

W.P.S. Cames van Batenburg

Benaderingen van het Hard Squares Model

Bachelorscriptie, 23 november 2011

Scriptiebegeleider wiskunde: dr. D.C. Gijswijt
Scriptiebegeleider natuurkunde: prof.dr. J.W.M. Frenken



Leiden Institute of Physics, Universiteit Leiden
Mathematisch Instituut, Universiteit Leiden

Inhoudsopgave

1	Inleiding	3
2	Row Transfer Matrices	9
3	Corner Transfer Matrices	21
4	Combinatorische eigenschappen van T_M	29
5	Hard Squares Model als ééndimensionaal probleem	35
6	Monte Carlo	38
7	Resultaten	40
8	Discussie	44

1 Inleiding

Het Hard Squares Model is een model dat in een veelheid aan contexten geïnterpreteerd kan worden: in de statistische fysica fungeert het als model voor adsorbtie van atomen, moleculen of ionen aan een oppervlak met vierkante roosterstructuur of als model voor een magneet, in de wiskunde geeft het informatie over het aantal onafhankelijke verzamelingen in een roostergraaf en kan het beschouwd worden als een betegelingsprobleem. In deze scriptie wordt de partitiefunctie van het Hard Squares Model op drie manieren benaderd: met Row Transfer Matrices (RTM's), Corner Transfer Matrices (CTM's) en een Monte Carlo simulatie. Alvorens dieper op de achtergronden in te gaan geven we de belangrijkste definities.

Definitie 1.1

Een matrix A heet *correct* als hij binair is en voor alle viertallen indices i, j, i', j' zodanig dat $|i - i'| + |j - j'| = 1$ geldt dat $A(i, j) \cdot A(i', j') = 0$.

In andere woorden: een correcte matrix bevat alleen 1-en en 0-en en nergens staan 1-en direct naast of boven elkaar.

Voorbeeld 1.2

$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ is een correcte matrix, maar $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ en $\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ zijn dat niet.

Een interessante, maar verrassend moeilijke vraag is: hoeveel correcte $M \times N$ matrices bestaan er voor gegeven M en N ? Algemener staat in deze scriptie de volgende functie centraal.

Definitie 1.3

Laat $M, N \in \mathbb{N}$. De (groot canonieke) partitiefunctie behorende bij de verzameling correcte $M \times N$ matrices is gegeven door

$$\mathcal{Z}_{M,N}(z) := \sum_m g(m, M, N) \cdot z^m$$

waarbij $g(m, M, N) := \# \{ \text{correcte } M \times N \text{ matrices die precies } m \text{ 1-en bevatten} \}$.

Opmerking 1.4

Een $M \times N$ matrix A zullen we ook een $M \times N$ rooster noemen, om het onderscheid met de matrices die met A geassocieerd zijn te verduidelijken. Verder zullen we met het gewicht van een rooster A bedoelen: $z^{\#\{1\text{-en op } A\}}$ indien A correct is, en anders 0. De partitiefunctie $\mathcal{Z}_{M,N}(z)$ is de som van de gewichten van alle $M \times N$ roosters.

WAAROM EEN PARTITIEFUNCTIE?

Een partitiefunctie is een gewogen toestandssom, in dit geval de som van de gewichten van alle mogelijke roosters. De partitiefunctie van Definitie 1.3 hoort bij een specifiek rooster-gasmodel, namelijk het Hard Squares Model. Een gesloten vorm voor (de asymptotische groeifactor van) $\mathcal{Z}_{M,N}(z)$ is waardevol, want uit de partitiefunctie kan met standaardtechnieken allerlei fysisch relevante informatie gehaald worden, zoals de gemiddelde dichtheid

