Opdracht 1 - Ising model

Gunar Stevens
Tweede Bachelor Fysica en Sterrenkunde 14-19 november 2023

Vraag 1

Stel nu expliciet de matrix T op en diagonaliseer deze als $\mathsf{T} = \mathsf{U}\mathsf{D}\mathsf{U}^{-1}$ om gemakkelijk T^{L-1} te kunnen berekenen.

Gegeven is dat T een (2x2) matrix is, waarbij de eerste rij geassocieerd wordt met $s_i = 1$, de tweede rij met $s_i = -1$, de eerste kolom met $s_{i+1} = 1$ en de tweede kolom met $s_{i+1} = -1$. Evalueren we de exponentïele $\exp(\beta J s_i s_{i+1})$ in elke combinatie van s_i en s_{i+1} via onze voorgaand besproken associaties, dan verkrijgen we matrix T:

$$\mathsf{T} = \begin{bmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{bmatrix} \tag{1}$$

Deze valt te interpreteren als een (ongenormaliseerde) kansmatrix die de configuratie van twee naburige sites beschrijft. Neem de eerste T in het matrixproduct in vergelijking 4. Deze representeert de (ongenormaliseerde) kansen voor de mogelijke configuraties tussen s_1 en s_2. Zo is bijvoorbeeld T_1^1 de (ongenormaliseerde) kans dat $s_1 = s_2 = 1$.
Nu trachtten we T te diagonaliseren, dit initiëren we door de eigenwaarden van T te zoeken. De karakteristieke vergelijking $k_{\mathsf{T}}(z)$ wordt gegeven door:

$$k_{\mathsf{T}}(z) = (e^{\beta J} - z)^2 - e^{-2\beta J} \tag{2}$$

De eigenwaarden kan men verkrijgen via $k_{\mathsf{T}}(z) = 0$, er volgt:

$$e^{2\beta J} - 2e^{\beta J} z + z^2 - \frac{1}{e^{2\beta J}} = 0 \tag{3}$$

We verkrijgen een tweedegraadsvergelijking, en dus worden de oplossingen gegeven door $x = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}$, toegepast op onze vergelijking geeft dit onze eigenwaarden:

$$\lambda_1 = e^{\beta J} + e^{-\beta J}, \lambda_2 = e^{\beta J} - e^{-\beta J} \tag{4}$$

Dit geeft ons de diagonaalmatrix D:

$$\mathsf{D} = \begin{bmatrix} e^{\beta J} + e^{-\beta J} & 0 \\ 0 & e^{\beta J} - e^{-\beta J} \end{bmatrix} \tag{5}$$

Nu bepalen we U, waarvan de kolommen van desbetreffende matrix overeenkomen met eigenvectoren, gelegen in de eigenruimtes:

$$\mathsf{T}v = \lambda v \implies \begin{bmatrix} e^{\beta J} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \tag{6}$$

Oplossen naar x en y geeft ons de eigenruimte per eigenwaarde: $V_{\lambda_1} = \{(r, r) | r \in \mathbb{R}\}$, $V_{\lambda_2} = \{(-r, r) | r \in \mathbb{R}\}$. We kiezen $r = 1$ voor beide eigenruimtes, dit geeft ons een U:

$$\mathsf{U} = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{7}$$

De inverse U^{-1} kunnen we vinden door $(\mathsf{U}|\mathsf{I}_2)$ te rijreduceren tot de vorm $(\mathsf{I}_2|\mathsf{A})$ waarbij $\mathsf{A} = \mathsf{U}^{-1}$, er volgt:

$$\mathsf{U}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \tag{8}$$

Zo wordt UDU^{-1}:

$$\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}e^{\beta J}+e^{-\beta J} & 0\\ 0 & e^{\beta J}-e^{-\beta J}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix} \tag{9}$$

Men kan nu gemakkelijk T^{L-1} berekenen via $\mathsf{UU}^{-1} = \mathsf{I}_2$(definitie invers element bij matrixvermenigvuldiging) en associativiteit van matrixvermenigvuldiging:

$$\mathsf{T}^{L-1} = (\mathsf{UDU}^{-1})^{L-1} = \mathsf{UDU}^{-1}\mathsf{UDU}^{-1}...\mathsf{UDU}^{-1} = \mathsf{UDI}_2\mathsf{DI}_2...\mathsf{DU}^{-1} = \mathsf{UD}^{L-1}\mathsf{U}^{-1} \tag{10}$$

Er volgt:

$$\begin{aligned}\mathsf{T}^{L-1} &= \begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1} & 0\\ 0 & (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\\ \implies \mathsf{T}^{L-1} &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\\ (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{11}$$

Vraag 2

Bereken nu Z als functie van βJ en van L, zowel voor vrije randvoorwaarden (Z_1) als voor vaste gelijke randvoorwaarden $s_1 = s_L = +1(Z_2)$ alsook met vaste tegengestelde randvoorwaarden $s_1 = -s_L = +1(Z_3)$(construeer dus ook de juiste vector v_L die bij de keuze $s_L = -1$ hoort).

