Ising model

Oscar Marchand
Tweede Bachelor Fysica en Sterrenkunde 19/11/2023

1 vraag 1

T bevat de elementen $e^{\beta J s_i s_{i+1}}$. Het teken van de exponent wordt bepaald door de waarde van s_i en s_{i+1}, dus:

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

neem voor simplificatie $\alpha = e^{\beta J}$
om nu T te diagonaliseren berekenen we de karakteristieke veelterm:

$$\begin{aligned} det(T - \lambda I) &= 0 \\ \Leftrightarrow \begin{vmatrix} \alpha - \lambda & \alpha^{-1} \\ \alpha^{-1} & \alpha - \lambda \end{vmatrix} &= 0 \\ \Leftrightarrow (\alpha - \lambda)^2 - \alpha^{-2} &= 0 \\ \Leftrightarrow (\alpha - \lambda)^2 \alpha^2 - 1 &= 0 \\ \Leftrightarrow ((\alpha - \lambda)\alpha - 1)((\alpha - \lambda)\alpha + 1) &= 0 \\ \Leftrightarrow \lambda_1 &= \frac{\alpha^2 - 1}{\alpha} \vee \lambda_2 = \frac{\alpha^2 + 1}{\alpha} \end{aligned}$$

Dit geeft ons de eigenwaarden:

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

De eigenvectoren vinden we voor een zeker v = $[x, y]^T$ voor λ_1:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \alpha & \alpha^{-1} \\ \alpha^{-1} & \alpha \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} &= (\alpha - \alpha^{-1}) \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} (\alpha - (\alpha - \alpha^{-1})x + \alpha^{-1}y) \\ \alpha^{-1}x + (\alpha - (\alpha - \alpha^{-1})y \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ x + y &= 0 \end{aligned}$$

Dit geeft ons de eigenvector:

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{2}$$

Analoog vinden we de tweede eigenvector:

$$v_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{3}$$

Dit geeft ons:

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$
$$D = \begin{bmatrix} e^{\beta J} - e^{-\beta J} & 0 \\ 0 & e^{\beta J} + e^{-\beta J} \end{bmatrix}$$

We vinden voor U^{-1}:

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

2 Vraag 2

We weten:

$$Z = v_1^T U D^{L-1} U^{-1} v_L \tag{4}$$

2.1 vrije randvoorwaarden

hierbij geldt $v_1 = v_L = [1,1]^T$
Verder weten we ook dat $T^n = UD^nU^{-1}$, dus dan wordt (4):

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

2.2 $s_1 = s_L = 1$

Hierbij geldt $v_1 = v_L = [1,0]^T$, dus:

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

2.3 $s_1 = 1$ en $s_L = -1$

Wanneer je in 2.2 T vermenigvuldigt met de vectoren v_1 en v_L wordt respectievelijk de eerste rij en de eerste kolom uit de matrix gehaald, bijvoorbeeld:

$$\begin{bmatrix}\alpha & \alpha^{-1}\\ \alpha^{-1} & \alpha\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\alpha\\ \alpha^{-1}\end{bmatrix}$$

Dit komt doordat de eerste rij 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 geassocieerd is. Voor $s_L = -1$ hebben we de tweede kolom nodig, dus $v_L = [0,1]^T$
Dit geeft:

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

3 Vraag 3

Laat ons eerst kijken hoe $\begin{bmatrix}T & M\\ O & T\end{bmatrix}$ verandert bij verschillende exponenten

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix}T & M\\ O & T\end{bmatrix}^2 &= \begin{bmatrix}T^2 & TM+MT\\ O & T^2\end{bmatrix}\\
\begin{bmatrix}T & M\\ O & T\end{bmatrix}^3 &= \begin{bmatrix}T^3 & T^2M+(TM+MT)T\\ O & T^3\end{bmatrix}\\
\begin{bmatrix}T & M\\ O & T\end{bmatrix}^4 &= \begin{bmatrix}T^4 & T^3M+T^2MT+TMT^2+MT^3\\ O & T^4\end{bmatrix}
\end{aligned}$$

Dit kunnen we verder en verder blijven doen, maar uiteindelijk vinden we:

$$\begin{bmatrix} T & M \\ O & T \end{bmatrix}^n = \begin{bmatrix} T^n & \sum\limits_{i=1}^{n} T^{n-i} M T^{i-1} \\ O & T^2 \end{bmatrix} \tag{5}$$

