beta(m) + \min_{\tilde{m} \in [-1,1]} f_\beta(\tilde{m}) \\ &= -\min_{m \in J} I_{\beta,0}(m) \end{aligned}$$

□

In den folgenden Graphiken ist die Funktion $I_{\beta,0}(m_N)$ mit verschiedenen Werten für β dargestellt. Um die Maxima des Gibbs-Maßes zu lokalisieren, kann man alternativ die Nullstellen/Minima von $I_{\beta,0}(m_N)$ untersuchen. An dieser Stelle vermischt sich der endliche Wertebereich A_N mit dem Intervall $[-1,1]$, jedoch wird dies durch die bereits getätigte Aussage über die Konvergenz aus 2.3 im Grenzwert $\lim_{N \rightarrow \infty}$ irrelevant.

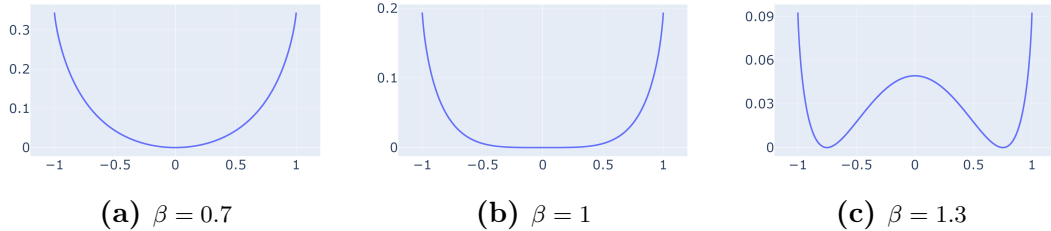


Abbildung 2.2: Funktion $I_{\beta,0}(m_N)$ mit $N = 100000$ und $h = 0$

Durch Aussage 2.3 lässt sich die Schlussfolgerung treffen:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mu_{N,\beta,0}(m_N \in J) &= -\min_{m \in J} I_{\beta,0}(m) \\ \Leftrightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \mu_{N,\beta,0}(m_N \in J) &= \lim_{N \rightarrow \infty} e^{-\min_{m \in J} (I_{\beta,0}(m))N} \end{aligned}$$

Außerdem gilt per Definition $I_\beta \geq 0$ und

$$\min_{m \in [-1,1]} I_{\beta,0}(m) = \min_{m \in [-1,1]} f_\beta(m) - \min_{\tilde{m} \in [-1,1]} f_\beta(\tilde{m}) = 0.$$

Demnach erhält man für eine Teilmenge $J \subset [-1, 1]$ mit

$$\min_{m \in J} I_{\beta,0}(m) > 0$$

exponentielle Konvergenz $\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_{N,\beta,0}(m_N \in J) \rightarrow 0$. Im Umkehrschluss erhält man die exponentielle Konvergenz zu den Minima / dem Minimum.

Satz 2.1.3. *Sei $\beta_c = 1$, dann gelten folgende Aussagen für den Fall $h = 0$:*

- (i) *Wenn $\beta \leq \beta_c$ gilt, dann konzentriert sich die Magnetisierungsdichte in 0. Also existiert für alle $\epsilon > 0$ ein $c = c(\beta, \epsilon) > 0$ und ein N_c , sodass für alle $N > N_c$ gilt:*

$$\mu_{N,\beta,0}(m_N \in (-\epsilon, \epsilon)) \geq 1 - 2e^{-cN}$$

- (ii) *Wenn $\beta > \beta_c$ gilt, dann existieren $m_+^*(\beta) > 0$ und $m_-^*(\beta) < 0$ mit $-m_+^*(\beta) = m_-^*(\beta)$, genannt die spontane Magnetisierungsdichte, an denen sich die Magnetisierungsdichte häufen. Für alle $\epsilon > 0$ existiert $b = b(\beta, \epsilon) > 0$, sodass mit*

$$J_*(\epsilon) = (m_-^*(\beta) - \epsilon, m_-^*(\beta) + \epsilon) \cup (m_+^*(\beta) - \epsilon, m_+^*(\beta) + \epsilon)$$

ein N_b existiert, sodass für alle $N > N_b$ gilt:

$$\mu_{N,\beta,0}(m_N \in J_*(\epsilon)) \geq 1 - 2e^{-bN}$$

β_c nennt man die inverse kritische Temperatur oder auch inverse Curie Temperatur. Genau ist dieser Phasenübergang in 2.1 mit $\beta < \beta_c$, $\beta = \beta_c$, $\beta > \beta_c$ bereits dargestellt.

Beweis. Analog zu dem vorangegangenen Lemma lässt sich das Gibbs-Maß mithilfe der Funktion $I_{\beta,h}(m)$ umdrehen und verschieben, sodass man für die Konzentrationspunkte die Nullstellen/Minima von $I_{\beta,h}(m)$, statt der Maxima von $\mu_{N,\beta,0}$ betrachten kann. Da $I_{\beta,0}$ stetig ist und es gilt $I_{\beta,0} \geq 0$, sieht man, dass die Nullstellen/Minima sich genau an den Punkten $\frac{\partial I_{\beta,0}(m)}{\partial m} = 0$ befinden. Diese Punkte lassen sich wie folgt berechnen:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial I_{\beta,0}(m)}{\partial m} \\
&= \frac{\partial (f_{\beta}(m) - \min_{\tilde{m} \in [-1,1]} f_{\beta}(\tilde{m}))}{\partial m} = \frac{\partial f_{\beta}(m)}{\partial m} \\
&= \frac{\partial \left(-\frac{\beta}{2} m^2 + \frac{1-m}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) + \frac{1+m}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) \right)}{\partial m} \\
&= -\beta m - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) + \frac{1-m}{2} \frac{1}{\frac{1-m}{2}} \left(-\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) + \frac{1+m}{2} \frac{1}{\frac{1+m}{2}} \frac{1}{2} \\
&= -\beta m - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) + \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) \\
&= -\beta m + \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{1-m} \right) \\
&= -\beta m + \tanh^{-1}(m) \stackrel{!}{=} 0
\end{aligned}$$

Dementsprechend ergibt sich die sog. **Mean-Field Gleichung** als Bedingung für die Extremstellen:

$$\Rightarrow m = \tanh(\beta m) \quad (2.5)$$

Aus dieser Form lassen sich gewisse Eigenschaften über die Lösungen ablesen. Da $\tanh(\beta m)$ stetig ist und es gilt $\lim_{m \rightarrow \infty} \tanh(\beta m) = 1$, sowie $\lim_{m \rightarrow -\infty} \tanh(\beta m) = -1$ gibt es immer mindestens eine Lösung. Wie man in der unteren Graphik 2.3 sieht, hängt die Anzahl der Lösungen davon ab, ob $\beta > \beta_c = 1$ oder $\beta \leq \beta_c = 1$ gilt. Falls $\beta \leq \beta_c$ gilt, so hat 2.5 eine eindeutige Lösung in $m = 0$. Falls jedoch $\beta > \beta_c$ gilt, so existieren abgesehen von der trivialen Lösung $m = 0$ zwei andere Lösungen $m_+^*(\beta) > 0$ und $m_-^*(\beta) < 0$ mit $m_-^*(\beta) = -m_+^*(\beta)$ im symmetrischen Fall $h = 0$.

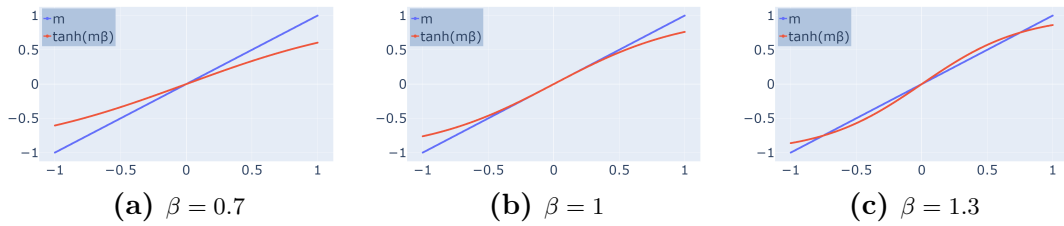


Abbildung 2.3: Funktionen $\tanh(\beta m)$ in rot ● und m in blau ● mit $N = 100000$

Mithilfe der zweiten Ableitung lassen sich Aussagen über Hoch- oder Tiefpunkte treffen:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 I_{\beta,0}(m)}{\partial m^2} &= \frac{\partial(-\beta m + \tanh^{-1}(m))}{\partial m} \\ &= \frac{1}{1-m^2} - \beta\end{aligned}$$

Nach Erwartung durch 2.2 unterscheiden sich die drei Fälle:

$\beta < 1$ Der einzige Extrempunkt in $m = 0$ liefert mit $1 - \beta > 0$ ein Minimum.

$\beta = 1$ Der einzige Extrempunkt in $m = 0$ liefert mit $1 - \beta = 0$, $\frac{\partial^3 I_{\beta,0}(m)}{\partial m^3}|_{m=0} = 0$, $\frac{\partial^4 I_{\beta,0}(m)}{\partial m^4}|_{m=0} > 0$ ebenfalls ein Minimum [20, vgl. S. 233].

$\beta > 1$ Der Extrempunkt in $m = 0$ liefert mit $1 - \beta < 0$ ein Maximum.

Die Punkte $m \neq 0$ werden wie folgt mit $\beta = \frac{\tanh^{-1}(m)}{m}$ aus 2.5 betrachtet:

$$\begin{aligned}-\beta + \frac{1}{1-m^2} &= -\frac{\tanh^{-1}(m)}{m} + \frac{1}{1-m^2} \\ \text{Mit Reihendarstellung } \tanh^{-1}(m) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{m^{2k+1}}{2k+1} \\ &= -\frac{m + \frac{m^3}{3} + \frac{m^5}{5} + \frac{m^7}{7} \dots}{m} + \frac{1}{1-m^2} \\ &= \left(-1 - \frac{m^2}{3} - \frac{m^4}{5} - \frac{m^6}{7} \dots\right) + \frac{1}{1-m^2} \stackrel{!}{>} 0 \\ &\Leftrightarrow \left(1 + \frac{m^2}{3} + \frac{m^4}{5} + \frac{m^6}{7} \dots\right) < \frac{1}{1-m^2} \\ &\Leftrightarrow \left(1 + \frac{m^2}{3} + \frac{m^4}{5} + \frac{m^6}{7} \dots\right) - \left(m^2 + \frac{m^4}{3} + \frac{m^6}{5} + \frac{m^8}{7} \dots\right) < 1 \\ &\Leftrightarrow 1 + \underbrace{\left(\frac{m^2}{3} - m^2\right)}_{<0} + \underbrace{\left(\frac{m^4}{5} - \frac{m^4}{3}\right)}_{<0} + \underbrace{\left(\frac{m^6}{7} - \frac{m^6}{5}\right)}_{<0} \dots < 1\end{aligned}$$

Daher handelt es sich bei den Extrema in $m_{\pm}^*(\beta)$ um Minima.

Durch Aussage 2.2 erhält man die bereits diskutierte exponentielle Konvergenz hin zu den soeben berechneten Minima. Demnach mussten die Häufungspunkte in diesem Beweis nur lokalisiert werden, damit die Aussage des Satzes folgt. \square

2.2 Eigenschaften für große N für ein beliebig starkes externes Magnetfeld

In diesem Kapitel wird mit h (dem externen Magnetfeld) beliebig der verallgemeinerte/uneingeschränkte Fall [10, vgl. Kapitel 2.3] der Hamilton-Funktion betrachtet. Ziel ist es also, nach Berechnung und Analyse des asymmetrischen Falls auch Aussagen über folgende Fälle treffen zu können:

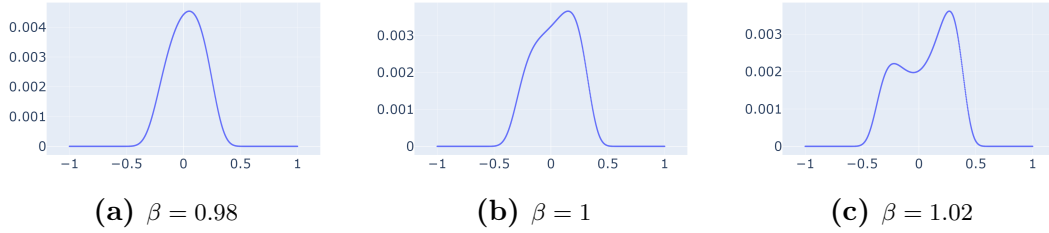


Abbildung 2.4: Gibbs-Maß $\mu_{N,\beta,h}(m_N)$ mit $N = 1000$ und $h = 0.001$

Sehr ähnlich zu den bisherigen Sätzen werden zunächst die Eigenschaften für die Konvergenz des Gibbs-Maßes für den Fall h beliebig berechnet. Die Vorgehensweise erweist sich als recht analog zu dem Fall $h = 0$.