(2.1) Z_1 voor vrije randvoorwaarden

Gegeven is dat $Z = v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{T}^{L-1}v_L$ en dat v_1 en v_L de randvoorwaarden representeren/bepalen. Voor geen of vrije randvoorwaarden worden ze gegeven door $v_1 = v_L = \begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}$. Hier kunnen we dus al een corresponderende Z_1 verkrijgen:

$$\begin{aligned}Z_1 &= \begin{bmatrix}1 & 1\end{bmatrix}\frac{1}{2}\begin{bmatrix}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\\ (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\1\end{bmatrix}\\ \implies Z_1 &= 2(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}\end{aligned}$$

(2.2) Z_2 voor positieve, gelijke randvoorwaarden

Ook is er gegeven dat $v_L = v_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ voor vaste gelijke randvoorwaarden $s_1 = s_L = +1$. Hieruit volgt op analoge wijze een Z_2:

$$\begin{aligned}Z_2 &= \begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\frac{1}{2}\begin{bmatrix}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\\ (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}\\ \implies Z_2 &= \frac{1}{2}((e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1})\end{aligned}$$

(2.3) Z_3 voor tegengestelde randvoorwaarden

Ten slotte dienen we v_1 en v_L voor vaste, tegengestelde randvoorwaarden te zoeken als we trachtten Z_3 te bepalen. In vraag 1 werden er enkele associaties vrijgegeven bij matrix T. Zo onderzoeken we het effect dat v_1 en v_L hebben op de eerste matrix T_1 in T^{L-1} en op de (L-1)ste T_{L-1} respectievelijk. We gaan dus via voorgaande associaties een 'algemene' vorm opstellen voor de eerste en laatste matrix in het matrixproduct T^{L-1} waarbij $\rho'(s_i, s_{i+1})$ de ongenormaliseerde kans voorstelt op de geassocieerde configuratie zodanig dat we duidelijk de invloed van v_1 en v_L kunnen vastleggen:

$$\begin{aligned}\mathsf{T}_1 &= \begin{bmatrix}\rho'(s_1=1, s_2=1) & \rho'(s_1=1, s_2=-1)\\ \rho'(s_1=-1, s_2=1) & \rho'(s_1=-1, s_2=-1)\end{bmatrix}\\ \mathsf{T}_{L-1} &= \begin{bmatrix}\rho'(s_{L-1}=1, s_L=1) & \rho'(s_{L-1}=1, s_L=-1)\\ \rho'(s_{L-1}=-1, s_L=1) & \rho'(s_{L-1}=-1, s_L=-1)\end{bmatrix}\end{aligned}$$

$v_L = v_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ correspondeert met vaste, gelijke randvoorwaarden(gegeven). Passen we v_1^{T} toe via linkse vermenigvuldiging op T_1, dan volgt er:

$$v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{T}_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix}\rho'(s_1=1,s_2=1) & \rho'(s_1=1,s_2=-1)\\ \rho'(s_1=-1,s_2=1) & \rho'(s_1=-1,s_2=-1)\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\rho'(s_1=1,s_2=1) & \rho'(s_1=1,s_2=-1)\end{bmatrix} \tag{12}$$

Analoog voor v_L op T_{L-1} via rechtse vermenigvuldiging:

$$\mathsf{T}_{L-1}v_L = \begin{bmatrix}\rho'(s_{L-1}=1,s_L=1) & \rho'(s_{L-1}=1,s_L=-1)\\ \rho'(s_{L-1}=-1,s_L=1) & \rho'(s_{L-1}=-1,s_L=-1)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\rho'(s_{L-1}=1,s_L=1)\\ \rho'(s_{L-1}=-1,s_L=1)\end{bmatrix} \tag{13}$$