of de aanwezigheid en aard van faseovergangen in een systeem. Een model heet 'exact opgelost' als zo'n gesloten vorm gevonden is. Er zijn relatief weinig roostermodellen exact opgelost. Het Hard Hexagon Model (1980, Baxter), het 8-Vertex model (1971, Baxter), het dominosteenbetegelingsmodel (1961, Kasteleyn) en het 2-dimensionale Ising model zonder extern magnetisch veld (1944, Onsager) zijn beroemde uitzonderingen [1]. Het Hard Hexagon Model is opgelost met behulp van zogenaamde Corner Transfer Matrices, een techniek die we voor het Hard Squares Model slechts als benaderingsmethode kunnen (en zullen) gebruiken. Aangezien het Hard Hexagon Model veel overeenkomsten vertoont met het Hard Squares Model lijkt het aannemelijk dat het Hard Squares Model ook exact oplosbaar is, maar op een dergelijke oplossing is momenteel geen uitzicht. Iets eenvoudiger dan het vinden van $\mathcal{Z}_{M,N}(z)$ voor alle M en N is het vinden van de asymptotische groeifactor van $\mathcal{Z}_{M,N}(z)$. Om deze vraag te preciseren wordt het volgende gedefinieerd.

Definitie 1.5

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ is de *partitiefunctie per positie* gegeven door de dubbele limiet

$$\kappa(z) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} [\mathcal{Z}_{M,N}(z)]^{\frac{1}{MN}}.$$

Met dubbele limiet wordt hier bedoeld dat voor alle $\epsilon > 0$ er een T bestaat zodanig dat voor alle $M, N > T$ geldt dat $\left| [\mathcal{Z}_{M,N}(z)]^{\frac{1}{MN}} - \kappa(z) \right| < \epsilon$. In Stelling 2.18 zal bewezen worden dat deze dubbele limiet daadwerkelijk bestaat voor alle positieve reële z , de fysisch relevante waarden van z . Merk op dat $\mathcal{Z}_{M,N}(z)$ groeit als $k(z)^{MN}$. De waarde van $\kappa(1)$ wordt in de literatuur aangeduid als de *Hard Square Entropy constant*.

MOGELIJKE FYSISCH INTERPRETATIES VAN HET HARD SQUARES MODEL

Het Hard Squares Model kan worden geïnterpreteerd als een roostergasmodel. In deze zienswijze wordt een correcte M bij N matrix beschouwd als een vlak rooster van moleculen. Ieder element van de matrix komt dan overeen met een molecuul van het rooster. Bovendien is er een gas aanwezig, waarvan de ionen of moleculen zich aan het oppervlak kunnen hechten. Een bezette plek op het rooster komt overeen met een 1 in de matrix, terwijl een lege plek door een 0 wordt gerepresenteerd. Het 'harde' van het model, dat 1-en niet direct naast elkaar mogen staan, kan gezien worden als een vereenvoudiging van de interactie tussen de gasdeeltjes: op korte afstand stoten deze elkaar zodanig af dat zij onmogelijk op roosterafstand 1 van elkaar kunnen zijn, maar op roosterafstand 2 is dit afstotende effect al volledig verwaarloosbaar. Het rooster wordt ook wel eens beschouwd als een magneet [12], waarbij dan een 1 overeenkomt met 'spin omhoog' en een 0 met 'spin omlaag'.

ANDERE NAMEN VAN HET HARD SQUARES MODEL

In verschillende vakgebieden heeft het Hard Squares Model andere namen. Hierdoor is de literatuur (en de terminologie) op dit gebied nogal disjunct, hetgeen de zoektocht naar bronnen een stochastische component heeft gegeven. De tot nu toe gebruikte naam wordt vooral gebezigd in de statistische fysica. In de electrochemie spreekt men van een $c(2 \times 2)$ roosterstructuur als een correct rooster maximaal gevuld is, omdat de minimaal mogelijke afstand tussen twee bezette toestanden zowel in horizontale als in verticale richting gelijk is aan 2. In de wiskunde is vooral het geval $z = 1$ bestudeerd, omdat de partitiefunctie dan gelijk is aan het aantal onafhankelijke verzamelingen in een roostergraaf. Men spreekt ook wel van het fibonaccigetel van een M bij N matrix, omdat de partitiefunctie van een 1 bij N matrix precies de fibonaccigetallen geeft. Ten slotte: de informatica maakt gebruik van de term two-dimensional (2-D) (1, ∞)-RLL constraint. Dit komt neer op het Hard Squares

Model voor $z = 1$ en wordt door informatici gebruikt als een relatief eenvoudig model voor dataopslag op een tweedimensionaal medium.