Satz 2.2.1. *Der magnetische Druck $\Psi_\beta(h)$ 1.2.5 gleicht der Legendre-Transformation A.1.1 der freien Energie:*

$$\Psi_\beta(h) = \max_{m \in [-1,1]} (hm - f_\beta(m)) \quad (2.6)$$

Sei die Mean-Field Gleichung als Bedingung für die Extremstellen von $I_{\beta,h}(m)$ für den Fall, dass h beliebig ist, bestimmt durch:

$$\tanh(\beta m + h) = m \quad (2.7)$$

Beweis. Durch die folgende Darstellung der Zustandssumme:

$$Z_{N,\beta,h} = \sum_{m \in A_N} \sum_{\substack{\sigma \in \Sigma_N: \\ m_N(\sigma) = m}} e^{-H_{N,\beta,h}} = \sum_{m \in A_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{(hm + \frac{\beta}{2}m^2)N}$$

lassen sich erneut die Abschätzungen 2.1 anwenden. Dadurch erhält man die Abschätzung nach oben:

$$\begin{aligned}
Z_{N,\beta,h} &= \sum_{m \in A_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{(hm + \frac{\beta}{2}m^2)N} \\
&\leq \sum_{m \in A_N} c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{N(s(m) + hm + \frac{\beta}{2}m^2)} \\
&= \sum_{m \in A_N} c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{N(hm - f_\beta(m))} \\
&\leq (N+1) c_+ N^{\frac{1}{2}} e^{N \max_{m \in [-1,1]} (hm - f_\beta(m))}
\end{aligned}$$

und es folgt

$$\begin{aligned}
&\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) \\
&\leq \limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} (\log(c_+) + \log(N^{\frac{1}{2}}) + \log(N+1) + N \max_{m \in [-1,1]} (hm - f_\beta(m))) \\
&= \max_{m \in [-1,1]} (hm - f_\beta(m)).
\end{aligned}$$

Die Abschätzung nach unten nutzt die Stetigkeit von $hm - f_\beta(m) = hm + \frac{\beta}{2}m^2 + s(m)$ auf $m \in [-1, 1]$ aus.

Man findet $\tilde{m} = \arg \max_{m \in [-1,1]} (hm - f_\beta(m))$ und durch die Konvergenz von $\arg \max_{m_N \in A_N} (hm_N - f_\beta(m_N))$ in N erhält man $\forall \epsilon > 0 \exists n \in \mathbb{N}$. Daher gilt für alle $N > n$ mit $m_N = \arg \max_{m_N \in A_N} (hm_N - f_\beta(m_N))$ die Abschätzung $|hm_N - f_\beta(m_N) - (h\tilde{m} - f_\beta(\tilde{m}))| \leq \epsilon$.

Dieses Resultat lässt sich in die Partitionssumme einsetzen und wie folgt abschätzen:

$$\begin{aligned}
Z_{N,\beta,h} &= \sum_{m_N \in A_N} \binom{N}{\frac{1+m_N}{2}N} e^{(hm_N + \frac{\beta}{2}m_N^2)N} \\
&\geq c_- N^{-\frac{1}{2}} e^{N(h\tilde{m} - f_\beta(\tilde{m}) - \epsilon)}
\end{aligned}$$

Daraus folgt die untere Schranke:

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) \geq \max_{m \in [-1,1]} (hm - f_\beta(m) - \epsilon)$$

Da ϵ beliebig gewählt wurde, folgt durch $\epsilon \downarrow 0$ die Behauptung 2.6.

Zunächst wird die Mean-Field Gleichung für ein beliebiges magnetisches Feld h gezeigt.

An dieser Stelle sei erinnert an 2.4

$$I_{\beta,h}(m) = f_{\beta}(m) - hm - \left(\min_{\tilde{m} \in [-1,1]} f_{\beta}(\tilde{m}) - h\tilde{m} \right).$$

Äquivalent zu dem Fall $h = 0$ werden die Nullstellen/Minima der Funktion gesucht. Es gilt, dass $I_{\beta,h}$ stetig ist und $I_{\beta,h} \geq 0$. Der Unterschied liegt nun darin, dass mehrere lokale Minima entstehen können, jedoch nur das globale Minimum relevant ist.

$$\begin{aligned} \frac{\partial I_{\beta,h}(m)}{\partial m} &= \frac{\partial f_{\beta}(m) - hm - \min_{\tilde{m} \in [-1,1]} (f_{\beta}(\tilde{m}) - h\tilde{m})}{\partial m} = \frac{\partial f_{\beta}(m) - hm}{\partial m} \\ &= \frac{\partial \left(-\frac{\beta}{2}m^2 + \frac{1-m}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) + \frac{1+m}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) - hm \right)}{\partial m} \\ &= -\beta m - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) + \frac{1-m}{2} \frac{1}{\frac{1-m}{2}} \left(-\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) \\ &\quad + \frac{1+m}{2} \frac{1}{\frac{1+m}{2}} \frac{1}{2} - h \\ &= -\beta m - \frac{1}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) + \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) - h \\ &= -\beta m + \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+m}{1-m} \right) - h \\ &= -\beta m - h + \tanh^{-1}(m) \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow m^* = \tanh(\beta m^* + h)$$

Dies liefert die zweite Behauptung 2.7.

□

Die Mean-Field Gleichung (2.7) lässt sich ähnlich wie im Fall $h = 0$ untersuchen.

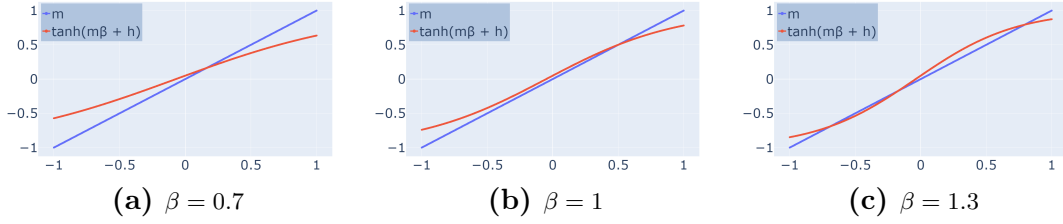


Abbildung 2.5: Funktionen $\tanh(\beta m + h)$ in rot ● und m in blau ● mit $N = 100000$ und $h = 0.05$

Man sieht durch die Geometrie, dass die Kurven von $\tanh(\beta m + h)$ und m sich im Fall $\beta \leq 1$ wie im Fall $h = 0$ nur einmal schneiden und im Fall $\beta > 1$ bis zu drei mal schneiden können, also drei Extrempunkte existieren.

Dies lässt sich offensichtlich auch in der Darstellung von $I_{\beta,h}(m)$ erkennen. Hier existieren mit $\beta > \beta_c = 1$ mit kleinem externen Magnetfeld also mehrere Extrempunkte.

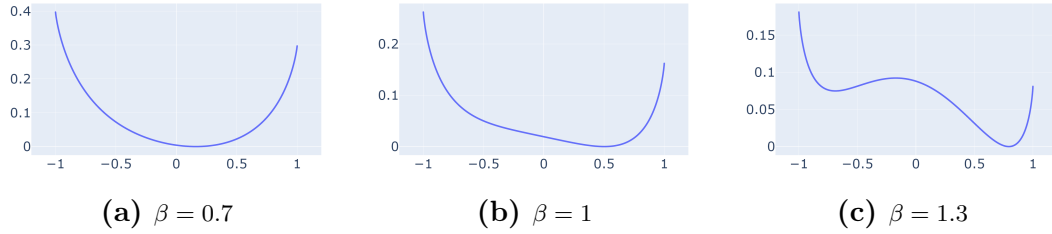


Abbildung 2.6: Funktion $I_{\beta,h}(m)$ mit $N = 100000$ und $h = 0.05$

Nun folgt die Analyse der 2. Ableitung $\frac{\partial^2 I_{\beta,h}(m)}{\partial m^2} = -\beta + \frac{1}{1-m^2}$ für die Aussagen über Minima/Maxima.

$\beta < 1$ Das einzige Extremum ist durch $-\beta + \frac{1}{1-m^2} > 0 \forall m \in (-1, 1)$ ein Minimum.

$\beta = 1$ Das einzige Extremum ist durch $m \neq 0$ für $h \neq 0$, also $-1 + \frac{1}{1-m^2} > 0$, ein Minimum.

$\beta > 1$ Dies ist der interessante Fall. Wenn man von dem Zustand in $h = 0$ ausgeht (Analyse in 2.1) und h nun nach oben verschiebt, erhält man mit $m \neq 0$ und $\beta = \frac{\tanh^{-1}(m)-h}{m}$

$$-\beta + \frac{1}{1-m^2} = -\frac{\tanh^{-1}(m)}{m} + \frac{1}{1-m^2} + \frac{h}{m} \stackrel{?}{\geq} 0$$

keine eindeutige Aussage. Jedoch gilt für $m_+^*(\beta) > 0, m_-^*(\beta) < 0$:

$$h \uparrow \Rightarrow m_+^*(\beta) \uparrow, m_-^*(\beta) \downarrow$$

Daher liegt mit $h > 0$ das eindeutige globale Minimum in $m_+^*(\beta)$ und für den Fall $h < 0$ genau umgekehrt in $m_-^*(\beta)$. Die anderen Extrempunkte außer dem globalen Minimum existieren nur, falls h nah genug an 0 liegt und verschwinden im Grenzwert $\lim_{h \rightarrow \pm\infty}$.

Da für die Konvergenz des Gibbs-Maßes nur das globale Minimum von $I_{\beta,h}(m)$ relevant ist, wird folgende Funktion eingeführt:

$$m_\beta(h) = \arg \min_{m \in (-1,1)} I_{\beta,h}(m) = \begin{cases} m_+^*(\beta) & h \geq 0 \\ m_-^*(\beta) & h < 0 \end{cases} \quad (2.8)$$

Diese Funktion gibt das Argument des Maximums des Gibbs-Maßes, also das Minimum/die Nullstelle der Funktion $I_{\beta,h}(m)$ zurück.

Demnach gilt für den Fall $\beta \leq \beta_c$ Gleichheit der Grenzwerte

$$\lim_{h \uparrow \infty} m_\beta(h) = \lim_{h \downarrow \infty} m_\beta(h) = 0.$$

Jedoch gilt für den Fall $\beta > \beta_c$ die Ungleichheit

$$\lim_{h \uparrow \infty} m_\beta(h) = m_-^*(\beta) < 0 < m_+^*(\beta) = \lim_{h \downarrow \infty} m_\beta(h).$$

Korollar 2.2.2. *Mit den Gleichungen 2.6 und 2.7 lässt sich der magnetische Druck explizit berechnen [10, vgl. Aufgabe 2.4]:*

$$\begin{aligned} \Psi_\beta(h) &= -\frac{\beta}{2} m_\beta(h)^2 + \log(\cosh(\beta m_\beta(h) + h)) + \log(2) \\ &= h m_\beta(h) - f_\beta(m_\beta(h)) \\ &= -I_{\beta,h}(m) - \left(\min_{\tilde{m} \in [-1,1]} f_\beta(\tilde{m}) - h \tilde{m} \right) \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dementsprechend maximiert $m_\beta(h)$ den magnetischen Druck.

Beweis. In der folgenden Berechnung werden folgende Werkzeuge und Definitionen benutzt:

- (i) $m_\beta(h) = \arg \max_{m \in [-1,1]}(hm - f_\beta(m))$
- (ii) Definition freie Energie 1.2.4
- (iii) Mean-Field Gleichung für die Extremstellen $m_\beta(h) = \tanh(\beta m_\beta(h) + h)$ 2.7
- (iv) Aus Notationsgründen wird $x = \beta m_\beta(h) + h$ und $y = hm_\beta(h) + \frac{\beta}{2}m_\beta(h)^2$ substituiert
- (v) $\tanh(x) = 1 - \frac{2}{e^{2x}+1}$

$$\begin{aligned}
 \Psi_\beta(h) &= \max_{m \in [-1,1]} (hm - f_\beta(m)) \\
 &\stackrel{(i),(ii),(iv)}{=} y - \frac{1 - m_\beta(h)}{2} \log \left(\frac{1 - m_\beta(h)}{2} \right) - \frac{1 + m_\beta(h)}{2} \log \left(\frac{1 + m_\beta(h)}{2} \right) \\
 &\stackrel{(iii),(iv)}{=} y - \frac{1 - m_\beta(h)}{2} \log \left(\frac{1 - \tanh(x)}{2} \right) - \frac{1 + m_\beta(h)}{2} \log \left(\frac{1 + \tanh(x)}{2} \right) \\
 &\stackrel{(v)}{=} y - \frac{1 - m_\beta(h)}{2} \log \left(\frac{1}{e^{2x} + 1} \right) - \frac{1 + m_\beta(h)}{2} \log \left(1 - \frac{1}{e^{2x} + 1} \right) \\
 &= y - \frac{1 - m_\beta(h)}{2} \log \left(\frac{1}{e^{2x} + 1} \right) - \frac{1 + m_\beta(h)}{2} \log \left(\frac{e^{2x}}{e^{2x} + 1} \right) \\
 &= y + \frac{1 - m_\beta(h)}{2} \log(e^{2x} + 1) - \frac{1 + m_\beta(h)}{2} (\log(e^{2x}) - \log(e^{2x} + 1)) \\
 &= y + \left(\frac{1 - m_\beta(h)}{2} + \frac{1 + m_\beta(h)}{2} \right) \log(e^{2x} + 1) - \frac{1 + m_\beta(h)}{2} (2x) \\
 &= y + \log(e^{2x} + 1) - x - m_\beta(h)^2 \beta - m_\beta(h)h \\
 &\stackrel{(iv)}{=} -\frac{\beta}{2}m_\beta(h)^2 + \log(e^{2x} + 1) - x \\
 &= -\frac{\beta}{2}m_\beta(h)^2 + \log(e^x + e^{-x}) \\
 &\stackrel{(iv)}{=} -\frac{\beta}{2}m_\beta(h)^2 + \log(\cosh(\beta m_\beta(h) + h)) + \log(2)
 \end{aligned}$$

□

Demnach wurde das Hauptziel erreicht und eine explizite Formel für den magnetischen Druck $\Psi_\beta(h)$ gefunden. Außerdem wurde gezeigt, dass dieser in $m_\beta(h)$ maximiert wird und die Konvergenzrate in N exponentiell ist.