En zo zien we inderdaad dat via deze keuze van v_1 en v_L, enkel de gevallen worden meegerekend waarin $s_L = s_1 = 1$. Voor $s_1 = -s_L = 1$ kan men dan via deze redenering op het zicht zien dat $v_1 = \begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ en $v_L = \begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$. Zo kunnen we Z_3 berekenen:

$$Z_3 = \begin{bmatrix}1 & 0\end{bmatrix}\frac{1}{2}\begin{bmatrix}(e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\\ (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1} & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}+(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}$$
$$\implies Z_3 = \frac{1}{2}((e^{\beta J}+e^{-\beta J})^{L-1}-(e^{\beta J}-e^{-\beta J})^{L-1})$$

Vraag 3

Stel nu dat we de gemiddelde energie $\langle E\rangle = \sum_c E(c)p(c)$ willen berekenen, die dus in meer detail gegeven wordt door

$$\langle E\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{i=1}^{L-1}\sum_{s_1,s_2,\ldots,s_L}(-Js_is_{i+1})exp(+\beta J\sum_{i+1}^{L-1}s_is_{i+1}) \tag{14}$$

Toon aan dat deze uitdrukking wordt bekomen via

$$\langle E\rangle = \frac{1}{Z}\begin{bmatrix}v_1\\0\end{bmatrix}^{\mathsf{T}}\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^{L-1}\begin{bmatrix}0\\v_L\end{bmatrix} \tag{15}$$

Waarbij de matrixelementen van M gegeven worden door $-Js_is_{i+1}exp(+\beta Js_is_{i+1})$.

We beginnen met een onderzoek naar de structuur van $\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^n$ voor generieke M en T en $n \in \mathbb{N}$. Na het uitwerken van enkele simplistische waarden voor n (bv. 1, 2 en 3) vindt men al snel een verband:

$$\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^n = \begin{bmatrix}\mathsf{T}^2 & \mathsf{TM}+\mathsf{MT}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^{n-2}$$
$$\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^n = \begin{bmatrix}\mathsf{T}^3 & \mathsf{T}^2\mathsf{M}+\mathsf{TMT}+\mathsf{MT}^2\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^{n-3}$$
$$\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^n = \begin{bmatrix}\mathsf{T}^n & \sum_{i=1}^n \mathsf{T}^{n-i}\mathsf{M}\mathsf{T}^{i-1}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^n\end{bmatrix}$$

Nu trachtten we aan te tonen dat vergelijking 14 volgt uit 15. Als we ons gevonden verband toepassen op vergelijking 15 volgt er:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{Z}\begin{bmatrix}v_1\\0\end{bmatrix}^{\mathsf{T}}\begin{bmatrix}\mathsf{T}^{L-1} & \sum_{i=1}^{L-1}\mathsf{T}^{L-1-i}\mathsf{M}\mathsf{T}^{i-1}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^{L-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\v_L\end{bmatrix} \tag{16}$$

Verder uitwerken geeft:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle &= \frac{1}{Z}\begin{bmatrix}v_1\\0\end{bmatrix}^{\mathsf{T}}\begin{bmatrix}\mathsf{T}^{L-1} & \sum_{i=1}^{L-1}\mathsf{T}^{L-1-i}\mathsf{M}\mathsf{T}^{i-1}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^{L-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\v_L\end{bmatrix}\\ &= \frac{1}{Z}\begin{bmatrix}v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{T}^{L-1} & v_1^{\mathsf{T}}\sum_{i=1}^{L-1}\mathsf{T}^{L-1-i}\mathsf{M}\mathsf{T}^{i-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0\\v_L\end{bmatrix}\\ &= \frac{1}{Z}\sum_{i=1}^{L-1}v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{T}^{L-1-i}\mathsf{M}\mathsf{T}^{i-1}v_L\end{aligned}$$

Men kan via de expliciete uitdrukkingen voor T en M aantonen dat deze commuteren. i.e. $[\mathsf{M},\mathsf{T}^n]=0$ met $n\in\mathbb{N}_0$ een arbitraire macht van T zodat het geldt voor elke n:

$$\begin{aligned}
[\mathsf{M},\mathsf{T}^n] &= \mathsf{MT}^n - \mathsf{T}^n\mathsf{M} \\
&= \begin{bmatrix} -Je^{\beta J} & Je^{-\beta J} \\ Je^{-\beta J} & -Je^{\beta J} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n + (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n - (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n \\ (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n - (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n + (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n \end{bmatrix} \\
&- \begin{bmatrix} (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n + (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n - (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n \\ (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n - (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n & (e^{\beta J}+e^{-\beta J})^n + (e^{\beta J}-e^{-\beta J})^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -Je^{\beta J} & Je^{-\beta J} \\ Je^{-\beta J} & -Je^{\beta J} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Via matrixvermenigvuldiging kan men eenvoudig zien dat de twee termen gelijk zijn en dus volgt er: $\mathsf{MT}^n=\mathsf{T}^n\mathsf{M}$. Zo wordt onze bovenstaand bekomen sommatie:

$$\langle E\rangle = \frac{1}{Z}\sum_{i=1}^{L-1} v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{MT}^{L-2}v_L \tag{17}$$

De elementen van M zijn niks anders dan $E(c)\rho(c)$, elk geassocieerd met een specifieke configuratie van naburige sites s_i en s_{i+1}. Zoals besproken in Vraag 1, valt T te interpreteren als een (ongenormaliseerde) kansmatrix van mogelijke toestanden van naburige sites. De sommatie sommeert over elk paar naburige sites, zijnde s_i en s_{i+1}, en de matrixmultiplicatie brengt alle mogelijke configuraties van deze naburige sites in rekening. Zo krijgt men niks anders dan een som van energieën van verschillende configuraties, met een bijbehorende ongenormaliseerde kans, maal de factor $\frac{1}{Z}$. Toepassen van de definitie van onze normalisatiefactor Z, geeft ons dan een som van energieën van de mogelijke configuraties, met bijbehorende genormaliseerde kans $\sum_c E(c)\rho(c)$ wat precies het gevraagde is.

Vraag 4

Bereken nu expliciet de macht $\mathsf{A}^{L-1}=\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}^{L-1}$ voor de specifieke T en M uit bovenstaande vraag. Bereken op deze manier nu ook de gemiddelde energie $\langle E\rangle_1$, $\langle E\rangle_2$ en $\langle E\rangle_3$ voor de drie soorten randvoorwaarden.

(4.1) Berekening A^{L-1}

We definiëren $\mathsf{V}=\begin{bmatrix}\mathsf{U} & \mathsf{O}\\ \mathsf{O} & \mathsf{U}\end{bmatrix}$ en bijbehorende inverse $\mathsf{V}^{-1}=\begin{bmatrix}\mathsf{U}^{-1} & \mathsf{O}\\ \mathsf{O} & \mathsf{U}^{-1}\end{bmatrix}$ Men kan aantonen dat:

$$\begin{aligned}
\mathsf{V}^{-1}\mathsf{AV} &= \begin{bmatrix}\mathsf{U}^{-1} & \mathsf{O}\\ \mathsf{O} & \mathsf{U}^{-1}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathsf{T} & \mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{T}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathsf{U} & \mathsf{O}\\ \mathsf{O} & \mathsf{U}\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}\mathsf{U}^{-1}\mathsf{T} & \mathsf{U}^{-1}\mathsf{M}\\ \mathsf{O} & \mathsf{U}^{-1}\mathsf{T}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\mathsf{U} & \mathsf{O}\\ \mathsf{O} & \mathsf{U}\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}\mathsf{U}^{-1}\mathsf{TU} & \mathsf{U}^{-1}\mathsf{MU}\\ \mathsf{O} & \mathsf{U}^{-1}\mathsf{TU}\end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Hier is $\mathsf{U}^{-1}\mathsf{TU}$ niks anders dan D, want $\mathsf{T}=\mathsf{UDU}^{-1}$. $\mathsf{U}^{-1}\mathsf{MU}$ wordt:

$$\begin{aligned}
\mathsf{U}^{-1}\mathsf{MU} &= \begin{bmatrix}\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} -Je^{\beta J} & Je^{-\beta J} \\ Je^{-\beta J} & -Je^{\beta J} \end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix}\frac{1}{2}(Je^{-\beta J}-Je^{\beta J}) & \frac{1}{2}(Je^{-\beta J}-Je^{\beta J})\\ \frac{1}{2}(Je^{-\beta J}+Je^{\beta J}) & \frac{1}{2}(-Je^{-\beta J}-Je^{\beta J})\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix} \\
&= J\begin{bmatrix}e^{-\beta J}-e^{\beta J} & 0\\ 0 & -(e^{-\beta J}+e^{\beta J})\end{bmatrix} =: \mathsf{B}
\end{aligned}$$