We moeten nu aantonen dat:

$$\begin{bmatrix} v_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} T^{L-1} & \sum\limits_{i=1}^{L-1} T^{L-1-i} M T^{i-1} \\ O & T^{L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ v_L \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^{L-1} \sum_{s_1 \to s_L} (-J s_i s_{i+1}) exp\left(\beta J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1}\right) \tag{6}$$

Begin met het linker lid uit te werken:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} v_1 \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} T^{L-1} & \sum\limits_{i=1}^{L-1} T^{L-1-i} M T^{i-1} \\ O & T^{L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ v_L \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} v_1^T T^{L-1}, v_1^T \sum\limits_{i=1}^{L-1} T^{L-1-i} M T^{i-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ v_L \end{bmatrix} \\ &= \sum_{i=1}^{L-1} v_1^T T^{L-1-i} M T^{i-1} v_L \end{aligned}$$

Laten we dit uitrekenen:
We weten eerst en vooral:

$$T^{L-1-i} M T^{i-1} = U D^{L-1-i} U^{-1} M U D^{i-1} U \tag{7}$$

We werken van binnen naar buiten

$$\begin{aligned} U^{-1} M U &= \begin{bmatrix} -J\lambda_2 & 0 \\ 0 & -J\lambda_1 \end{bmatrix} \\ D^{L-1-i} U^{-1} M U D^{i-1} &= -J\lambda_1\lambda_2 \begin{bmatrix} \lambda_1^{L-3} & 0 \\ 0 & \lambda_2^{L-3} \end{bmatrix} \\ U D^{L-1-i} U^{-1} M U D^{i-1} U^{-1} &= -\frac{1}{2} J\lambda_1\lambda_2 \begin{bmatrix} \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} \\ \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

We zien dat de afhankelijkheid van i wegvalt, dus $\sum\limits_{i=1}^{L-1}$ betekent dat er (L-1) keer wordt gesommeerd over één en dezelfde term.
De te bewijzen stelling is gereduceerd tot:

$$\sum_{i=1}^{L-1} \sum_{s_1 \to s_L} (-J s_i s_{i+1}) exp\left(\beta J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1}\right) = -\frac{1}{2} J(L-1)\lambda_1\lambda_2 v_1^T \begin{bmatrix} \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} \\ \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} \end{bmatrix} v_L \tag{8}$$

Als we nu verder rekenen voor $v_1 = v_L = [1, 1]^T$, het geval zonder randvoorwaarden:

$$v_1^T \begin{bmatrix} \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} \\ \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} \end{bmatrix} v_L = 4\lambda_2^{L-3} \tag{9}$$

Het te bewijzen wordt nu:

$$\sum_{i=1}^{L-1} \sum_{s_1 \to s_L} (-J s_i s_{i+1}) exp\left(\beta J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1}\right) = -2J(L-1)\lambda_1\lambda_2^{L-2} \tag{10}$$

Aangezien $\lambda_2 = \alpha + \alpha^{-1}$ kunnen we binomiale expansie toepassen op λ_2^{L-2}:

$$\begin{aligned} -2J(L-1)\lambda_1\lambda_2^{L-2} &= -2J(L-1)(\alpha - \alpha^{-1}) \sum_{k=0}^{L-2} \binom{L-2}{k} \alpha^{L-k-2}\alpha^{-k} \\ &nu : i = k+1 \\ &= -2J(L-1)(\alpha - \alpha^{-1}) \sum_{i=1}^{L-1} \binom{L-2}{i-1} \alpha^{L-2i} \end{aligned}$$

Als we kijken naar het linkerlid van vergelijking (10) kunnen we hier ook een binomiale expansie zien. Bekijk bijvoorbeeld L=3. Hierbij zijn er 3 deeltjes, met elk een mogelijke waarde 1 of -1. In totaal zijn er dus $8 = 2^L$ mogelijke configuraties voor het systeem.