WAT NAAR MIJN WETEN BEKEND IS VAN HET HARD SQUARES MODEL

In [2] wordt aangegeven dat $\kappa(z)$ twee singulariteiten heeft, een niet fysische bij $z_- = -0.11933888188(1)$ en een fysische bij $z_+ = 3.796255174(3)$. Ook wordt aangegeven dat bij de fysische singulariteit een tweede orde faseovergang plaatsvindt van de ongeordende 'vloeibare' fase naar een geordende 'vaste' fase, alsmede dat de kritieke exponent ν -die het gedrag van de correlatielengte in de vloeibare fase in de buurt van de singulariteit beschrijft- gelijk is aan $0.416667(1)$. Met behulp van de Corner Transfer Matrix methode zijn onlangs 92 termen van de lage dichtheidsexpansie van $\kappa(z)$ rond $z = 0$ bepaald [3], een expansie die echter een kleine convergentiestraal heeft door de singulariteit in $z = z_-$. In [4] heeft Baxter met Corner Transfer Matrices de eerste 43 decimalen van $\kappa(1)$ benaderd. De beste exact bewezen boven- en ondergrens voor $\kappa(1)$ die ik in de literatuur kon vinden zijn van Calkin en Wilf [5]: $1.503047782... \leq \kappa(1) \leq 1.5035148....$

DE ACTIVITEIT z IN TERMEN VAN TEMPERATUUR EN CHEMISCHE POTENTIAAL

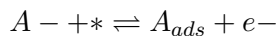
De variabele z in de partitiefunctie heet de activiteit en is gegeven door $z = e^{\mu \cdot \beta}$. Hierin is μ de chemische potentiaal en $\beta = 1/k_b T$, met T de absolute temperatuur en k_b de constante van Boltzmann. Bijgevolg is $\mathbb{R}_{>0}$ het fysisch zinvolle regime van z . De Boltzmannverdeling geeft dat de fysische kans op een willekeurig rooster met m 1-en gelijk is aan het gewicht van dat rooster gedeeld door de partitiefunctie, oftewel: $\frac{z^m}{Z_{M,N}(z)}$. Als z toeneemt hebben deeltjes meer de neiging om zich te hechten aan het oppervlak, want de kans op roosters met veel 1-en neemt toe. Als $\mu > 0$ dan is $z > 1$, dus heeft het systeem voorkeur voor 1-en, als $\mu < 0$ dan heeft het systeem juist voorkeur voor 0-en. Stel nu dat we een situatie hebben waarin $\mu > 0$, dan volgt dat hoe hoger de temperatuur, hoe kleiner z (met een minimum bij $z = 1$), hoe minder deeltjes zich aan het rooster zullen hechten, hoe 'vloeibaarder' de toestand. Als $\mu < 0$ dan volgt juist dat hoe hoger de temperatuur, hoe groter z (met een maximum bij $z = 1$), hoe meer deeltjes zich aan het rooster hechten. Voor $\mu = 0$ of voor vaste μ en een willekeurig groot wordende temperatuur komt het systeem in de situatie $z = 1$ terecht. Voor $z = 1$ is de kans op iedere configuratie even groot zodat het systeem noch voorkeur voor 0-en, noch voorkeur voor 1-en heeft.

EXPERIMENTELE TOEPASSING ALS ROOSTERADSORPTIEMODEL

In twee artikelen uit 2001 en 2000 bekijken Marc Koper en Johan Lukkien de adsorptie van een ion of molecuul op een (111) en (100) oppervlak [6, 7]. Hierbij duidt (111) aan dat een kristal zodanig is doorgesneden dat het ontstane oppervlak een regelmatig driehoekig rooster is, terwijl er bij (100) een vierkant rooster is ontstaan. Met behulp van Monte Carlo simulaties onderzoeken Koper en Lukkien een aantal interactiemodellen op deze roosters. Deze modellen verschillen van elkaar in de hoeveelheid naaste burens die wordt uitgesloten. In het bijzonder bekijken zij het Hard Squares Model (alleen de meest naaste burens uitgesloten op het (100) oppervlak) en het Hard Hexagon Model (alleen de meest naaste burens uitgesloten op het (111) oppervlak). Van het laatste model is de exacte oplossing van Baxter bekend en die wordt dan ook gebruikt om de simulaties te checken.