Zo is:

$$\mathsf{V}^{-1}\mathsf{AV} = \begin{bmatrix}\mathsf{D} & \mathsf{B}\\ \mathsf{O} & \mathsf{D}\end{bmatrix} =: \mathsf{C}$$

Equivalent:

$$
\begin{aligned}
\mathsf{A} &= \mathsf{VCV}^{-1} \\
&= \begin{bmatrix} \mathsf{U} & \mathsf{O} \\ \mathsf{O} & \mathsf{U} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{D} & \mathsf{B} \\ \mathsf{O} & \mathsf{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{U}^{-1} & \mathsf{O} \\ \mathsf{O} & \mathsf{U}^{-1} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

In vraag 1 hebben we T gedecomposeerd als $\mathsf{T} = \mathsf{UDU}^{-1}$ zodat we T^{L-1} makkelijk konden berekenen. Hier volgen we een analoge redenering, de decompositie van A naar VCV^{-1} laat ons toe A^{L-1} eenvoudig te bepalen:

$$
\begin{aligned}
\mathsf{A}^{L-1} &= (\mathsf{VCV}^{-1})^{L-1} = \mathsf{VCV}^{-1} \cdot \mathsf{VCV}^{-1} \cdot \ldots \cdot \mathsf{VCV}^{-1} = \mathsf{VCI}_4 \cdot \mathsf{CI}_4 \cdot \ldots \cdot \mathsf{CV}^{-1} = \mathsf{VC}^{L-1}\mathsf{V}^{-1} \\
&= \begin{bmatrix} \mathsf{U} & \mathsf{O} \\ \mathsf{O} & \mathsf{U} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{D} & \mathsf{B} \\ \mathsf{O} & \mathsf{D} \end{bmatrix}^{L-1} \begin{bmatrix} \mathsf{U}^{-1} & \mathsf{O} \\ \mathsf{O} & \mathsf{U}^{-1} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

Uit de gevonden formule voor matrices van deze vorm uit vraag 3 weten we dat:

$$
\mathsf{C}^{L-1} = \begin{bmatrix} \mathsf{D}^{L-1} & \sum_{i=1}^{L-1} \mathsf{D}^{L-1-i}\mathsf{BD}^{i-1} \\ \mathsf{O} & \mathsf{D}^{L-1} \end{bmatrix} \tag{18}
$$

Als $[\mathsf{D}^n, \mathsf{B}] = 0$ met $n \in \mathbb{N}_0$ dan valt de sommatie weg te werken. We controleren of dit geldt:

$$
\begin{aligned}
[\mathsf{D}^n, \mathsf{B}] &= J\left(\begin{bmatrix} (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^n & 0 \\ 0 & (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-\beta J} - e^{\beta J} & 0 \\ 0 & -(e^{-\beta J} + e^{\beta J}) \end{bmatrix}\right. \\
&\quad \left. - \begin{bmatrix} e^{-\beta J} - e^{\beta J} & 0 \\ 0 & -(e^{-\beta J} + e^{\beta J}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^n & 0 \\ 0 & (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^n \end{bmatrix}\right) \\
&= J\left(\begin{bmatrix} (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^n(e^{-\beta J} - e^{\beta J}) & 0 \\ 0 & -(e^{\beta J} - e^{-\beta J})^n(e^{-\beta J} + e^{\beta J}) \end{bmatrix}\right. \\
&\quad \left. - \begin{bmatrix} (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^n(e^{-\beta J} - e^{\beta J}) & 0 \\ 0 & -(e^{\beta J} - e^{-\beta J})^n(e^{-\beta J} + e^{\beta J}) \end{bmatrix}\right) = 0
\end{aligned}
$$

Dit impliceert dat $\mathsf{D}^n\mathsf{B} = \mathsf{BD}^n$ voor elke $n \in \mathbb{N}_0$, en dus vereenvoudigt vergelijking 18 naar:

$$
\mathsf{C}^{L-1} = \begin{bmatrix} \mathsf{D}^{L-1} & (L-1)\mathsf{D}^{L-2}\mathsf{B} \\ \mathsf{O} & \mathsf{D}^{L-1} \end{bmatrix} \tag{19}
$$