2.3 Phasenübergang

Das folgende Kapitel dient der Analyse des Phasenübergangs, dargestellt in Abbildung 2.8, der Funktion $m_\beta(h)$ und somit auch der des magnetischen Drucks $\Psi_\beta(h)$. Wie man in den obigen Berechnungen und Argumentationen für die Hoch-/Tiefpunkte der Funktion $I_{\beta,h}(m)$ schon gesehen hat, sind die Anzahl und der Ort der Minima abhängig von den Werten β und h . Aus dem selben Grund, wie in Abbildung 2.5 werden weiterhin die Fälle $\beta \leq \beta_c$ und $\beta > \beta_c$ unterschieden.

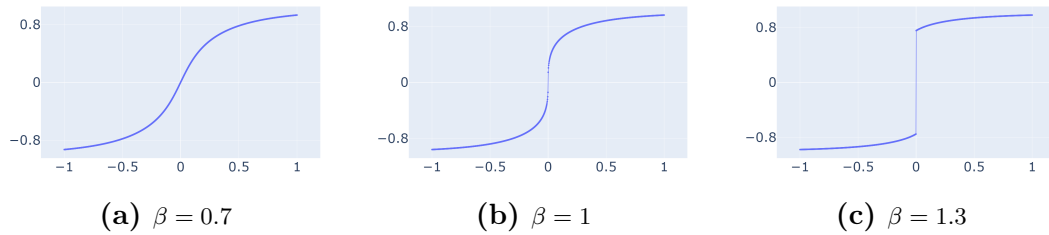


Abbildung 2.7: Funktion $m_\beta(h)$ mit $N = 10000$

Dies sind durch die konstante Wahl von β nur Querschnitte aus einem 3D-Graphen mit den ausgewählten Werten $\beta = 0.7$, $\beta = 1$, $\beta = 1.3$. Hier folgt der gesamte 3D-Graph für $m_\beta(h) = m(\beta, h)$:

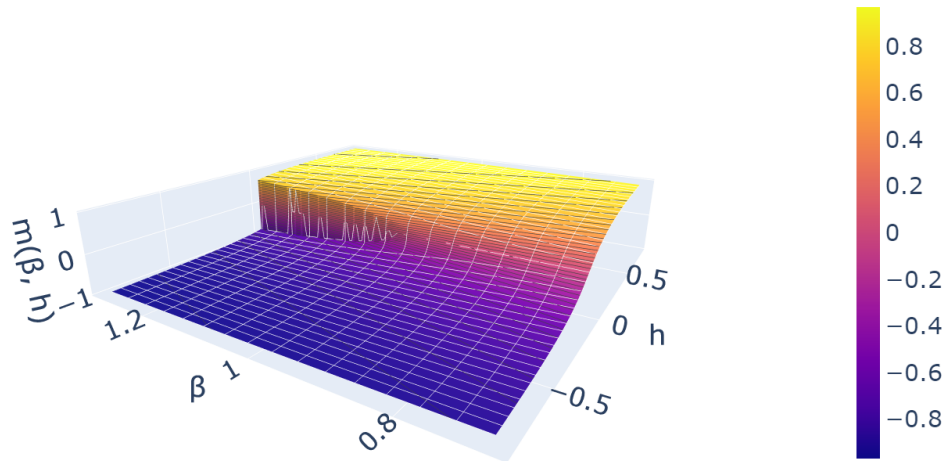


Abbildung 2.8: Funktion $m(\beta, h)$ mit $N = 10000$ in 3 Dimensionen mit $h \in [-8, 8]$, $\beta \in [0.7, 1.3]$

Wie man erkennen kann und wie man auch zuvor bereits an der Definition von $m_\beta(h)$ und den Lösungen der Mean-Field Gleichung (2.7) erkennen konnte, entsteht im Fall $\beta > \beta_c$ ein Phasenübergang an der Stelle $h = 0$. Dieser wird im Folgenden etwas genauer betrachtet.

Definition 2.3.1. (*analytische Funktion*)

Sei $A \subseteq \mathbb{C}$ eine offene Teilmenge. Eine Funktion $f : A \rightarrow \mathbb{C}$ heißt **analytisch** im Punkt $x_0 \in A$, wenn sie durch eine Potenzreihe approximiert werden kann:

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^k a_n (x - x_0)^n = f(x_0)$$

Ist eine Funktion analytisch in jedem Punkt in A , so nennt man die Funktion *analytisch*.

Außerdem ist jede analytische Funktion unendlich oft differenzierbar, was direkt durch die Approximation als Potenzreihe folgt.

Lemma 2.3.2. Die Funktion $h \mapsto m_\beta(h)$ ist auf $(-\infty, 0)$ und auf $(0, \infty)$ analytisch [10, vgl. Aufgabe 2.3].

Beweis. Der Beweis erfolgt durch Anwendung des Satzes der impliziten Funktion A.1.3 mit der folgenden Funktion F auf den offenen Mengen $U_1 = (-\infty, 0)$ und $U_2 = (0, \infty)$ und der Menge $V = (-1, 1)$.

Sei $\forall \beta > 0$ die analytische Funktion $F : (U_1, V) \rightarrow \mathbb{R}, (h, m) \mapsto -\beta m - h + \tanh^{-1}(m)$ definiert.

So gilt die Existenz des globalen Minimums bei festem $\beta > 0$:

$$\forall h_0 \in U_1 \exists m_\beta(h_0) \in (-1, 1).$$

Demnach gilt nach (2.7)

$$F(h_0, m_\beta(h_0)) = 0 \text{ und } \frac{\partial F(h, m)}{\partial m} \Big|_{(h_0, m_\beta(h_0))} = -\beta + \frac{1}{1 - m_\beta^2(h_0)} \neq 0.$$

Also ist die Funktion $m_\beta(h)$ analytisch auf U_1 . Mit der offenen Menge U_2 verläuft der Beweis analog. \square

Da die Komposition analytischer Funktionen ebenfalls analytisch ist und durch die Tatsache, dass $m \rightarrow f_\beta(m)$ auf $(-1, 1)$ analytisch ist, folgt, dass $\Psi_\beta(h) = hm_\beta(h) - f_\beta(m_\beta(h))$ ebenfalls analytisch auf $(-\infty, 0) \cup (0, \infty)$ ist.

Demnach lässt sich für den Fall $h \neq 0$ die Differenzierbarkeit ausnutzen und man erhält:

$$\frac{\partial \Psi_\beta(h)}{\partial h} = m_\beta(h)$$

Da die Funktion $\Psi_\beta(h)$ als Legendre Transformation 2.6 dargestellt werden kann und $f_\beta(m)$ streng konvex ist, gilt, dass $\Psi_\beta(h)$ ebenfalls konvex ist A.1.1. Somit sind die einseitigen Ableitungen wohldefiniert und es gilt, falls $\beta \leq \beta_c$:

$$\begin{aligned} \lim_{h \uparrow 0} \frac{\partial \Psi_\beta(h)}{\partial h} &= \lim_{h \uparrow 0} m_\beta(h) = 0 \\ \lim_{h \downarrow 0} \frac{\partial \Psi_\beta(h)}{\partial h} &= \lim_{h \downarrow 0} m_\beta(h) = 0 \end{aligned}$$

Somit ist $\Psi_\beta(h)$ für den Fall $\beta \leq \beta_c$ auch in $h = 0$ differenzierbar.

Betrachtet man den Fall $\beta > \beta_c$, so gilt:

$$\lim_{h \uparrow 0} \frac{\partial \Psi_\beta(h)}{\partial h} = m_-^*(\beta) < 0 < m_+^*(\beta) = \lim_{h \downarrow 0} \frac{\partial \Psi_\beta(h)}{\partial h}$$

Daher ist $\Psi_\beta(h)$ im Fall $\beta > \beta_c$, wie bereits durch Abbildung 2.8 vermutet, nicht in $h = 0$ differenzierbar.

3 | Alternative Lösungsstrategien des Curie-Weiß Ising Modells

Im folgenden Kapitel werden weitere Lösungsstrategien zur Berechnung der Mean-Field Gleichung (2.7) und des magnetischen Drucks 2.2.2, wie bereits in Kapitel 2 ausführlich mit der Kombinatorik-Methode, vorgestellt.

Genauer umfasst das Kapitel drei Strategien mit jeweils schönen und sehr unterschiedlichen Herangehensweisen, die zusammen die Breite der mathematischen Möglichkeiten, die das Curie-Weiß Modell bietet, widerspiegeln.

Zu Beginn wird eine Approximationsmethode [10, Kapitel 2.5.2, 1. Teil], [18] mithilfe der Laplace-Transformation vorgestellt. Daraufhin folgt eine stochastische Methode [10, vgl. Kapitel 2.5.2, 2. Teil] mithilfe der Methode von Stein für austauschbare Paare [21]. Zum Schluss des Kapitels wird eine Herangehensweise vorgestellt, die mithilfe von Interpolation auf die Subadditivität des magnetischen Drucks schließen lässt. Daraus wird die Existenz des Grenzwerts abgeleitet und man erhält über die Konvergenz einer oberen und unteren Schranke das gewünschte Ziel der berechneten magnetischen Druck-Gleichung [3], [12]. Diese Methode wird durch einen alternativen Ansatz mithilfe der sog. Cavity-Methode ergänzt.

3.1 Hubbard-Stratonovich Transformation

Diese Methode aus [10, Kapitel 2.5.2, 1. Teil] und [18] benutzt eine schlaue Transformation des Exponenten (genannt Hubbard-Stratonovich Transformation [15]), um eine Ordnungsreduktion von $\sum_{i=1}^N \sigma_i$ zu erhalten. Auf diese Form lässt sich daraufhin die Laplace-Methode [16] anwenden und man kann die kritischen Werte für den Phasenübergang berechnen.

Lemma 3.1.1. (*Hubbard-Stratonovich Transformation*)

Es gilt die Hubbard-Stratonovich Transformation, also gilt für alle $\alpha > 0$:

$$e^{\alpha x^2} = \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{\alpha} + 2yx} dy. \quad (3.1)$$

Beweis. Wir nutzen folgendes Hilfsmittel:

(i) Gaußsche Errorfunktion [1, S. 297]:

$$\operatorname{erf}(b) - \operatorname{erf}(a) = \int_a^b \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\tau^2} d\tau$$

Für die Grenzen $b = \infty$, $a = -\infty$ gelte $\operatorname{erf}(b) - \operatorname{erf}(a) = 2$.

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{y^2}{\alpha} + 2yx} dy &= \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\frac{y}{\sqrt{\alpha}} - \sqrt{\alpha}x)^2 + \alpha x^2} dy \\ &\left[\begin{array}{l} \text{Substitution:} \\ u = \frac{y}{\sqrt{\alpha}} - \sqrt{\alpha}x \Rightarrow \frac{du}{dy} = \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \Rightarrow dy = \sqrt{\alpha} du \end{array} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi\alpha}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} e^{\alpha x^2} \sqrt{\alpha} du \\ &= \frac{1}{2} e^{\alpha x^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-u^2} du \\ &\stackrel{(i)}{=} \frac{1}{2} e^{\alpha x^2} (\operatorname{erf}(\infty) - \operatorname{erf}(-\infty)) \\ &\stackrel{(i)}{=} e^{\alpha x^2} \end{aligned}$$

□

Diese Transformation lässt sich offensichtlich auf die Partitionssumme anwenden:

$$\begin{aligned} Z_{N,\beta,h} &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} e^{-H_{N,\beta,h}(\sigma)} \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} e^{\frac{\beta}{2N} (\sum_{i=1}^N \sigma_i)^2 + h \sum_{i=1}^N \sigma_i} \\ &\stackrel{3.1.1}{=} \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sqrt{\frac{2N}{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2N}{\beta} y^2 + (2y+h) \sum_{i=1}^N \sigma_i} dy \\ &= \sqrt{\frac{2N}{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2Ny^2}{\beta}} \prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i \in \{\pm 1\}} e^{(2y+h)\sigma_i} dy \\ &= \sqrt{\frac{2N}{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2Ny^2}{\beta}} \left(e^{2y+h} + e^{-2y-h} \right)^N dy \\ &= \sqrt{\frac{2N}{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{2Ny^2}{\beta}} (2 \cosh(2y+h))^N dy \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sqrt{\frac{2N}{\pi\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-N(\frac{2y^2}{\beta} - \log(2 \cosh(2y+h)))} dy \\
 &\quad \left[\begin{array}{l} \text{Substitution mit:} \\ y = \frac{m\beta}{2} \Rightarrow dy = \frac{\beta}{2} dm \end{array} \right] \\
 &= \sqrt{\frac{2N}{\pi\beta}} \frac{\beta}{2} \int_{m(-\infty)}^{m(\infty)} e^{-N(\frac{\beta}{2}m^2 - \log(2 \cosh(m\beta+h)))} dm \\
 &= \sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-N(\frac{\beta}{2}m^2 - \log(2 \cosh(m\beta+h)))} dm
 \end{aligned}$$

Die Funktion $\frac{\beta}{2}m^2 - \log(2 \cosh(m\beta + h))$ ist aus 2.2.2 bekannt und es wurde bereits gezeigt, dass sie durch $m_\beta(h)$ aus (2.8) minimiert wird. Da es keine Extrema außerhalb von $(-1, 1)$ gibt, kann man statt $m_N \in (-1, 1)$ auch $m \in \mathbb{R}$ betrachten und man erhält selbige Aussage.