Koper en Lukkien bekijken de modellen in de context van elektrochemie, in het bijzonder cyclische voltammetrie van enkelkristal electrodes. Voltammetrie is een verzamelnaam voor een aantal elektroanalytische methoden, waarbij informatie wordt verkregen door de stroom te meten bij variërende spanning. In geval van cyclische voltammetrie neemt de spanning toe met de tijd, tot het maximum bereikt is, waarna de spanning weer afneemt tot de beginspanning, etcetera.

Koper en Lukkien gebruiken het volgende model voor adsorptie (waarbij zij als voorbeeld de ontleding van een anion noemen):



waarbij $*$ een vrije roosterplek weergeeft. We kunnen dit model relateren aan de activiteit z uit het Hard Squares Model middels de volgende uitdrukking voor de (electro)chemische potentiaal μ :

$$\mu = \epsilon_{ads}(E_{ref}) + RT \ln(C) + e_0 \gamma (E - E_{ref}) \quad (1.1)$$

waarbij $\epsilon_{ads}(E_{ref})$ de standaard adsorptie-energie ten op zichte van een referentiepotentiaal E_{ref} is, E is de electrodepotentiaal, C is de bulkconcentratie van A , γ is de electroadsorptievalentie van het adsorbaat (typisch gelijk aan -1), R is de gasconstante en T is de temperatuur.

Een belangrijke reden waarom een voltammetrie-experiment een handige meetmethode is, is dat in het hele spectrum van μ goed te meten valt, namelijk door de potentiaal E in vergelijking (1.1) te variëren. In een normaal gasexperiment zou dit moeten gebeuren door de druk -en dus de concentratie C - te veranderen, maar in vergelijking (1.1) staat de *logaritme* van C , dus om hetzelfde bereik in μ te behalen zou de druk over onrealistisch veel ordes van grootte gevarieerd moeten worden.

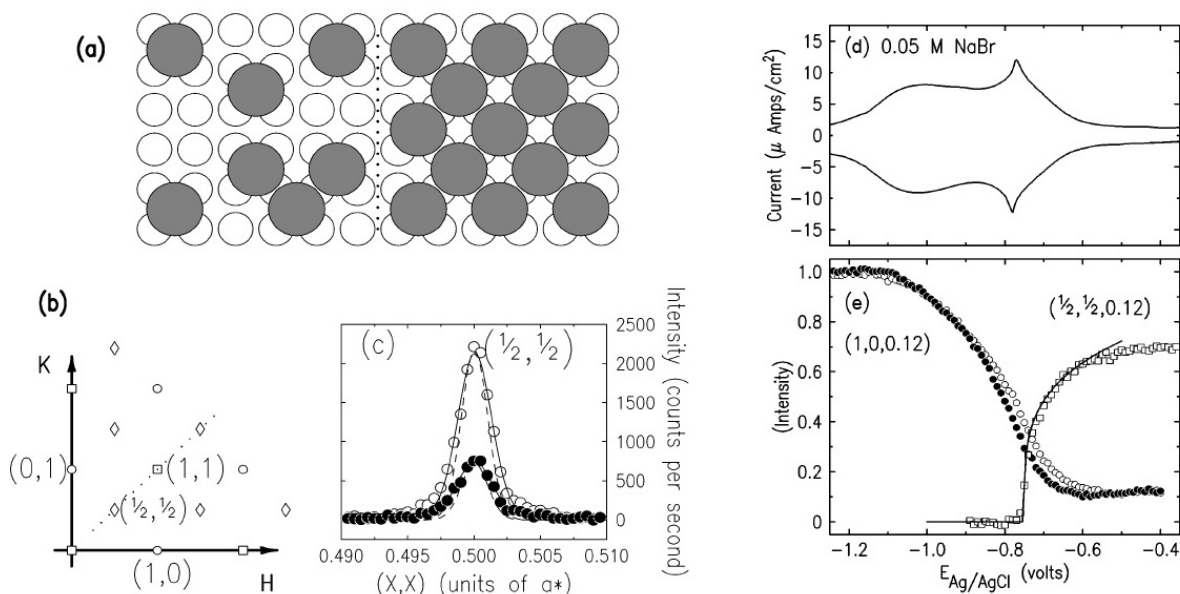
Bij voltammetrie-experimenten is de zogenaamde compressibiliteit, de afgeleide van de dichtheid van de adsorptielaag ρ naar μ , van bijzonder belang. Dit is het geval omdat de compressibiliteit evenredig is met de stroom die gemeten wordt als het systeem in evenwicht is. We zullen de compressibiliteit die voorspeld wordt door het Hard Squares Model met theoretische technieken benaderen (zie Figuur 8).