Dit volgt uit het commuteren van B en D omdat we dan de exponenten van D mogen optellen: $L-1-i+i-1 = L-2$. De term binnen de sommatie is dus compleet onafhankelijk van i, maar er zijn nogsteeds $(L-1)$ termen, dus moeten we ten slotte nog maal het aantal termen doen. Zo kunnen we A^{L-1} dus schrijven als:

$$
\begin{aligned}
\mathsf{A}^{L-1} &= \begin{bmatrix} \mathsf{U} & \mathsf{O} \\ \mathsf{O} & \mathsf{U} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{D}^{L-1} & (L-1)\mathsf{D}^{L-2}\mathsf{B} \\ \mathsf{O} & \mathsf{D}^{L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathsf{U}^{-1} & \mathsf{O} \\ \mathsf{O} & \mathsf{U}^{-1} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \mathsf{UD}^{L-1}\mathsf{U}^{-1} & (L-1)\mathsf{UD}^{L-2}\mathsf{BU}^{-1} \\ \mathsf{O} & \mathsf{UD}^{L-1}\mathsf{U}^{-1} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \mathsf{T}^{L-1} & (L-1)\mathsf{UD}^{L-2}\mathsf{BU}^{-1} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^{L-1} \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

(4.2) Gemiddelde energie $\langle E \rangle$

Nu trachtten we de gemiddelde energie voor verschillende randvoorwaarden $\langle E \rangle$ te berekenen, via oefening 3 weten we dat deze gegeven worden door:

$$
\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \begin{bmatrix} v_1 \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} \mathsf{T}^{L-1} & (L-1)\mathsf{UD}^{L-2}\mathsf{BU}^{-1} \\ \mathsf{O} & \mathsf{T}^{L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ v_L \end{bmatrix} \tag{20}
$$

Uitwerken zonder de randvoorwaarden te specifiëren geeft:

$$
\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \frac{1}{Z} \begin{bmatrix} v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{T}^{L-1} & (L-1)v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{UD}^{L-2}\mathsf{BU}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ v_L \end{bmatrix} \\
&= \frac{L-1}{Z} v_1^{\mathsf{T}}\mathsf{UD}^{L-2}\mathsf{BU}^{-1}v_L
\end{aligned}
$$

Voor simplificerende redenen herkennen en substitueren we in D en B onze eigenwaarden, zijnde $\lambda_1 = e^{\beta J} + e^{-\beta J}$ en $\lambda_2 = e^{\beta J} - e^{-\beta J}$. Nu werken we verder uit:

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle &= \frac{(L-1)}{Z} v_1^{\mathsf{T}} \mathsf{U} \mathsf{D}^{L-2} \mathsf{B} \mathsf{U}^{-1} v_L \\
&= \frac{J(L-1)}{Z} v_1^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_1^{L-2} & 0 \\ 0 & \lambda_2^{L-2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\lambda_2 & 0 \\ 0 & -\lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} v_L \\
&= \frac{J(1-L)}{2Z} v_1^{\mathsf{T}} \begin{bmatrix} \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \\ \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \end{bmatrix} v_L
\end{aligned}$$

(4.2.1) Gemiddele energie $\langle E \rangle_1$ voor vrije randvoorwaarden

Nu weten we dat voor vrije randvoorwaarden $Z_1 = 2(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} = 2\lambda_1^{L-1}$ en $v_L = v_1^{\mathsf{T}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ Dit invullen in bovenstaande uitdrukking geeft:

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle_1 &= \frac{J(1-L)}{4\lambda_1^{L-1}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \\ \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= \frac{J(1-L)}{4\lambda_1^{L-1}} 4\lambda_2\lambda_1^{L-2} = J(1-L)\frac{\lambda_2}{\lambda_1} = J(1-L)\frac{(e^{\beta J} - e^{-\beta J})}{(e^{\beta J} + e^{-\beta J})}
\end{aligned}$$

(4.2.2) Gemiddele energie $\langle E \rangle_2$ voor gelijke, positieve randvoorwaarden

Analoog geldt er voor gelijke positieve randvoorwaarden $Z_2 = \frac{1}{2}((e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} + (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}) = \frac{1}{2}(\lambda_1^{L-1} + \lambda_2^{L-1})$ en $v_L = v_1^{\mathsf{T}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$. Er volgt:

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle_2 &= \frac{J(1-L)}{\lambda_1^{L-1} + \lambda_2^{L-1}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \\ \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \\
&= \frac{J(1-L)}{\lambda_1^{L-1} + \lambda_2^{L-1}} (\lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1) \\
&= \frac{J(1-L)}{(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} + (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}} ((e^{\beta J} - e^{-\beta J})(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-2} + (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-2}(e^{\beta J} + e^{-\beta J}))
\end{aligned}$$