Mit diesem Wissen kann man nun in der weiteren Berechnung, ebenso wie in [18], die sog. Laplace Methode (gezeigt in A.1.4) verwenden. Ab sofort wird dazu wieder der Grenzwert $\lim_{N \rightarrow \infty}$ betrachtet:

Mit der exponentiellen Konvergenz gegen das Minimum

$$m_\beta(h) = \arg \min_{m \in \mathbb{R}} \left(\frac{\beta}{2}m^2 - \log(2 \cosh(m\beta + h)) \right)$$

lässt sich also die Laplace Methode verwenden.

(i) Es wird aus Notationsgründen definiert: $\phi_{\beta,h}(m) = \frac{\beta}{2}m^2 - \log(2 \cosh(m\beta + h))$

(ii) Laplace Methode A.1.4 mit $x^* = \arg \min_{x \in \mathbb{R}}(g(x))$:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int_a^b f(x) e^{-Ng(x)} dx = \lim_{N \rightarrow \infty} e^{-Ng(x^*)} f(x^*) \sqrt{\frac{2\pi}{Ng''(x^*)}}$$

$$\begin{aligned}
 &\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) \\
 &\stackrel{(i)}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(\sqrt{\frac{\beta N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\phi_{\beta,h}(m)} dm \right) \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-N\phi_{\beta,h}(m)} dm \right) \\
 &\stackrel{(ii)}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(e^{-N\phi_{\beta,h}(m_\beta(h))} \sqrt{\frac{2\pi}{N\phi''_{\beta,h}(m_\beta(h))}} \right) \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} (-N\phi_{\beta,h}(m_\beta(h))) + \frac{1}{N} \log \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \right) + \frac{1}{N} \log \left(\sqrt{\frac{2\pi}{\phi''_{\beta,h}(m_\beta(h))}} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= -\phi_{\beta,h}(m_{\beta}(h)) \\
 &\stackrel{(i)}{=} -\frac{\beta}{2}m_{\beta}(h)^2 + \log(\cosh(m_{\beta}(h)\beta + h)) + \log(2)
 \end{aligned}$$

Man erhält die Lösung in 2.2.2.

3.2 Austauschbare Paare von Stein

Die folgende Lösungsstrategie, welche von Charles Stein eingeführt wurde [21], beruht auf der Wahl eines neuen Objektes σ' . Mit diesem neuen Zustand σ' kann man nun recht schnell die Mean-Field Gleichung (2.7) berechnen. Daraufhin wird mithilfe der Austauschbarkeit der Zustände

$$\mathbb{P}[(\sigma = \alpha), (\sigma' = \gamma)] = \mathbb{P}[(\sigma = \gamma), (\sigma' = \alpha)],$$

wobei $\alpha, \gamma \in \Sigma_N$ feste Spinkonfigurationen sind, und einer geschickten stochastischen Abschätzung über σ' , auch die stochastische Konvergenz des echten σ hingegen der Mean-Field Gleichung gezeigt.

Dieses Kapitel orientiert sich weiterhin an der Ausarbeitung in [10, Kapitel 2.5.2, 2. Teil] und es wurde zum Vergleich die Quelle [6] herangezogen.

Definition 3.2.1. *Es sei ein neues Maß \mathbb{P} definiert auf $\Sigma_N \times \Sigma_N$, indem (σ, σ') wie folgt gewählt wird:*

- (i) σ ist, wie gewohnt, gemäß dem Gibbs-Maß $\mu_{N,\beta,h}$ verteilt
- (ii) ein Index $I \in \{1, \dots, N\}$ wird gleichverteilt mit Wahrscheinlichkeit $\frac{1}{N}$ für alle $i \in \{1, \dots, N\}$ gezogen und festgehalten
- (iii) es wird $\sigma'_j = \sigma_j \forall j \neq I$ festgesetzt und man zieht σ'_I abhängig von den anderen σ_j mit $j \neq I$ aus dem neu definierten Maß \mathbb{P} . Dieses ergibt sich als Summe aller Wahrscheinlichkeiten über das Gibbs-Maß einen Zustand mit dem Spin σ_I zu erreichen. So erhält man diesen Spin mit folgender Wahrscheinlichkeit, welche zunächst auch logisch hergeleitet wird:

Lemma 3.2.2. *Die Wahrscheinlichkeitsverteilung für σ'_I ist gegeben durch:*

$$\begin{aligned}\mathbb{P}[\sigma'_I = +1] &= \frac{e^{\beta\hat{m}_I(\sigma)+h}}{e^{\beta\hat{m}_I(\sigma)+h} + e^{-\beta\hat{m}_I(\sigma)-h}} \\ \mathbb{P}[\sigma'_I = -1] &= 1 - \mathbb{P}[\sigma'_I = +1]\end{aligned}$$

mit

$$\hat{m}_i := \hat{m}_i(\sigma) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \sigma_j \quad (3.2)$$

Die Abhängigkeit der Spin-Anzahl N sei an dieser Stelle aus Notationsgründen vernachlässigt, da sie nicht variiert wird.

Beweis. Zunächst wird die Summe $\sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j$ wie folgt umgeformt:

$$\begin{aligned}\sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j &= \sum_{i=1}^N \sigma_i \cdot \sum_{j=1}^N \sigma_j \\ &= \sigma_I \sum_{j=1}^N \sigma_j + \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq I}}^N \sigma_i \cdot \sum_{j=1}^N \sigma_j \\ &= 1 + \sigma_I \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq I}}^N \sigma_j + \sigma_I \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq I}}^N \sigma_i + \left(\sum_{\substack{i=1 \\ i \neq I}}^N \sigma_i \right)^2 \\ &= 1 + 2\sigma_I N \hat{m}_I(\sigma) + (N \hat{m}_I(\sigma))^2\end{aligned}$$

Damit kann man nun berechnen:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}[\sigma'_I = +1] &:= \mu_{N,\beta,h}(\{\sigma : \sigma_I = +1\}) \\ &= \frac{\sum_{\sigma \in \Sigma_N : \sigma_I = +1} \exp(-H_{N,\beta,h}(\sigma))}{Z_{N,\beta,h}} \\ &= \frac{\sum_{\sigma \in \Sigma_N : \sigma_I = +1} \exp\left(\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j\right)}{\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp\left(\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j + h \sum_{i=1}^N \sigma_i\right)} \\ &= \frac{\sum_{\sigma \in \Sigma_N : \sigma_I = +1} \exp\left(\frac{\beta}{2N} (1 + 2\sigma_I N \hat{m}_I(\sigma) + (N \hat{m}_I(\sigma))^2) + h N \hat{m}_I(\sigma) + h \sigma_I\right)}{\sum_{\sigma'_I = \pm 1} \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N : \sigma_I = \sigma'_I} \exp\left(\frac{\beta}{2N} (1 + 2\sigma_I N \hat{m}_I(\sigma) + (N \hat{m}_I(\sigma))^2) + h N \hat{m}_I(\sigma) + h \sigma_I\right) \right)} \\ &= \frac{\exp(\beta \hat{m}_I + h)}{\exp(\beta \hat{m}_I(\sigma) + h) + \exp(-\beta \hat{m}_I(\sigma) - h)}\end{aligned}$$

Hier wird im letzten Schritt folgender Term im Bruch weggekürzt, da die Gleichheit gilt:

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma \in \Sigma_N: \sigma_I = +1} \exp \left(\frac{\beta}{2N} (1 + (N\hat{m}_I(\sigma))^2) + h\hat{m}_I(\sigma) \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N: \sigma_I = -1} \exp \left(\frac{\beta}{2N} (1 + (N\hat{m}_I(\sigma))^2) + h\hat{m}_I(\sigma) \right) \end{aligned}$$

Die Gleichung für $\mathbb{P}[\sigma'_I = -1] = 1 - \mathbb{P}[\sigma'_I = +1]$ erhält man analog.

□

Durch 3.2.2 folgt unter anderem direkt:

$$\mathbb{E}[\sigma'_I] = \tanh(\beta\hat{m}_I + h)$$

Seien $\alpha, \gamma \in \Sigma_N$ feste Spinkonfigurationen, so kann man die Austauschbarkeit der Zustände

$$\mathbb{P}[(\sigma = \alpha), (\sigma' = \gamma)] \stackrel{!}{=} \mathbb{P}[(\sigma = \gamma), (\sigma' = \alpha)] \quad (3.3)$$

wie folgt zeigen:

1. Fall: Es gilt $\alpha_j \neq \gamma_j$ für mind. ein $j \in \{1, \dots, N\}$, $j \neq I$
Daher folgt sofort $\mathbb{P}[(\sigma = \alpha), (\sigma' = \gamma)] = 0 = \mathbb{P}[(\sigma = \gamma), (\sigma' = \alpha)]$.
2. Fall: Es gilt $\alpha = \gamma$ für alle $j \in \{1, \dots, N\}$, $j \neq I$
So muss also nur gelten $\mathbb{P}[(\sigma_I = \alpha_I), (\sigma'_I = \gamma_I)]$. Dies folgt direkt aus Wahl von σ'_I , da gilt $\mathbb{P}[\sigma'_I = +1] = \mathbb{P}[\sigma_I = +1]$ wie man in der vorherigen Berechnung sehen konnte (selbiges gilt für $\mathbb{P}[\sigma'_I = -1] = \mathbb{P}[\sigma_I = -1]$).

Man definiere die Summe der Differenzen der einzelnen Spins der beiden Zustände σ, σ' als

$$F(\sigma, \sigma') := \sum_{i=1}^N (\sigma_i - \sigma'_i)$$

und berechnet damit im folgenden Schritt:

$$f(\sigma) := \mathbb{E}[F(\sigma, \sigma') | \sigma]$$

Lemma 3.2.3. *Es gilt:*

$$f(\sigma) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma) + h)).$$

Beweis. Mit Verwendung von

(i) Regeln des bedingten Erwartungswertes [14, S. 207]

$$\begin{aligned} f(\sigma) &= \mathbb{E} [F(\sigma, \sigma') \mid \sigma] = \sum_{i=1}^N \mathbb{E} [(\sigma_i - \sigma'_i) \mid \sigma] \\ &\stackrel{(i)}{=} \sum_{i=1}^N \mathbb{E} [(\sigma_i - \sigma'_i) \mid \sigma, i = I] \mathbb{P}[i = I] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i - \mathbb{E} [\sigma'_i \mid i = I]) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i - \tanh(\beta \hat{m}_i + h)) \end{aligned}$$

□

Lemma 3.2.4. *Es gilt die Abschätzung:*

$$|f(\sigma) - f(\sigma')| \leq \frac{2 + 2\beta}{N}$$

Beweis.

$$\begin{aligned} |f(\sigma) - f(\sigma')| &= \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma_i - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma) + h)) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\sigma'_i - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma') + h)) \right| \\ &= \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \sigma_i - \sigma'_i + \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma') + h) - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma) + h) \right| \\ &\leq \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \sigma_i - \sigma'_i \right| + \left| \sum_{i=1}^N \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma') + h) - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma) + h) \right| \\ &\leq \frac{1}{N} \left(2 + \left| \sum_{i=1}^N \beta \hat{m}_i(\sigma') + h - \beta \hat{m}_i(\sigma) - h \right| \right) \\ &\leq \frac{1}{N} \left(2 + \beta \cdot \left| \sum_{i=1}^N \hat{m}_i(\sigma') - \hat{m}_i(\sigma) \right| \right) \\ &\leq \frac{2 + 2\beta}{N} \end{aligned}$$

□

Man kann sehen, dass für eine beliebige Funktion g auf Σ_N gilt:

- (i) Turmeigenschaft [14, S.207]
- (ii) Austauschbarkeit 3.3

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[f(\sigma)g(\sigma)] &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[F(\sigma, \sigma')] \cdot g(\sigma)] \\ &\stackrel{(i)}{=} \mathbb{E}[F(\sigma, \sigma')g(\sigma)] \\ &\stackrel{(ii)}{=} \mathbb{E}[F(\sigma', \sigma)g(\sigma')] \\ &= -\mathbb{E}[F(\sigma, \sigma')g(\sigma')]\end{aligned}$$

Mit dieser Gleichheit kann man Folgendes berechnen:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[f(\sigma)g(\sigma)] &= \frac{\mathbb{E}[F(\sigma, \sigma')g(\sigma)] - \mathbb{E}[F(\sigma, \sigma')g(\sigma')]}{2} \\ &= \frac{\mathbb{E}[F(\sigma, \sigma') \cdot (g(\sigma) - g(\sigma'))]}{2}\end{aligned}$$

Aus dieser Darstellung folgt einerseits sofort $\mathbb{E}[f] = 0$ und andererseits eine Abschätzung für die Varianz von f :

$$\text{Var}(f) = \mathbb{E}[f(\sigma)^2] = \frac{1}{2}\mathbb{E}[F(\sigma, \sigma') \cdot (f(\sigma) - f(\sigma'))] \leq \frac{2 + 2\beta}{N}$$

Demnach gilt mit der Tschebyscheff-Ungleichung [14, S. 163] für alle $\epsilon > 0$:

$$\mu_{N,\beta,h}(|f| \geq \epsilon) \leq \frac{\text{Var}[f]}{\epsilon^2} \leq \frac{2 + 2\beta}{N\epsilon^2}$$

Nun wird noch ein letztes Hilfsmittel bis zur Aussage über die Konvergenz von $m_N(\sigma)$ gegen die Extrema von $\tanh(\beta m_N(\sigma) + h)$ benötigt.