De grafiek van de compressibiliteit als functie van μ wordt door Koper en Lukkien een *butterfly* genoemd. Het grootste deel van de rest van hun artikelen gaat over het vergelijken van de vormen van deze vlinders in verschillende modellen.

VOORBEELD VAN EEN VOLTAMMETRIE-EXPERIMENT

In [8] wordt de adsorptie van bromide op een Ag(001) electrodeoppervlak onderzocht. Dit gebeurt op twee verschillende manieren: met behulp van x-ray scattering én met behulp van een cyclisch voltammogram. In Figuur 1.a zien we een schets van bromide dat geadsorbeerd is aan het Ag(001) oppervlak, die aannemelijk maakt dat de voorwaarden uit het Hard Squares Model van toepassing zijn. De auteurs gaan overigens uit van een iets algemener model (dat isomorf zou zijn met het Ising model mét extern magnetisch veld), waarin simultaan bezette naaste burens met een zekere kans toch worden toegestaan.

In Figuur 1.d is een cyclisch voltammogram gegeven. Zichtbaar is dat de bovenste curve (metingen bij toenemende spanning) bijna precies de negatieve is van de onderste curve (metingen bij afnemende spanning): de pieken zijn slechts licht (in de orde van 0.01 volt) ten op zichte van elkaar verschoven. Een meting waarin de curves precies elkaars negatieven zijn geeft aan dat het systeem bij ieder meetpunt in evenwicht was. Indien bij een meting bij voltage V niet lang genoeg gewacht wordt tot het systeem in evenwicht is, zodat men voortijdig aan een meting bij voltage $V + \epsilon > V$ begint, dan kan het zijn dat de toename van de dichtheid (en dus van de compressibiliteit en de stroom) die al bij V zou plaatsvinden zich pas voltrekt bij de meting van $V + \epsilon$, zodat de metingen bij V en $V + \epsilon$ lager respectievelijk



Figuur 1: Plaatjes overgenomen uit [8]. (a) Schets van het Ag(001) oppervlak (open cirkels). Het geadsorbeerde bromide voldoet aan de voorwaarden van het Hard Squares Model en is weergegeven in een ongeordende (links) en een geordende (rechts) fase. (b) Diffractiepatroon. De vierkanten komen overeen met Bragg pieken, de cirkels met zogenaamde Bragg rods en de ruiten met de geadsorbeerde bromide laag. (c) X-ray scattering intensiteit als functie van de positie in het diffractiepatroon van 1.b. De gevulde en lege cirkels geven metingen van voor respectievelijk na de faseovergang weer. (d) Een cyclisch voltammogram van een Ag(001) oppervlak in 0.05 M NaBr, gemeten met 10mV/sec. (e) Genormaliseerde x-ray intensiteit op posities $(1/2, 1/2)$ en $(1,1)$ in het diffractiespectrum, gemeten met 1mV/sec.

hogere uitvallen dan de correcte evenwichtswaarde. In het bijzonder is dit van belang als bij voltage V eerst een aantal 1-en van onhandige plekken moet worden verwijderd alvorens het rooster op efficiëntere wijze met 1-en gevuld kan worden, hetgeen typisch het geval is in de buurt van de faseovergang bij de piek in het voltammogram. Dit verklaart waarom de piek in de bovenste curve iets naar rechts verschoven is ten opzichte van de piek in de onderste curve.