(4.2.3) Gemiddele energie $\langle E \rangle_3$ voor tegengestelde randvoorwaarden

Ten slotte dienen we de gemiddelde energie voor tegengestelde randvoorwaarden te vinden, hiervoor geldt $Z_3 = \frac{1}{2}((e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} - (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}) = \frac{1}{2}(\lambda_1^{L-1} - \lambda_2^{L-1})$, $v_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}$ en $v_L = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$. Er volgt:

$$\begin{aligned}
\langle E \rangle_3 &= \frac{J(1-L)}{\lambda_1^{L-1} - \lambda_2^{L-1}} \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \\ \lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1 & \lambda_2\lambda_1^{L-2} + \lambda_2^{L-2}\lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \\
&= \frac{J(1-L)}{\lambda_1^{L-1} - \lambda_2^{L-1}} (\lambda_2\lambda_1^{L-2} - \lambda_2^{L-2}\lambda_1) \\
&= \frac{J(1-L)}{(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} - (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}} ((e^{\beta J} - e^{-\beta J})(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-2} - (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-2}(e^{\beta J} + e^{-\beta J}))
\end{aligned}$$

Vraag 5

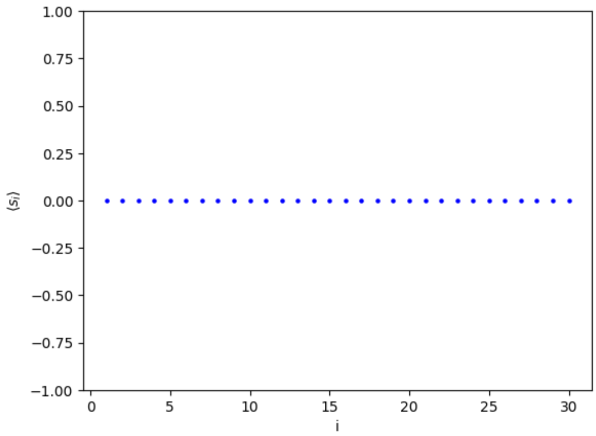
Tot slot zijn we ook geïnteresseerd in gemiddelde 'magnetisatie' op een bepaalde site in het rooster, dus

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{s_1, s_2, .., s_L} s_i \exp(+\beta J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1}) = \frac{1}{Z} v_1^{\mathsf{T}} \mathsf{T}^{i-1} \mathsf{S} \mathsf{T}^{L-i} v_L \tag{21}$$

met $\mathsf{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$. Maak (numeriek) een grafiekje voor de gemiddelde magnetisatie $\langle s_i$ voor $i = 1, ..., L$ en dit voor $\beta J = 1$ en $L = 30$, waarbij je opnieuw de drie verschillende randvoorwaarden beschouwd.

(5.1) Gemiddelde magnetisatie per site voor vrije randvoorwaarden

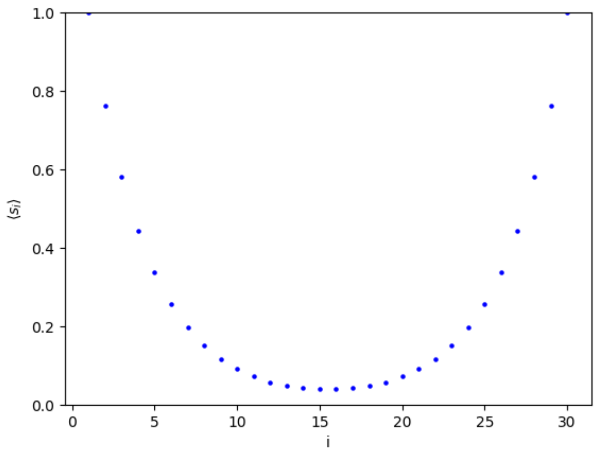
Voor de eerste situatie met vrije randvoorwaarden, i.e. $Z_1 = 2(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} = 2\lambda_1^{L-1}$ en $v_L = v_1^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$ krijgen we Figuur 1.