Da gilt $\sigma_i \in \{\pm 1\}$, folgt aus der Definition von $\hat{m}_i(\sigma)$ (3.2) und $m_N(\sigma)$ sofort

$$|\hat{m}_i(\sigma) - m_N(\sigma)| = \frac{1}{N} \forall i \in \{1, \dots, N\}.$$

Außerdem gilt $|\tanh(x) - \tanh(y)| \leq |x - y|$. Demnach lässt sich abschätzen:

$$\begin{aligned}
 & |f(\sigma) - (m_N(\sigma) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h))| \\
 &= \left| \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma) + h) - \sigma_i \right) + \tanh(\beta m_N(\sigma) + h) \right| \\
 &= \left| \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N \tanh(\beta m_N(\sigma) + h) - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma) + h) \right) \right| \\
 &\leq \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N |\tanh(\beta m_N(\sigma) + h) - \tanh(\beta \hat{m}_i(\sigma) + h)| \right) \\
 &\leq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\beta m_N(\sigma) + h - \beta \hat{m}_i(\sigma) - h| \\
 &= \frac{\beta}{N} \sum_{i=1}^N |m_N(\sigma) - \hat{m}_i(\sigma)| \\
 &\leq \frac{\beta}{N}
 \end{aligned}$$

Es folgt also die Konvergenz für die beiden Terme und man findet $\forall \epsilon > 0$ ein $N \in \mathbb{N}$, so dass gilt:

$$|f(\sigma) - (m_N(\sigma) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h))| \leq \frac{\beta}{N} \leq \epsilon$$

Mit der umgekehrten Dreiecksungleichung [17, S. 9] und Umstellung folgt somit:

$$\begin{aligned}
 & |m_N(\sigma) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h)| - |f(\sigma)| \\
 &\leq ||f(\sigma)| - |m_N(\sigma) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h)|| \\
 &\leq |f(\sigma) - m_N(\sigma) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h)| \\
 &\leq \epsilon \\
 &\Rightarrow |m_N(\sigma) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h)| \leq |f(\sigma)| + \epsilon
 \end{aligned}$$

Mit diesem Resultat lässt sich die Hauptaussage über die Konvergenz von $m_N(\sigma)$ treffen:

$$\begin{aligned}
 \mu_{N,\beta,h}(|m_N(\sigma) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h)| > 2\epsilon) &\leq \mu_{N,\beta,h}(|f(\sigma)| + \epsilon > 2\epsilon) \\
 &\leq \frac{2 + 2\beta}{N\epsilon^2}
 \end{aligned}$$

3.3 Interpolationsverfahren

Das folgende Kapitel widmet sich einer Lösungsstrategie, die aus zwei Bausteinen besteht, von denen jeweils zwei Alternativen vorgestellt werden. Zuerst werden zwei Wege vorgestellt, in denen die Partitionssumme in zwei Subsysteme aufgeteilt und damit die Subadditivität des magnetischen Drucks nachgewiesen wird. Daraufhin wird die Existenz dessen Grenzwertes gezeigt.

Danach wird eine untere Schranke bestimmt und es werden zwei alternative Herangehensweisen für die Berechnung einer oberen Schranke vorgestellt. Die zweite dieser Methoden ist die sogenannte Cavity Methode, welche mit einer iterativen Erweiterung des Systems um $N \mapsto N + 1$ einen zusätzlichen Spin arbeitet. Mit dem Cesàro-Mittel über die Differenz der Partitionssumme mit N und $N + 1$ Objekten wird der magnetische Druck beschränkt. Im Grenzwert findet man durch den Zusammenschluss der Konvergenzaussage und der beiden Schranken die Formel für den magnetischen Druck.

Das Kapitel bezieht sich hauptsächlich auf die Quellen [12], [3] und [7]. Jedoch findet man ähnliche Herangehensweisen, angewandt auf das komplexere Sherrington Kirkpatrick Modell, in [13], [11], [23] und [2].

Definition 3.3.1. *Zunächst wird eine alternative Version der freien Energie im Gegensatz zu 1.2.4 definiert. In der bisherigen Version in 1.2.4 wurden explizite Funktionen betrachtet und später wurde der Beweis gebracht, wie diese im Grenzwert mit der Partitionsfunktion zusammenhängen. Ab sofort wird die Implikation umgedreht, indem erst der Zusammenhang festgelegt wird und daraufhin erst ausgerechnet wird, wie die freie Energie $\bar{F}_N(\beta)$ und deren Dichte $\bar{f}_N(\beta)$ aussehen.*

$$Z_{N,\beta,h} := e^{-\beta \bar{F}_N(\beta)} := e^{-N\beta \bar{f}_N(\beta)}$$

3.3.1 Existenz des Grenzwerts des magnetischen Drucks

Definition 3.3.2. *Zunächst wird das System N in zwei Subsysteme aufgeteilt:*

$$N_1 + N_2 = N$$

mit

$$m_1(\sigma) = \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} \sigma_i \quad m_2(\sigma) = \frac{1}{N_2} \sum_{i=N_1+1}^N \sigma_i$$

Demnach ergibt sich $m(\sigma)$ als Linearkombination:

$$m(\sigma) = \frac{N_1}{N} m_1(\sigma) + \frac{N_2}{N} m_2(\sigma)$$

Durch die Konvexität der Funktion $x \mapsto x^2$ und der Monotonie der Exponentialfunktion erhält man:

$$\begin{aligned} Z_{N,\beta,h} &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} N m^2(\sigma) + h N m(\sigma) \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} N \left(\frac{N_1}{N} m_1(\sigma) + \frac{N_2}{N} m_2(\sigma) \right)^2 + h N \left(\frac{N_1}{N} m_1(\sigma) + \frac{N_2}{N} m_2(\sigma) \right) \right) \\ &\leq \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} N \left(\frac{N_1}{N} m_1^2(\sigma) + \frac{N_2}{N} m_2^2(\sigma) \right) + h (N_1 m_1(\sigma) + N_2 m_2(\sigma)) \right) \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{N_1} \in \{-1,1\}} \exp \left(\frac{\beta}{2} N_1 m_1^2(\sigma) + h N_1 m_1(\sigma) \right) \\ &\quad \cdot \sum_{\sigma_{N_1+1}, \dots, \sigma_N \in \{-1,1\}} \exp \left(\frac{\beta}{2} N_2 m_2^2(\sigma) + h N_2 m_2(\sigma) \right) \\ &= Z_{N_1,\beta,h} \cdot Z_{N_2,\beta,h} \end{aligned}$$

Daraus folgt direkt die Superadditivität der freien Energiedichte

$$\begin{aligned} N \bar{f}_N(\beta) &= -\frac{1}{\beta} \log(Z_{N,\beta,h}) \\ &\geq -\frac{1}{\beta} \log(Z_{N_1,\beta,h}) - \frac{1}{\beta} \log(Z_{N_2,\beta,h}) \\ &= N_1 \bar{f}_{N_1}(\beta) + N_2 \bar{f}_{N_2}(\beta) \end{aligned} \tag{3.4}$$

Von dieser Schranke ausgehend ist auf die Konvergenz von $\Psi_\beta(h)$ 2.2.2 zu schließen. An der Stelle sei erinnert an:

$$\Psi_\beta(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h})$$

Für die Konvergenz des magnetischen Drucks wird Feketes Lemma für subadditive Funktionen genutzt. In der benötigten Form ist dies zu sehen in [4, vgl. Lemma 1.2] mit Verweis auf die Originalquelle für den Beweis [9].

Definition 3.3.3. (Subadditivität)

Eine reelle Folge $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ nennt man **subadditiv**, wenn gilt:

$$x_{n+m} \leq x_n + x_m \quad \forall n, m \in \mathbb{N}$$

Lemma 3.3.4. (Feketes Lemma)

Für subadditive Folgen gilt:

Es existiert ein Grenzwert $x^* \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$, sodass gilt:

$$\inf_{n \in \mathbb{N}} \frac{x_n}{n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{x_n}{n} = x^*$$

Beweis. Sei $x^* := \inf_{n \in \mathbb{N}} \frac{x_n}{n}$ und $x' > x^*$ fest. Man wählt ein festes l , sodass gilt $\frac{x_l}{l} \leq x'$. Nun existiert $\forall n \in \mathbb{N}$ ein k , sodass gilt $0 \leq j < l$ mit $n = kl + j$. Durch k -faches Ausnutzen der Subadditivität von x_n und der Definition von x^* erhält man:

$$x^* \cdot n \leq x_n = x_{kl+j} \leq k \cdot x_l + x_j$$

Teilen durch n liefert:

$$x^* \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \frac{x_n}{n} \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{x_n}{n} \leq \frac{x_l}{l} \leq x'$$

Die Aussage des Lemmas folgt mit dem Grenzwert $\lim_{x' \rightarrow x^*}$. □

Satz 3.3.5. Es gilt:

$$\Psi_\beta(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \Psi_{\beta,N}(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) = \inf_{N \in \mathbb{N}} \Psi_{\beta,N}(h)$$

Beweis. Wie angekündigt wird Lemma 3.3.4 genutzt, um die Aussage über den Grenzwert des Drucks zu beweisen. Dazu wird $\Psi_{\beta,N}(h)$ als Funktionenfolge aufgefasst. So gilt mit der Subadditivität aus (3.4):

$$\begin{aligned} -\frac{N}{\beta N} \log(Z_{N,\beta,h}) &\geq -\frac{N_1}{\beta N_1} \log(Z_{N_1,\beta,h}) - \frac{N_2}{\beta N_2} \log(Z_{N_2,\beta,h}) \\ \Leftrightarrow \log(Z_{N,\beta,h}) &\leq \log(Z_{N_1,\beta,h}) + \log(Z_{N_2,\beta,h}) \end{aligned}$$

Wegen $N_1 + N_2 = N$ erhält man also für festes β eine subadditive Folge, mit der man 3.3.4 anwenden kann. \square

Nun folgt eine alternative Methode für den Nachweis der Subadditivität und somit der Existenz des Grenzwerts von $\Psi_\beta(h)$. Diese beruht erneut auf dem Aufteilen des Systems in zwei Subsysteme. In diesem Fall wird jedoch über einen kontinuierlichen Parameter $0 \leq \lambda \leq 1$ interpoliert.

Dazu werden zunächst zwei zusätzliche Elemente benötigt:

Definition 3.3.6. *Eine alternative Partitionssumme abhängig von der Interpolationsvariable λ :*

$$Z_{N,\beta,h}^*(\lambda) := \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} (N\lambda m^2 + N_1(1-\lambda)m_1^2 + N_2(1-\lambda)m_2^2) + hNm \right)$$

und der dazugehörige Erwartungswert:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{Z_{N,\beta,h}^*} [F(\sigma)] \\ = \frac{\sum_{\sigma \in \Sigma_N} F(\sigma) \exp \left(\frac{\beta}{2} (N\lambda m^2 + N_1(1-\lambda)m_1^2 + N_2(1-\lambda)m_2^2) + hNm \right)}{\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} (N\lambda m^2 + N_1(1-\lambda)m_1^2 + N_2(1-\lambda)m_2^2) + hNm \right)} \end{aligned}$$

Im nächsten Schritt werden die Definitionsgrenzen von $Z_{N,\beta,h}^*(\lambda)$ untersucht:

$$\begin{aligned} Z_{N,\beta,h}^*(0) &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} (N_1 m_1^2(\sigma) + N_2 m_2^2(\sigma)) + hNm(\sigma) \right) \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{N_1} \in \{-1,1\}} \sum_{\sigma_{N_1+1}, \dots, \sigma_N \in \{-1,1\}} \exp \left(\frac{\beta}{2} (N_1 m_1^2(\sigma) + N_2 m_2^2(\sigma)) \right) \\ &\quad \cdot \exp(h(N_1 m_1(\sigma) + N_2 m_2(\sigma))) \\ &= Z_{N_1,\beta,h}^*(0) Z_{N_2,\beta,h}^*(0) \\ \\ Z_{N,\beta,h}^*(1) &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} e^{\frac{\beta}{2} N m^2(\sigma) + hNm(\sigma)} \end{aligned}$$

Daher erhalten wir in Form der freien Energiedichte und im Logarithmus:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{N\beta} \log(Z_{N,\beta,h}^*(0)) &= \frac{N_1}{N} \bar{f}_{N_1}(\beta) + \frac{N_2}{N} \bar{f}_{N_2}(\beta) \\ -\frac{1}{N\beta} \log(Z_{N,\beta,h}^*(1)) &= \bar{f}_N(\beta) \end{aligned}$$

Für eine Aussage über die Subadditivität benötigt man noch die Ableitung des Terms nach t :

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{N\beta} \log(Z_{N,\beta,h}^*(t)) \\ &= -\mathbb{E}_{Z_{N,\beta,h}^*} \left[m^2(\sigma) - \frac{N_1}{N} m_1^2(\sigma) - \frac{N_2}{N} m_2^2(\sigma) \right] \\ &= -\mathbb{E}_{Z_{N,\beta,h}^*} \left[N \left(\frac{N_1}{N} m_1 + \frac{N_2}{N} m_2 \right)^2 - N_1 m_1^2 - N_2 m_2^2 \right] \\ &= -\mathbb{E}_{Z_{N,\beta,h}^*} \left[N \left(\frac{N_1^2}{N^2} m_1^2 + \frac{N_2^2}{N^2} m_2^2 + 2 \frac{N_1 N_2}{N} m_1 m_2 \right) - N_1 m_1^2 - N_2 m_2^2 \right] \\ &= -\mathbb{E}_{Z_{N,\beta,h}^*} \left[m_1^2 \left(\frac{N_1^2 - N_1 N}{N} \right) + m_2^2 \left(\frac{N_2^2 - N_2 N}{N} \right) + 2 \frac{N_1 N_2}{N} m_1 m_2 \right] \\ &= -\mathbb{E}_{Z_{N,\beta,h}^*} \left[-m_1^2 \frac{N_1 N_2}{N} - m_2^2 \frac{N_1 N_2}{N} + 2 \frac{N_1 N_2}{N} m_1 m_2 \right] \\ &= -\mathbb{E}_{Z_{N,\beta,h}^*} \left[-(m_1 - m_2)^2 \frac{N_1 N_2}{N} \right] \\ &\geq 0 \end{aligned}$$

Dementsprechend erhält man das Resultat:

$$\bar{f}_N(\beta) \geq \frac{N_1}{N} \bar{f}_{N_1}(\beta) + \frac{N_2}{N} \bar{f}_{N_2}(\beta)$$

Hiermit kann analog zu der vorherigen Methode mithilfe der Subadditivität die Existenz des Grenzwerts mit 3.3.4 gezeigt werden.