Naast het voltammogram wordt ook een x-ray diffractie-experiment uitgevoerd. In Figuur 1.b is (de fouriertransformatie van) het diffractiepatroon weergegeven. Hierin komen de ruitvormige symbolen overeen met de geadsorbeerde laag bromide en de overige symbolen met de zilveren onderlaag. De intensiteit in Figuur 1.c is weergegeven als functie van X , waarbij X loopt over de diagonale lijn (X,X) in het diffractiepatroon. De piek rond 0.500 komt overeen met het ruitje op positie $(1/2, 1/2)$ en dus met geadsorbeerd bromide. De curve met de laagste piek geeft een meting bij lage activiteit weer (in de wanordelijke fase), terwijl de curve met de hoogste piek een meting bij hoge activiteit is (in de geordende fase). Hoe smaller de piek, hoe groter de correlatielengte, hoe meer geordend het systeem is. In Figuur 1.e zijn de genormaliseerde intensiteiten bij de posities $(1,0)$ en $(1/2, 1/2)$ weergegeven. Duidelijk is te zien dat de intensiteit bij $(1/2, 1/2)$ eerst 0 is, maar vanaf de piek in het voltammogram ineens sterk toeneemt. Dit bevestigt de notie dat er een faseovergang naar een geordend systeem plaatsvindt bij de piek in het voltammogram.

ROUTE VAN DEZE SCRIPTIE

In deze scriptie besteden we grofweg aandacht aan drie verschillende technieken om $\kappa(z)$ te benaderen. In Hoofdstuk 2 leiden we exacte ondergrenzen en bovengrenzen voor $\kappa(z)$ af met behulp van Row Transfer Matrices. Hierin worden de bovengrens en ondergrens die Calkin en Wilf in [5] voor het geval $z = 1$ hebben afgeleid gegeneraliseerd naar alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$. In Hoofdstuk 3 beschrijven we de Corner Transfer Matrix methode van Baxter, bijbehorende vergelijkingen en een manier om een oplossing van die vergelijkingen te benaderen. Voor kleine waarden van z geeft deze techniek zeer precieze en vertrouwenwekkende benaderingen van onder meer $\kappa(z)$, doch er bestaat geen bewijs dat de methode convergeert. In Hoofdstuk 4 worden allerlei kleine interessante eigenschappen van de Row Transfer Matrices onderzocht; eigenschappen die vooralsnog geen praktische toepassing hebben, zoals de determinant, de inverse, het aantal positieve eigenwaarden en de recursieve structuur. Een groot deel van dit hoofdstuk is gebaseerd op het artikel [9], dat echter geen enkel bewijs bevat. Ook hier zijn de beweringen gegeneraliseerd van $z = 1$ naar alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$. In Hoofdstuk 5 vindt een kleine excursie naar een mogelijke toekomstige benadering van het Hard Squares Model en vergelijkbare vierkantroostersmodellen plaats. Het model wordt vertaald naar een ééndimensionaal probleem en er wordt een zeer eenvoudig ogende alternatieve transfermatrix voorgesteld. In Hoofdstuk 6 komt de derde benaderingsmethode van $\kappa(z)$ aan bod: een Monte Carlo simulatie. Hier geven we ook de Hamiltoniaan van het Hard Squares Model. Hoofdstuk 7 bevat de resultaten: een tabel, grafieken en Monte Carlo snapshots, waarna een discussie en conclusies volgen.

2 Row Transfer Matrices

In dit hoofdstuk worden voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ boven- en ondergrenzen voor $\kappa(z)$ afgeleid. Daartoe wordt gebruik gemaakt van zogenaamde Row Transfer Matrices (RTM's). Laten we eerst een simpel geval bekijken waarin RTM's nog niet expliciet nodig zijn, namelijk $1 \times N$ roosters.

Voorbeeld 2.1

Laat $N \in \mathbb{N}$ en $z \in \mathbb{R}_{>0}$. We willen $\mathcal{Z}_{1,N}(z)$ bepalen. Merk daartoe het volgende op. De som van de gewichten van de $1 \times N$ roosters die met een 0 beginnen is gelijk aan $\mathcal{Z}_{1,N-1}(z)$, terwijl de som van de gewichten van de $1 \times N$ roosters die met een 1 beginnen gelijk is aan $z \cdot \mathcal{Z}_{1,N-2}(z)$. Er volgt dat de partitiefunctie voor alle $1 \times N$ roosters gegeven is door $\mathcal{Z}_{1,N}(z) = \mathcal{Z}_{1,N-1}(z) + z \cdot \mathcal{Z}_{1,N-2}(z)$.

$$\boxed{0} \mid \boxed{\mathcal{Z}_{1,N-1}} + z \cdot \boxed{1} \mid \boxed{0} \mid \boxed{\mathcal{Z}_{1,N-2}} = \boxed{\mathcal{Z}_{1,N}}$$