Tabel 1: Mogelijke configuraties

s_1	s_2	s_3
+	+	+
+	+	-
+	-	-
-	-	-
-	-	+
-	+	+
+	-	+
-	+	-

Waarvan we telkens de som nemen $(s_1 s_2 + s_2 s_3)$. We zien dat er configuraties zijn die elkaar opheffen (vb: $\sum$++- = 0) en elkaar versterken (vb: $\sum$ +++ = 2). We zien dan dat +++ en - - - de som 2 maken en dat +-+ en -+- de som -2 maken, waarbij de rest elkaar opheft. Hierin zien we 2 keer een binomiaal-expansie $\binom{1}{x}$ met x=0,1. We hebben dan een structuur -J$(s_1 s_2 + s_2 s_3)e^{\beta J(s_1 s_2 + s_2 s_3)}$ voor elke term. Hetzelfde kunnen we proberen voor verschillende waarden voor L, waarvoor we steeds eenzelfde structuur vinden. Namelijk L-1 keer een binomiaal $\binom{L-1}{x}$ met x=0,...,L-2 maal een factor die voorkomt achter de J en in de exponent. We kunnen intuïtief de formule opstellen:

$$\sum_{i=1}^{L-1} \sum_{s_1 \to s_L} (-J s_i s_{i+1}) exp\left(\beta J \sum_{i=1}^{L-1} s_i s_{i+1}\right) = -2J \sum_{i=1}^{L} (L-2i+1) \binom{L-1}{i-1} \alpha^{L-2i+1} \tag{11}$$

Nu valt er nog te bewijzen

$$-2J \sum_{i=1}^{L} (L-2i+1) \binom{L-1}{i-1} \alpha^{L-2i+1} = -2J(L-1)(\alpha - \alpha^{-1}) \sum_{i=1}^{L-1} \binom{L-2}{i-1} \alpha^{L-2i} \tag{12}$$

Hetgeen heel hard op elkaar lijkt en intuïtief wel juist lijkt te zijn, maar blijkt toch moeilijk te bewijzen. Als we echter enkele gevallen testen, namelijk voor L=2,3,4,5,6 zien we dat dit klopt.

4 vraag 4

We vinden dat:

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

Dus:

$$A = V \begin{bmatrix} D & U^{-1}MU \\ O & D \end{bmatrix} V^{-1} \tag{13}$$

met

$$U^{-1}MU = \begin{bmatrix} -J\lambda_2 & 0 \\ 0 & -J\lambda_1 \end{bmatrix} \tag{14}$$

We definiëren B als:

$$B = \begin{bmatrix} D & U^{-1}MU \\ O & D \end{bmatrix} \tag{15}$$

Voor B vinden we dat:

$$B^n = \begin{bmatrix} D^n & C^n \\ O & D^n \end{bmatrix} \tag{16}$$

met C^n gedefinieerd als:

$$\begin{aligned} C^n &= \begin{bmatrix} -nJ\lambda_1^{n-1}\lambda_2 & 0 \\ 0 & -nJ\lambda_1\lambda_2^{n-1} \end{bmatrix} \\ &= -nJ\lambda_1\lambda_2 \begin{bmatrix} \lambda_1^{n-2} & 0 \\ 0 & \lambda_2^{n-2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Dan is A^{L-1}:

$$\begin{aligned} A^{L-1} &= (VBV^{-1})^{L-1} \\ &= VB^{L-1}V^{-1} \\ &= \begin{bmatrix} U & O \\ O & U \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D^{L-1} & C^{L-1} \\ O & D^{L-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^{-1} & O \\ O & U^{-1} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} T^{L-1} & UC^{L-1}U^{-1} \\ O & T^{L-1} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Hierbij wordt T^{L-1} en $UC^{L-1}U^{-1}$ gegeven door:

$$\begin{aligned} UD^{L-1}U^{-1} &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \lambda_2^{L-1} + \lambda_1^{L-1} & \lambda_2^{L-1} - \lambda_1^{L-1} \\ \lambda_2^{L-1} - \lambda_1^{L-1} & \lambda_2^{L-1} + \lambda_1^{L-1} \end{bmatrix} \\ UC^{L-1}U^{-1} &= -\frac{1}{2}J(L-1)\lambda_1\lambda_2 \begin{bmatrix} \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} \\ \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Waardoor:

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= \frac{1}{Z}[v_1^T, O^T]VB^{L-1}V^{-1} \begin{bmatrix} O \\ v_L \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{Z}[v_1^T U, O^T]B^{L-1} \begin{bmatrix} O \\ U^{-1}v_L \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{Z}v_1^T UC^{L-1}U^{-1}v_L \\ &= -\frac{(L-1)J}{2Z}\lambda_1\lambda_2 v_1^T \begin{bmatrix} \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} \\ \lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3} & \lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3} \end{bmatrix} v_L \end{aligned}$$

Met: $\lambda_1 = e^{\beta J} - e^{-\beta J}$ en $\lambda_2 = e^{\beta J} + e^{-\beta J}$

4.1 vrije randvoorwaarden

Er geldt: $v_1 = v_L = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

$$\langle E \rangle = -\frac{2(L-1)J}{Z}(\alpha - \alpha^{-1})(\alpha + \alpha^{-1})^{L-2}$$

Met $Z = 2(\alpha + \alpha^{-1})^{L-1}$

$$\langle E \rangle = -\frac{J(L-1)(e^{\beta J} - e^{-\beta J})}{e^{\beta J} + e^{-\beta J}} \tag{17}$$

4.2 $s_1 = s_L = 1$

Met $v_1 = v_T = [1, 0]^T$ en $Z = \frac{1}{2}((e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1} + (e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1})$ vinden we:

$$\langle E \rangle = -J(L-1)\lambda_1\lambda_2 \frac{\lambda_2^{L-3} + \lambda_1^{L-3}}{\lambda_2^{L-1} + \lambda_1^{L-1}}$$

of dus:

$$\langle E \rangle = -J(L-1)\frac{(e^{\beta J} - e^{-\beta J})(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-2} + (e^{\beta J} + e^{-\beta J})(e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-2}}{(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} + (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}} \tag{18}$$

4.3 $s_1 = 1$ en $s_L = -1$

Nu is $v_1 = [1,0]^T$ en $v_L = [0,1]^T$ en $Z = \frac{1}{2}((e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} - (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1})$ vinden we:

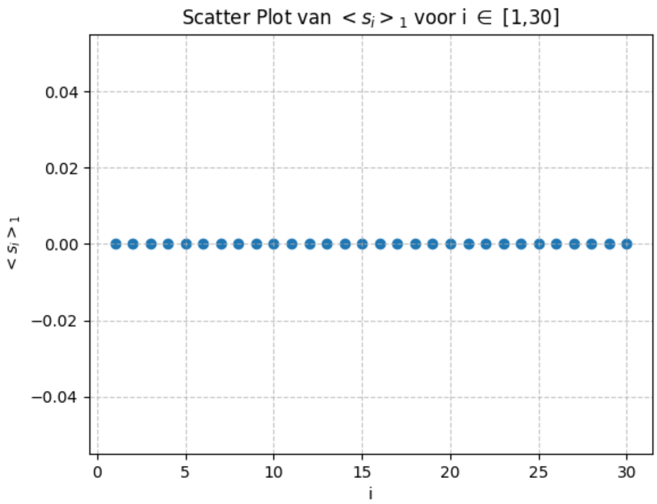
$$\langle E \rangle = -J(L-1)\lambda_1\lambda_2 \frac{\lambda_2^{L-3} - \lambda_1^{L-3}}{\lambda_2^{L-1} - \lambda_1^{L-1}}$$

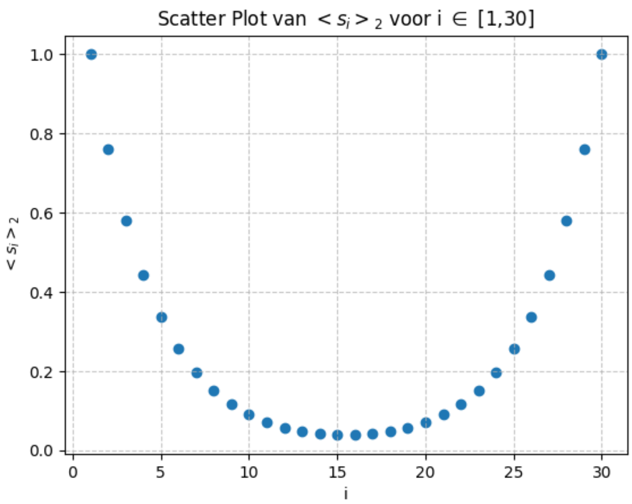
of dus:

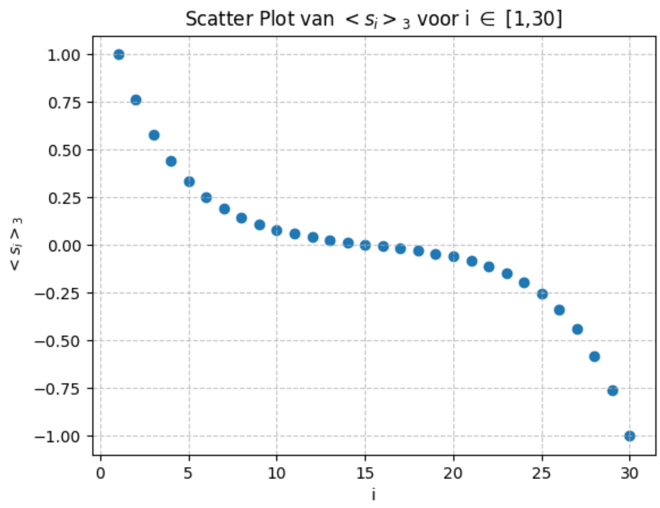
$$\langle E \rangle = -J(L-1) \frac{(e^{\beta J} - e^{-\beta J})(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-2} - (e^{\beta J} + e^{-\beta J})(e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-2}}{(e^{\beta J} + e^{-\beta J})^{L-1} - (e^{\beta J} - e^{-\beta J})^{L-1}} \tag{19}$$

5 Vraag 5

We vinden de volgende figuren:







6 Bonus

6.1 $\langle s_i \rangle_1 = 0$

Zonder randvoorwaarden kan elke s_i een compleet willekeurige waarde aannemen. Er is dus een 50/50 kans tussen 1 en -1. Hierdoor zal de verwachtingswaarde voor een bepaalde s_i 0 zijn, aangezien deze elkaar opheffen.

6.2 exponentiële daling

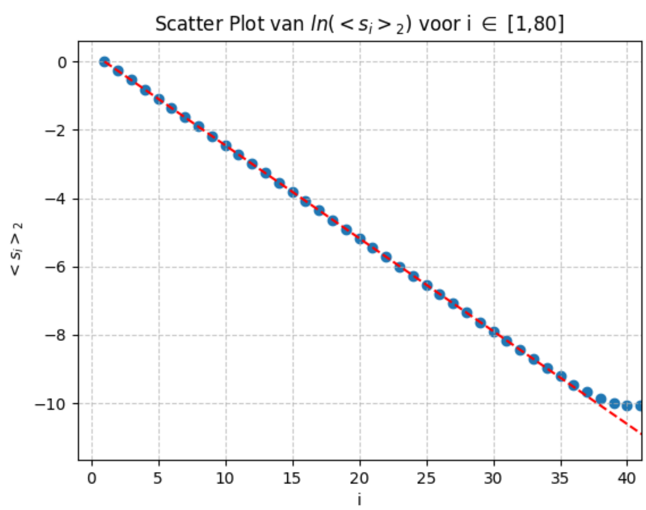
We kunnen dit via lineaire regressie proberen aan te tonen. Bekijk $\langle s_i \rangle$ uit vraag 5, dus bij $\beta J = 1$. We weten dat er een bepaalde constante c is zodat:

$$\langle s_i \rangle = ce^{-i/l} \tag{20}$$

Dus dan is het natuurlijk logaritme daarvan:

$$ln(\langle s_i \rangle) = -\frac{i}{l} + ln(c) \tag{21}$$

We passen nu lineaire regressie toe voor L = 80 op de functie f(x) = ax + b en vinden a = -0,2718 en b = 0,2665. Op de figuur wordt de data getoond voor L = 80 bij $v_1 = v_L = [1, 0]^T$, met de rode stippellijn gelijk aan f(x).



We zien dat deze mooi overeen komt met de data. De functie zou er dus moeten uit zien als:

$$\langle s_i \rangle = 1,305 e^{-\frac{i}{3,679}} \tag{22}$$

Dit toont enkel aan dat er een exponentiële daling is voor grote L. Dit toont geen verband tussen l en βJ.