3.3.2 Berechnung obere und untere Schranke

Nun können durch die Berechnung einer oberen und unteren Schranke und der vorangegangenen Aussage über den Grenzwert explizite Berechnungen durchgeführt werden. In diesem Unterkapitel folgen simple Methoden für die Berechnung dieser

Schranken. Im nächsten Kapitel folgt eine alternative Variante für die Berechnung der oberen Schranke.

Lemma 3.3.7. *Es existiert folgende untere Schranke:*

$$\frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) \geq \left(\sup_{M \in A_N} \log(2) + \log(\cosh(\beta M + h)) - \frac{1}{2}\beta M^2 \right)$$

Beweis. Im Folgenden wird benutzt:

$$(i) \quad m_N^2(\sigma) \geq 2m_N(\sigma) - M^2 \quad \forall M \in \mathbb{R}$$

Sei $M \in A_N$ beliebig.

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) &= \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} N m_N^2(\sigma) \right) \exp(h N m_N(\sigma)) \right) \\ &\stackrel{(i)}{\geq} \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp(\beta N m_N(\sigma) M) \exp \left(-\frac{\beta}{2} N M^2 \right) \exp(h N m_N(\sigma)) \right) \\ &= \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i (\beta M + h) \right) \right) - \frac{1}{2} \beta M^2 \\ &= \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\sigma \in \{-1,1\}^N} \prod_{i=1}^N \exp(\sigma_i (\beta M + h)) \right) - \frac{1}{2} \beta M^2 \\ &= \frac{1}{N} \log \left(\prod_{i=1}^N \sum_{\sigma_i \in \{-1,1\}} \exp(\sigma_i (\beta M + h)) \right) - \frac{1}{2} \beta M^2 \\ &= \log(2) + \log(\cosh(h + \beta M)) - \frac{1}{2} \beta M^2 \end{aligned}$$

□

Lemma 3.3.8. *Es existiert die folgende obere Schranke:*

$$\frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) \leq \sup_{M \in A_N} \left(\log(2) + \log(\cosh(h + \beta M)) - \frac{1}{2}\beta M^2 \right) + \frac{1}{N} \log \left(\frac{1}{N} \right)$$

Beweis. Im Folgenden wird benutzt:

$$(i) \quad 1 = \sum_{M \in A_N} \delta_{m_N(\sigma), M} \quad \text{mit} \quad \delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

(ii) $m^2 = 2mM - M^2$ für $m = M$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) &= \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{\beta}{2} N m_N^2(\sigma) \right) \exp(h N m_N(\sigma)) \right) \\
 &\stackrel{(i)}{=} \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sum_{M \in A_N} \delta_{m_N(\sigma), M} \exp \left(\frac{\beta}{2} N m_N^2(\sigma) \right) \exp(h N m_N(\sigma)) \right) \\
 &\stackrel{(ii)}{=} \frac{1}{N} \log \left(\sum_{M \in A_N} \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \delta_{m_N(\sigma), M} \exp(\beta N M m_N(\sigma)) \exp(h N m_N(\sigma)) \right) \\
 &\quad \cdot \exp \left(-\frac{1}{2} \beta N M^2 \right) \\
 &\leq \frac{1}{N} \log \left(\sum_{M \in A_N} \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i (\beta M + h) \right) \exp \left(-\frac{1}{2} \beta N M^2 \right) \right) \\
 &= \frac{1}{N} \log \left(\sum_{M \in A_N} \exp \left(-\frac{1}{2} \beta N M^2 \right) \sum_{\sigma \in \{-1,1\}^N} \prod_{i=1}^N \exp(\sigma_i (\beta M + h)) \right) \\
 &= \frac{1}{N} \log \left(\sum_{M \in A_N} \exp \left(-\frac{1}{2} \beta N M^2 \right) (2 \cosh(\beta M + h))^N \right) \\
 &\leq \sup_{M \in A_N} \left(\log(2) + \log(\cosh(\beta M + h)) - \frac{1}{2} \beta M^2 + \frac{1}{N} \log(N+1) \right)
 \end{aligned}$$

□

Zusammen mit 3.3.5 erhält man also die bereits bekannte Aussage über den Grenzwert [vgl. 2.6]:

$$\begin{aligned}
 \Psi_\beta(h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \log(Z_{N,\beta,h}) \inf_{N \in \mathbb{N}} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) \\
 &= \sup_{M \in A_N} \left(\log(2) + \log(\cosh(\beta M + h)) - \frac{1}{2} \beta M^2 \right)
 \end{aligned}$$

3.3.3 Cavity Methode

Im folgenden Kapitel wird die Cavity Methode erläutert, welche eine weitere Variante für die Berechnung der oberen der beiden Schranken für $\Psi_\beta(h)$ darstellt. Dies erscheint auf den ersten Blick unnötig kompliziert im Vergleich zu der vorherigen

Methode. Jedoch kann man die Cavity Methode einerseits auf das Sherrington Kirkpatrick Model anwenden [23, vgl.], was mit den anderen Methoden nicht möglich ist und außerdem ist diese Methode nicht mehr direkt abhängig von der Ordnung von m_N in der Hamilton-Funktion. Die Methode aus Abschnitt 3.1 beruht beispielsweise ausschließlich auf der Ordnungsreduktion, die in dieser Form nur mit Ordnung 2 möglich ist. Die Cavity Methode kann man jedoch auf allgemeinere Strukturen anwenden.

Das Kapitel bezieht sich auf die Quelle [12] und [3].

Grundidee der Berechnung der Schranke ist es, die Partitionssumme $Z_{N,\beta,h}$ mit ihrem Nachfolger $Z_{N+1,\beta,h}$ zu vergleichen. Im Gegensatz zu Guerra [12] wird in dieser Ausarbeitung nur der direkte Nachfolger betrachtet und nicht der k -te. Dies macht im Curie-Weiß Modell keinen Unterschied. Die entstehende Differenz durch den zusätzlichen Spin nennen wir Cavity-Differenz.

Als Werkzeug für den Zusammenhang der Differenz der Partitionssummen und des magnetischen Drucks $\Psi_\beta(h)$ benötigt man folgende Definition:

Definition 3.3.9. (*Cesàro-Mittel*)

Das **Cesàro-Mittel** einer Folge x_n definieren wir als den Grenzwert der arithmetischen Mittel über die Folgenglieder:

$$C \lim_{n \rightarrow \infty} x_n := \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k$$

Schnell fallen wichtige Eigenschaften dieser Definition auf, indem man simple Beispiele betrachtet. So folgt für das Beispiel $x_n = (-1)^{n+1}$:

$$C \lim_{n \rightarrow \infty} (-1)^{n+1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (-1)^{k+1}$$

mit Betrachtung der Teilfolgen $(2n)_{n \in \mathbb{N}}$ und $(2n-1)_{n \in \mathbb{N}}$:

$$\begin{aligned} C \lim_{n \rightarrow \infty} x_{2n} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{2n} (-1)^{k+1} = \frac{1}{2} \\ C \lim_{n \rightarrow \infty} x_{2n-1} &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{2n-1} (-1)^{k+1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{2} + \frac{1}{2 \cdot (2n-1)} = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Also folgt für die divergente Folge x_n , dass ihr Cesàro-Mittel $C \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = \frac{1}{2}$ existiert.

Demnach impliziert die Existenz des Cesàro-Mittels nicht die Existenz des allgemeinen Grenzwertes, jedoch gilt die Umkehrung:

Lemma 3.3.10. (Cauchyscher Grenzwertsatz)

Sei $x \in \mathbb{R}$ der Grenzwert der Folge x_n , so gelte der Cauchysche Grenzwertsatz:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x \Rightarrow C \lim_{n \rightarrow \infty} x_n = x$$

Beweis. Es gilt also $\forall \epsilon > 0 \exists N \in \mathbb{N} \Rightarrow |x_n - x| < \frac{\epsilon}{2} \forall n \geq N$.

Da ebenfalls für alle festen $N \in \mathbb{N}$ gilt $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^N (x_k - x) = 0$ existiert ein $M \in \mathbb{N}$ mit $\left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^N (x_k - x) \right| < \frac{\epsilon}{2} \forall n \geq M$.

Somit gilt $\forall n \geq \max\{N, M\}$:

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{n} \left(\sum_{k=1}^n x_k \right) - x \right| &= \left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n (x_k - x) \right| \\ &= \left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^N (x_k - x) + \frac{1}{n} \sum_{k=N+1}^n (x_k - x) \right| \\ &\leq \left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^N (x_k - x) \right| + \frac{1}{n} \sum_{k=N+1}^n |x_k - x| \\ &< \frac{\epsilon}{2} + \frac{(n - N)\epsilon}{2n} \leq \epsilon \end{aligned}$$

□

Bemerkung 3.3.11. Übrigens folgt aus der Existenz des Cesàro-Mittels nicht die Beschränktheit der Folge, was man vielleicht auf den ersten Blick vermuten könnte. Hierzu befindet sich im Anhang unter A.1.5 ein passendes Gegenbeispiel.

Nun wird für die Berechnung des magnetischen Drucks das Cesàro-Mittel von

$$x_N = \log(Z_{N+1, \beta, h}) - \log(Z_{N, \beta, h})$$

betrachtet.

$$\begin{aligned}
 C \lim_{N \rightarrow \infty} (\log(Z_{N+1,\beta,h}) - \log(Z_{N,\beta,h})) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \log(Z_{k+1,\beta,h}) - \log(Z_{k,\beta,h}) \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} (\log(Z_{N,\beta,h}) - \log(Z_{1,\beta,h})) \\
 &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log(Z_{N,\beta,h}) = \Psi_\beta(h)
 \end{aligned}$$

Dementsprechend wird also eine Schranke für das Cesàro-Mittel der Cavity-Differenz ermittelt.

Satz 3.3.12. *Es gilt folgender Zusammenhang für die **Cavity-Differenz**:*

$$\begin{aligned}
 &\log(Z_{N+1,\beta,h}) - \log(Z_{N,\beta,h}) \\
 &= \log \left(\left\langle 2 \cosh(\beta m_N(\sigma) + h) \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_N^2(\sigma) \right) \right\rangle_{N,\beta,h} \right) + O \left(\frac{1}{N} \right) \quad (3.5)
 \end{aligned}$$

Beweis. Zunächst wird die Partitionssumme mit $N + 1$ Spins umgeformt:

$$\begin{aligned}
 &Z_{N+1,\beta,h} \\
 &= \sum_{\sigma \in \Sigma_{N+1}} \exp \left(\frac{\beta}{2(N+1)} \sum_{i,j=1}^{N+1} \sigma_i \sigma_j + h \sum_{i=1}^{N+1} \sigma_i \right) \\
 &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sum_{\sigma_{N+1} \in \{-1,1\}} \exp \left(\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j=1}^{N+1} \sigma_i \sigma_j + h \sum_{i=1}^{N+1} \sigma_i - \frac{\beta}{2N(N+1)} \sum_{i,j=1}^{N+1} \sigma_i \sigma_j \right) \\
 &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \sum_{\sigma_{N+1} \in \{-1,1\}} \exp \left(\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j + h \sum_{i=1}^N \sigma_i + \frac{\beta}{N} \sigma_{N+1} \sum_{i=1}^N \sigma_i + \frac{\beta}{2N} + \sigma_{N+1} h \right) \\
 &\quad \cdot \exp \left(-\frac{\beta}{2N(N+1)} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j - \frac{\beta}{N(N+1)} \sigma_{N+1} \sum_{i=1}^N \sigma_i - \frac{\beta}{2N(N+1)} \right) \\
 &= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp(-H_{N,\beta,h}(\sigma)) 2 \cosh(\beta m_N(\sigma)) \exp \left(-\frac{\beta}{2N(N+1)} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j \right) \\
 &\quad \cdot \exp \left(\frac{\beta}{2N} - \frac{\beta}{2N(N+1)} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp(-H_{N,\beta,h}(\sigma)) 2 \cosh(\beta m_N(\sigma) + h - \frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)) \exp\left(-\frac{\beta}{2} m_N^2(\sigma)\right) \\
&\cdot \exp\left(\frac{\beta}{2(N+1)} m_N^2(\sigma) + \frac{\beta}{2N} - \frac{\beta}{2N(N+1)}\right)
\end{aligned}$$