Figuur 1: Gemiddelde magnetisatie per site i bij $\beta J = 1$ en $L = 30$ met vrije randvoorwaarden

(5.2) Gemiddelde magnetisatie per site voor gelijke randvoorwaarden

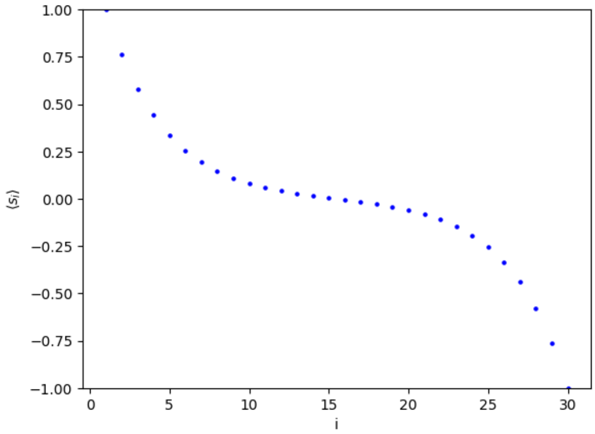
Voor de tweede situatie met gelijke, positieve randvoorwaarden, i.e. $Z_2 = \frac{1}{2}((e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} + (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}) = \frac{1}{2}(\lambda_1^{L-1} + \lambda_2^{L-1})$ en $v_L = v_1^\mathsf{T} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$ vinden we Figuur 2.



Figuur 2: Gemiddelde magnetisatie per site i bij $\beta J = 1$ en $L = 30$ met gelijke, positieve randvoorwaarden

(5.3) Gemiddelde magnetisatie per site voor tegengestelde randvoorwaarden

Ten slotte voor de situatie met tegengestelde randvoorwaarden, i.e. $Z_3 = \frac{1}{2}((e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} - (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}) = \frac{1}{2}(\lambda_1^{L-1} - \lambda_2^{L-1})$, $v_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \end{bmatrix}$ en $v_L = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$, vinden we Figuur 3.



Figuur 3: Gemiddelde magnetisatie per site i bij $\beta J = 1$ en $L = 30$ met tegengestelde randvoorwaarden

Bonus

Bonus 1

Kan je verklaren waarom in het geval van vrije randvoorwaarden, $\langle s_i \rangle_1 = 0$ voor alle i? Voor de magnetisatie met vaste randvoorwaarden, bijvoorbeeld $\langle s_i \rangle_2$, daalt deze als functie van i (afstand tot de rand) tot in het midden van het rooster.

De definitie van $\langle s_i \rangle$ valt te herschrijven als $\langle s_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_c s_i \prod_{j=1}^{L-1} \rho'(s_j, s_{j+1})$ waarbij ρ' wederom de ongenormaliseerde kans is. We weten echter dat de ongenormaliseerde kansen gelijk zijn voor gevallen waar het teken van s_j en s_{j+1} gelijk zijn (namelijk $e^{\beta J}$), de ongenormaliseerde kans waar de tekens tegengesteld zijn, zijn ook gelijk aan elkaar (namelijk $e^{-\beta J}$). Als men sommeert over alle sites, dan vinden we dat voor elke i met vrije randvoorwaarden de kans even groot is dat $s_i = +1$ of $s_i = -1$. En dus is per definitie van een gemiddelde, de gemiddelde magnetisatie gelijk aan 0 voor vrije randvoorwaarden. Als men een blik werpt op de situatie waar de randvoorwaarden dicteren dat $s_1 = s_L = +1$, dan zien we inderdaad dat de gemiddelde magnetisatie voor $i = 1$ en $i = L$ gelijk is aan +1. Men kan ook waarnemen dat er een dalend, en dan weer stijgend verband opduikt voor $1 < i < 30$. Dit is te wijten aan het feit dat de ongenormaliseerde kans afhankelijk is van de magnetisaties van *twee* sites. Zo kunnen we deduceren dat als bv. een randvoorwaarde dicteert dat $s_1 = +1$, dat s_2 een hogere kans(maar geen absolute kans zoals voor s_1) heeft om $s_2 = +1$ aan te nemen, en zo heeft s_3 ook weer een verhoogde kans(*lager* dan die voor $s_2 = +1$) om $s_3 = +1$ aan te nemen, zo wordt de ongenormaliseerde kans dat $s_i = +1$ alsmaar kleiner naarmate i vordert met deze specifieke randvoorwaarde, maar wel groter als nul(afhankelijk van de randvoorwaarde voor s_L) wat een directe consequentie is van een ongenormaliseerde kans die afhankelijk is van twee opeenvolgende sites. En dus als L groter is, zullen we zien dat de gemiddelde magnetisatie naar nul convergeert voor eender welke randvoorwaarden(triviaal voor vrije randvoorwaarden).