Die Restterme werden separat umgeformt und abgeschätzt, um Verwirrung in der Notation vorzubeugen. Es gilt:

$$\begin{aligned}
&\cosh\left(\beta m_N\left(\sigma + h - \frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right)\right) \\
&= \cosh(\beta m_N(\sigma) + h) \frac{\cosh\left(\beta m_N(\sigma) + h - \frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right)}{\cosh(\beta m_N(\sigma) + h)}
\end{aligned}$$

Demnach muss nur der hintere Restterm abgeschätzt werden.

$$\begin{aligned}
&\frac{\cosh\left(\beta m_N(\sigma) + h - \frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right)}{\cosh(\beta m_N(\sigma) + h)} \\
&= \frac{\cosh(\beta m_N(\sigma) + h) \cosh\left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right) - \sinh(\beta m_N(\sigma) + h) \sinh\left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right)}{\cosh(\beta m_N(\sigma) + h)} \\
&= \cosh\left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right) - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h) \sinh\left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right) \\
&= \cosh\left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right) \left(1 - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h) \tanh\left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right)\right)
\end{aligned}$$

An dieser Stelle sei erinnert an die Definition von

$$A_N = \left\{-1 + \frac{2k}{N} : k = 0, \dots, N\right\} \subset [-1, 1].$$

Da im nächsten Schritt die Cavity-Differenz logarithmiert wird, wird mit dem Supremum über $m_N \in A_N$ abgeschätzt und daraufhin der Logarithmus gebildet. Sei

$$M := \arg \sup_{m_N(\sigma) \in A_N} \log\left(\cosh\left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma)\right)\right),$$

so gilt:

$$\begin{aligned}
\log\left(\cosh\left(\frac{\beta}{N+1} M\right)\right) &= \log\left(\frac{\exp\left(\frac{\beta}{N+1} M\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N+1} M\right)}{2}\right) \\
&\leq \log\left(\exp\left(\frac{\beta}{N+1}\right)\right) = \frac{\beta}{N+1} \in O\left(\frac{1}{N}\right)
\end{aligned}$$

Für den anderen Term definieren wir analog

$$M := \arg \sup_{m_N(\sigma) \in A_N} \log \left(1 - \tanh(\beta m_N(\sigma) + h) \tanh \left(\frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma) \right) \right),$$

so gilt:

$$\begin{aligned} \log \left(1 - \tanh(\beta M + h) \tanh \left(\frac{\beta}{N+1} M \right) \right) &\leq \log \left(1 + \left| \tanh \left(\frac{\beta}{N+1} M \right) \right| \right) \\ &= \log(1 + f_N) \end{aligned}$$

mit $f_N \in O\left(\frac{1}{N}\right) \Leftrightarrow \exists C \in \mathbb{R} \exists n \in \mathbb{N} : |f_N| \leq \frac{C}{N} \forall N \geq n$ durch Reihendarstellung von $\tanh(x)$. Nun folgt durch Darstellung der Exponentialfunktion:

da gilt $\limsup_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{C}{N}\right)^N = e^C \Leftrightarrow \limsup_{N \rightarrow \infty} \log \left(1 + \frac{C}{N}\right) N = C$. Demnach gilt $\log(1 + f_N) \in O\left(\frac{1}{N}\right)$. Außerdem gilt für den anderen Restterm:

$$\sup_{m_N(\sigma) \in A_N} \log \left(\exp \left(\frac{\beta}{2(N+1)} m_N^2(\sigma) + \frac{\beta}{2N} - \frac{\beta}{2N(N+1)} \right) \right) \in O\left(\frac{1}{N}\right)$$

Schlussendlich werden die Terme aus der Berechnung der Cavity-Differenz 3.3.3 zusammengetragen:

$$\begin{aligned} &\log(Z_{N+1, \beta, h}) - \log(Z_{N, \beta, h}) \\ &= \log \left(\left\langle 2 \cosh \left(\beta m_N(\sigma) + h - \frac{\beta}{N+1} m_N(\sigma) \right) \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_N^2(\sigma) \right) \right. \right. \\ &\quad \cdot \exp \left(\frac{\beta}{2(N+1)} m_N^2(\sigma) + \frac{\beta}{2N} - \frac{\beta}{2N(N+1)} \right) \left. \right\rangle_{N, \beta, h} \right) \\ &= \log \left(\left\langle 2 \cosh(\beta m_N(\sigma) + h) \exp \left(-\frac{\beta}{2} m_N^2(\sigma) \right) \right\rangle_{N, \beta, h} \right) + O\left(\frac{1}{N}\right) \end{aligned}$$

□

Die Aussage durch 3.5 ist also die Beschränkung des magnetischen Drucks nach oben durch das Cesàro-Mittel der Cavity-Differenz.

Zusammenfassend kann man durch beide Varianten für den Nachweis der Subadditivität des magnetischen Drucks und durch beide Varianten zur Berechnung der oberen Schranke in Kombination mit der unteren Schranke auf die Gleichung des magnetischen Drucks schließen. Dementsprechend ergibt sich, wie in den Methoden zuvor, die Mean-Field Gleichung (2.7).

4 | Ausblick und Fazit

4.1 Ausblick Hamilton-Jacobi Lösungsstrategie

Hiermit wird ein Ausblick auf die Lösungsstrategie mithilfe einer sog. Hamilton-Jacobi Gleichung gegeben. Diese besteht aus einer partiellen Differentialgleichung, die mithilfe der Varianzminimierung der Magnetisierungsdichte m_N entsteht und dadurch lösbar wird. Um deutlich zu machen, dass β und h im magnetischen Druck nicht mehr konstant sind, sondern als Variablen nach Ort und Zeit fungieren, wird in diesem Kapitel $\Psi_N(t, x)$ genutzt und später an Punkten in Abhängigkeit von β und h ausgewertet.

Dieses Kapitel bezieht sich hauptsächlich auf Quelle [19], jedoch wird auch eine alternative Herangehensweise in [3, Kapitel 4.4] vorgestellt.

Zunächst wird die sog. Moment-erzeugende Funktion $F_N : (\mathbb{R}_t)_{\geq 0} \times \mathbb{R}_x \rightarrow \mathbb{R}$ definiert:

$$F_N(t, x) := \frac{1}{N} \log \left(\sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp \left(\frac{t}{N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j + x \sum_{i=1}^N \sigma_i \right) \right)$$

Im folgenden werden Erwartungswerte bezüglich der Moment-erzeugende Funktion mit $\langle f(\sigma) \rangle_{t,x}$, wobei $f : \Sigma_N \rightarrow \mathbb{R}$, bezeichnet.

Die partiellen Ableitungen von F_N sind gegeben durch:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_N(t, x)}{\partial t} &= \frac{1}{N} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j \right\rangle_{t,x} = \left\langle \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \right\rangle_{t,x} \\ \frac{\partial F_N(t, x)}{\partial x} &= \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle_{t,x} \end{aligned}$$

Mit diesen Resultaten erhält man bereits die erwähnte Varianz der Magnetisierungsdichte m_N :

$$\frac{\partial F_N(t, x)}{\partial t} - \left(\frac{\partial F_N(t, x)}{\partial x} \right)^2 = \langle (m_N)^2 \rangle_{t,x} - \left(\langle m_N \rangle_{t,x} \right)^2$$

Mit der zweifachen Ableitung nach x erhält man zusätzlich:

$$\frac{\partial^2 F_N(t, x)}{\partial x^2} = \frac{1}{N} \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \sigma_i \right)^2 \right\rangle_{t,x} - \frac{1}{N} \left(\left\langle \sum_{i=1}^N \sigma_i \right\rangle_{t,x} \right)^2$$

Mithilfe dieser Funktionen sieht man, dass F_N die folgende partielle Differentialgleichung

$$\frac{\partial F_N(t, x)}{\partial t} - \left(\frac{\partial F_N(t, x)}{\partial x} \right)^2 = \frac{1}{N} \frac{\partial^2 F_N(t, x)}{\partial x^2}$$

erfüllt.

Dies gleicht fast der gewünschten Form der Hamilton-Jacobi Gleichung. An dieser Stelle muss gezeigt werden, dass eben diese Varianz im Grenzwert $\lim_{N \rightarrow \infty}$ gegen 0 läuft. Wenn dies nachgewiesen wurde, erhält man die Hamilton-Jacobi Gleichung

$$\frac{\partial F_\infty(t, x)}{\partial t} - \left(\frac{\partial F_\infty(t, x)}{\partial x} \right)^2 = 0.$$

Nun ist das Ziel, diese Differentialgleichung zu lösen und dafür wird das folgende Theorem benötigt.

Lemma 4.1.1. (*Hopf-Lax Formel*)

Sei eine Differentialgleichung der Form

$$\begin{cases} f : (\mathbb{R}_{\geq 0})_t \times \mathbb{R}_x \rightarrow \mathbb{R} \\ \frac{\partial f(t, x)}{\partial t} - \left(\frac{\partial f(t, x)}{\partial x} \right)^2 = 0 \\ f(0, h) = \phi(h) \end{cases} \quad (4.1)$$

gegeben. Sei außerdem die Funktion $\phi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ konvex und lipschitzstetig.

Dann erhält man eine eindeutige schwache Lösung A.1.6 der Gleichung 4.1 mit der Funktion

$$f(t, x) = \sup_{\alpha \in \mathbb{R}} \left(\phi(\alpha) - \frac{(x - \alpha)^2}{8t} \right).$$

Beweis. Für den Beweis sei auf [8, S. 135] verwiesen. \square

An dieser Stelle kann man bereits einen schönen Zusammenhang erkennen, nämlich die Form der Legendre-Transformierten aus 2.6. Außerdem spielt erneut die Konvexität eine Rolle, welche bereits für den magnetischen Druck nachgewiesen wurde.

Um die Hopf-Lax Formel auf das System anwenden zu können, müssen zuerst die Voraussetzungen überprüft werden. Für den Startwert $\phi(x)$ und dessen Ableitungen gilt:

$$\begin{aligned}\phi(x) &= F(0, x) = \log(e^x + e^{-x}) \\ \phi'(x) &= \tanh(x) \in (-1, 1) \\ \phi''(x) &= \operatorname{sech}^2(x) \in (0, 1] > 0\end{aligned}$$

Anhand der Eigenschaften $|\phi'(x)| < 1$ und $\phi''(x) > 0$ lassen sich die Lipschitzstetigkeit und die Konvexität ablesen. Außerdem erfüllt $F_\infty(t, x)$ die Form von $f(t, x)$.

Nach Anwendung der Hopf-Lax Formel erhält man also die Lösung:

$$f(t, x) = \sup_{\alpha \in \mathbb{R}} \left(\underbrace{\log(e^\alpha + e^{-\alpha}) - \frac{(x - \alpha)^2}{8t}}_{g_{t,x}(\alpha)} \right)$$

Um das Supremum zu bestimmen, wird die Stetigkeit von $g_{t,x}(\alpha)$ in α ausgenutzt. Somit werden nur die Grenzwerte $\lim_{\alpha \rightarrow \pm\infty}$, sowie die kritischen Punkte betrachtet, um das Supremum zu erhalten. Nach der Betrachtung dieser Fälle

$$\begin{aligned}\lim_{\alpha \rightarrow \pm\infty} (g_{t,x}(\alpha)) &= -\infty \\ \frac{\partial g_{t,x}(\alpha)}{\partial \alpha} &= \frac{x - \alpha}{4t} + \tanh(\alpha) \stackrel{!}{=} 0 \\ &\Leftrightarrow 4t \tanh(\alpha) + x = \alpha\end{aligned}$$

erhält man eine bereits bekannt vorkommende Form der Lösung für die Häufungspunkte. Im Vergleich zu den Lösungen der anderen Strategien und für die Überführung in β, h muss der Parameter $\alpha \in \mathbb{R}$ verschoben werden mit $\alpha = m\beta + h$ und

die Funktion muss am Zeitpunkt $t = \frac{\beta}{4}$ ausgewertet werden. Somit ergibt sich die Mean-Field Gleichung (2.7)

$$\tanh(m\beta + h) = m.$$

4.2 Fazit

Man hat gesehen, dass man die magnetischen Eigenschaften im Curie-Weiß Ising Modell auf vielfältige Weise lösen kann und das Modell spannende Anwendungsmöglichkeiten theoretischer Hintergründe aus diversen mathematischen Teilgebieten bietet. Außerdem werden im Laufe der Berechnung durch die verschiedenen Strategien schöne Zusammenhänge offengelegt, die immer wieder auftauchen. Ein Beispiel dafür ist die Legendre-Transformierte und dessen Konvexität. Weil das Modell so flexibel ist und viele verschiedene Herangehensweisen zulässt, wird es auch hauptsächlich als eine Art „Testplattform“ für andere Modelle, wie dem Sherrington-Kirkpatrick Modell, genutzt, um Lösungsstrategien auszuprobieren und sie daraufhin zu verallgemeinern und zu erweitern.

So wurde in [3] beispielsweise das Curie-Weiß Modell ohne ein magnetisches Feld mithilfe der Cavity-Methode gelöst, was vor allem durch die Gauge-Symmetrie im Hamiltonian bezüglich σ ohne den Parameter h begründet wurde. In [12] wird daraufhin die gleiche Methode einerseits auf das Curie-Weiß Modell und andererseits auf das Sherrington-Kirkpatrick Modell angewandt, um die obere Schranke für den magnetischen Druck 3.3.3 zu berechnen.

Außerdem sieht man an der Hamilton-Jacobi Strategie, wie relevant die Anwendung des Ansatzes für das Verständnis des komplexeren Sherrington-Kirkpatrick Modells ist. Auf der Hamilton-Jacobi Gleichung aufbauend hat Giorgio Parisi seine Lösung des „replica symmetry breaking problem“ für das Sherrington-Kirkpatrick Modell gefunden, wofür er im Jahr 2021 den Nobelpreis für Physik erhielt. Den Beweis der Lösung lieferten später Francesco Guerra und Michel Talagrand. Seitdem wird die Methodik hinter dem Parisi Ansatz in sämtlichen Wissenschaftsgebieten eingesetzt. Daher ist es umso wichtiger, durch Modelle wie dem Curie-Weiß Modell einen einfacheren Einstiegspfad für das Verständnis dieser Methodik bereitzustellen.

A | Anhang

A.1 inhaltlicher Anhang

Definition A.1.1. (*Legendre-Transformierte*)

Die **Legendre-Transformierte** [22, vgl. S. 112 f.] ist für beliebige stetige Funktion $f \in C(U; \mathbb{R})$ definiert als:

$$f^*(y) = \sup_{x \in U} (yx - f(x))$$

Lemma A.1.2. Sei $f^*(y)$ die Legendre-Transformierte einer Funktion f , für die gilt $f \in C^2(\mathbb{R}; \mathbb{R})$ und $f'' > 0$ (also f strikt konvex). Dann gelten die folgenden Resultate:

- (i) Es gilt $f^*(y) = yx(y) - f(x(y))$ mit $y \in \mathbb{R}$, wobei $x(y)$ die eindeutige Lösung von $f'(x) = y$ ist.
- (ii) $f^* \in C^2(\mathbb{R}; \mathbb{R})$ ist strikt konvex und die Ableitung ist gegeben durch $f^{*'} = (f')^{-1}$.

Beweis. Die Funktion $g(x) = f(x) - xy$ erfüllt:

$$g \in C^2(\mathbb{R}; \mathbb{R}), \quad g'(x) = f'(x) - y, \quad g'' = f''(x) > 0$$

Daher ist g ebenso wie f strikt konvex und besitzt in $x(y)$ ein eindeutiges Minimum. Es folgt Aussage (i) aus:

$$\min_{x \in \mathbb{R}} g(x) = g(x(y)) = f(x(y)) - x(y) \cdot y = -\max_{x \in \mathbb{R}} (-g(x)) = -f^*(y)$$

Nun folgt der Beweis zur Aussage über die Konvexität.

Seien y, z bel. Elemente aus \mathbb{R} und wir definieren $u = f^{*'}(y) = (f')^{-1}(y)$ und $v = f^{*'}(z) = (f')^{-1}(z)$.

Nun gilt

$$(f^{*'}(y) - f^{*'}(z)) \cdot (y - z) = (u - v) \cdot (f'(u) - f'(v)) \quad (\text{A.1})$$

und man wendet den Mittelsatz auf die rechte Seite von A.1 wie folgt mit einem $\xi \in (u, v)$ an:

$$(f^{*'}(y) - f^{*'}(z)) \cdot (y - z) = f''(\xi) \cdot (u - v)^2 > 0 \quad \forall u \neq v$$

Daher erhält man, dass die Ableitung der Legendre-Transformierten $f^{*'}$ strikt wachsend ist und somit gilt: $f^{*''} > 0$ und f^* ist konvex. \square

Satz A.1.3. (Satz über die implizite Funktion)

[10, vgl. Theorem B.28]

Sei $(h, m) \rightarrow F(h, m)$ eine analytische Funktion auf einer offenen Umgebung auf $U \times V \subset \mathbb{C}^2$. Sei $(h_0, m_0) \in U \times V$, sodass gilt $F(h_0, m_0) = 0$ und $\frac{\partial F}{\partial m}(h_0, m_0) \neq 0$. Dann existieren eine offene Teilmenge $U_0 \subset U$ mit $h_0 \in U_0$ und eine analytische Funktion $\phi : U_0 \rightarrow V$, sodass:

$$F(h, \phi(h)) = 0$$

Beweis. Für den Beweis wird auf [5, vgl. S. 109 Theorem 3.11] verwiesen. \square

Lemma A.1.4. (Laplace Methode)

Es gelte die sog. Laplace Methode, also die folgende Approximation:

Sei $g \in C^2([a, b])$ und es existiere ein striktes Minimum $t_0 \in (a, b)$. Außerdem gelte $f(t_0) \neq 0$. So gilt:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\int_a^b f(t) e^{-ng(t)} dt}{e^{-ng(t_0)} f(t_0) \sqrt{\frac{2\pi}{ng''(t_0)}}} = 1$$

Beweis. Als Quelle für die Herleitung der Approximation wird [16, vgl. Seite 84 ff.] genutzt.

Da $g(t)$ in t_0 ein striktes Minimum besitzt, konzentriert sich die Masse hauptsächlich in einer Umgebung $U_\epsilon(t_0)$ um t_0 . Daher folgt:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b f(t) e^{-ng(t)} dt &= \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-ng(t_0)} \int_a^b f(t) e^{-n(g(t)-g(t_0))} dt \\ &\approx \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-ng(t_0)} f(t_0) \int_{t_0-\epsilon}^{t_0+\epsilon} e^{-n(g(t)-g(t_0))} dt \end{aligned}$$

Zunächst nutzt man die Taylorentwicklung von $g(t)$ um den Punkt t_0 :

$$g(t) = g(t_0) + g'(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2}g''(t_0)(t - t_0)^2 + O((t - t_0)^3)$$

Somit gilt durch Approximation ohne den Restterm und mit $g'(t_0) = 0$:

$$g(t) - g(t_0) \approx g'(t_0)(t - t_0) + \frac{1}{2}g''(t_0)(t - t_0)^2 = \frac{1}{2}g''(t_0)(t - t_0)^2$$

Somit folgt mit der Übertragung in ein Gaußsches Integral auf $[-\infty, \infty]$:

$$\begin{aligned} \lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b f(t) e^{-ng(t)} dt &\approx \lim_{n \rightarrow \infty} e^{-ng(t_0)} f(t_0) \int_{t_0-\epsilon}^{t_0+\epsilon} e^{-\frac{n}{2}g''(t_0)(t-t_0)^2} dt \\ &\approx \lim_{n \rightarrow \infty} f(t_0) e^{-ng(t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{n}{2}g''(t_0)(t-t_0)^2} dt \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} f(t_0) e^{-ng(t_0)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{n}{2}g''(t_0)s^2} ds \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} f(t_0) e^{-ng(t_0)} \sqrt{\frac{2\pi}{ng''(t_0)}} \end{aligned}$$

□

Bemerkung A.1.5. Gegenbeispiel für die Beschränktheit von Cesàro-konvergenten Folgen 3.3.11:

Man betrachte die Folge $x_k = \begin{cases} \log_2(k) & \text{für } k \in \{2^l \mid l \in \mathbb{N}\} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$.

Diese ist offensichtlich weder konvergent, noch beschränkt.

$$\begin{aligned} C \lim_{n \rightarrow \infty} x_n &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n x_k \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{\lfloor \log_2(n) \rfloor} 2^{\log_2(l)} \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{l=1}^{\lfloor \log_2(n) \rfloor} l \\ &\leq \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{(\log_2(n))^2}{n} = 0 \end{aligned}$$

Durch $x_k \geq 0$ folgt die Existenz des Cesàro-Mittels.

Definition A.1.6. (*schwache Lösung*)

[8, Vgl. S.132] Eine lipschitzstetige Funktion $u : \mathbb{R}^n \times [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ heißt **schwache Lösung** des Anfangswertproblems:

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - \left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right)^2 = 0 & | \mathbb{R}^n \times (0, \infty) \\ u(x, 0) = g(x) & | \mathbb{R}^n \times \{t = 0\} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

falls gilt:

- (i) $u(x, 0) = g(x)$
- (ii) $\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} - \left(\frac{\partial u(x,t)}{\partial x} \right)^2 = 0$ für fast alle $(x, t) \in \mathbb{R}^n \times (0, \infty)$
- (iii) $u(x + z, t) - 2u(x, t) + u(x - z, t) \leq C(1 + \frac{1}{t})|z|^2$ für eine Konstante ≥ 0 und alle $x, z \in \mathbb{R}^n, t > 0$

A.2 Code für die Plots

Unter dem Link <https://github.com/EliasReutelsterz/Bachelorarbeit> befindet sich der Code für alle verwendeten Plots.

Literatur

- [1] F Amiranoff u. a. „Abramowitz, M., Stegun, IA: Handbook of Mathematical Functions, 5th edn. Dover Publications, New York (1968) Alyokhin, BV, Dubinov, AE, Selemir, VD, Shamro, OA, Shibalko, OA, Stepanov, NV, Vatrugin, VE: Theoretical and experimental studies of virtual cathode microwave devices. IEEE Trans. PS-22, 945 (1994)“. In: (2011).
- [2] Adriano Barra. „Irreducible Free Energy Expansion and Overlaps Locking in Mean Field Spin Glasses“. In: *Journal of Statistical Physics* 123.3 (05/2006), S. 601–614. DOI: 10.1007/s10955-005-9006-6. <<https://doi.org/10.1007/s10955-005-9006-6>>.
- [3] Adriano Barra. „The Mean Field Ising Model through Interpolating Techniques“. In: (2008). Hrsg. von Springer US. <https://scholar.google.co.uk/citations?view_op=view_citation&hl=en&user=VdBrPZ8AAAAJ&citation_for_view=VdBrPZ8AAAAJ:u5HHmVD_u08C> (besucht am 10.03.2022).
- [4] Holger Boche, Yannik Böck und Christian Deppe. *On Effective Convergence in Fekete’s Lemma and Related Combinatorial Problems in Information Theory*. 2020. DOI: 10.48550/ARXIV.2010.09896. <<https://arxiv.org/abs/2010.09896>>.
- [5] C. Carathéodory. *Theory of functions of a complex variable. vol. 2*. 1964.
- [6] Sourav Chatterjee. „Stein’s method for concentration inequalities“. In: *arXiv preprint math/0604352* (2006).
- [7] Pierluigi Contucci, Dott Emanuele Mingione und Francesco Camilli. „Statistical Mechanics Perspectives on Boltzmann Machines“. In: ().
- [8] Lawrence C Evans. *Partial differential equations*. Bd. 19. American Mathematical Soc., 2010.
- [9] M. Fekete. „Über die Verteilung der Wurzeln bei gewissen algebraischen Gleichungen mit ganzzahligen Koeffizienten“. In: *Mathematische Zeitschrift* 17 (), S. 228–249.
- [10] Sacha Friedli und Yvan Velenik. *Statistical Mechanics of Lattice Systems: a Concrete Mathematical Introduction*. Hrsg. von Cambridge University Press. 2017. <<https://www.unige.ch/math/folks/velenik/smbook/>> (besucht am 09.03.2022).

- [11] FRANCESCO GUERRA. „ABOUT THE OVERLAP DISTRIBUTION IN MEAN FIELD SPIN GLASS MODELS“. In: *International Journal of Modern Physics B* 10.13n14 (06/1996), S. 1675–1684. DOI: 10.1142/s0217979296000751. <<https://doi.org/10.1142/s0217979296000751>>.
- [12] Francesco Guerra. „Course 5 An introduction to mean field spin glass theory: Methods and results“. In: *Les Houches Summer School Proceedings* 83 (12/2006). DOI: 10.1016/S0924-8099(06)80042-9.
- [13] Francesco Guerra und Fabio Lucio Toninelli. In: *Communications in Mathematical Physics* 230.1 (09/2002), S. 71–79. DOI: 10.1007/s00220-002-0699-y. <<https://doi.org/10.1007/s00220-002-0699-y>>.
- [14] Norbert Henze. *Stochastik für Einsteiger. eine Einführung in die faszinierende Welt des Zufalls*. ger. 11., überarbeitete Auflage. Lehrbuch. Literaturverzeichnis: Seite 388-389. Wiesbaden: Springer Spektrum, 2017, X, 402 Seiten. DOI: 10.1007/978-3-658-14739-6.
- [15] John Hubbard. „Calculation of partition functions“. In: *Physical Review Letters* 3.2 (1959), S. 77.
- [16] Wilfred Kaplan. „Mathematics Applied to Deterministic Problems in the Natural Sciences (C. C. Lin and L. A. Segel)“. In: *SIAM Rev.* 18.1 (01/1976), S. 146–148. DOI: 10.1137/1018034. <<https://doi.org/10.1137/1018034>>.
- [17] Konrad Königsberger. *Königsberger Analysis 1*. Hrsg. von Springer-Verlag Berlin Heidelberg GmbH. 2004. <<https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-18490-1>> (besucht am 09.03.2022).
- [18] Renaud Leplaideur und Frédérique Watbled. „EASY ISING OR CURIE-WEISS MODEL EXPLAINED TO ERGODICISTS“. In: (2016).
- [19] Jean-Christophe Mourrat. *Hamilton-Jacobi equations for mean-field disordered systems*. 2018. DOI: 10.48550/ARXIV.1811.01432. <<https://arxiv.org/abs/1811.01432>>.
- [20] Wolfgang Mückenheim. „Mathematik für die ersten Semester“. In: *Mathematik für die ersten Semester*. Oldenbourg Wissenschaftsverlag, 2012.
- [21] Charles M. Stein. „A bound for the error in the normal approximation to the distribution of a sum of dependent random variables“. In: 1972.
- [22] Norbert Straumann. *Theoretische Mechanik: ein Grundkurs über klassische Mechanik endlich vieler Freiheitsgrade*. Springer-Verlag, 2014.

- [23] Michel Talagrand. *Mean field models for spin glasses: Volume I: Basic examples*. Bd. 54. Springer Science & Business Media, 2010.