Dit is een lineaire homogene recursierelatie. De oplossing is van de vorm $\mathcal{Z}_{1,N}(z) = a \cdot \lambda_+^N + b \cdot \lambda_-^N$, waarbij $\lambda_{\pm} = \frac{1 \pm \sqrt{1+4z}}{2}$ de eigenwaarden van de matrix $\begin{pmatrix} 1 & z \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ zijn. De beginvoorwaarden $\mathcal{Z}_{1,1}(z) = 1 + z$ en $\mathcal{Z}_{1,2}(z) = 1 + 2z$ invullen en oplossen geeft de gesloten vorm $\mathcal{Z}_{1,N}(z) = \frac{1}{\sqrt{1+4z}} \left(\lambda_+^{N+2} - \lambda_-^{N+2} \right)$. Voor $z = 1$ vinden we precies de fibonaccigetallen: het aantal correcte $1 \times N$ roosters is $\mathcal{Z}_{1,N}(1) = \text{Fib}(N+2)$. De asymptotische groeifactor $\lim_{N \rightarrow \infty} [\mathcal{Z}_{1,N}(z)]^{\frac{1}{N}} = \lambda_+ = \frac{1 + \sqrt{1+4z}}{2}$ is een eenvoudige benadering van $\kappa(z)$ en is voor $z = 1$ gelijk aan de gulden snede!

Definitie 2.2

Een correcte vector $v_i \in \mathbb{R}^M$ is een correcte $M \times 1$ matrix.

Vanwege Voorbeeld 2.1 zijn er $\text{Fib}(M+2)$ correcte vectoren in \mathbb{R}^M . We ordenen de v_i lexicografisch, door ze als binair getal te schrijven. Bijvoorbeeld voor $M = 3$: $v_1 = (0, 0, 0)$, $v_2 = (1, 0, 0)$, $v_3 = (0, 1, 0)$, $v_4 = (0, 0, 1)$ en $v_5 = (1, 0, 1)$.

Definitie 2.3

Laat $M \in \mathbb{N}$, $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$. De M -de Row Transfer Matrix $T_M(z)$ is de $\text{Fib}(M+2)$ bij $\text{Fib}(M+2)$ matrix waarvan de rijen en kolommen geïndexeerd zijn door alle correcte vectoren $v_i \in \mathbb{R}^M$, gedefinieerd door:

$$T_M(z)(i, j) = \begin{cases} z^{\|v_j\|^2} & \text{als } \langle v_i, v_j \rangle = 0 \\ 0 & \text{anders.} \end{cases}$$

Informeel gezegd: $T_M(z)(i, j)$ is 0 als de vectoren v_i en v_j niet naast elkaar mogen staan en anders gelijk aan het gewicht van vector v_j , namelijk z tot de macht het aantal 1-en van v_j .

Vanaf nu wordt met \mathbf{e}_k de k -de eenheidsvector, met een 1 op coördinaat k en voor de rest nullen, aangeduid. De eerste eenheidsvector \mathbf{e}_1 zal worden afgekort tot \mathbf{e} .

Lemma 2.4

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ en voor alle $M, N \in \mathbb{N}_{\geq 1}$ geldt:

$$\mathcal{Z}_{M,N}(z) = \left\langle \mathbf{e}, T_M^{N+1}(z) \mathbf{e} \right\rangle.$$

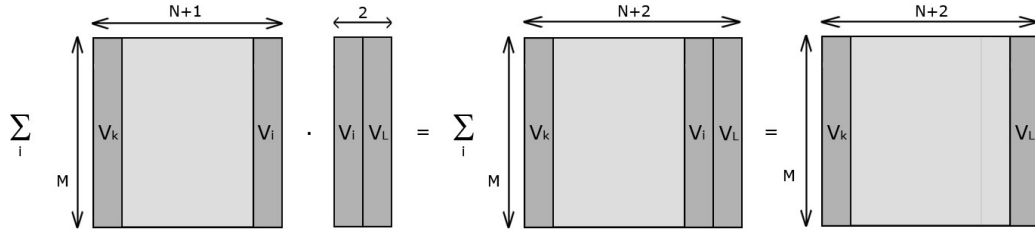
Bewijs. Met inductie bewijzen we algemener dat voor alle z en alle $M \in \mathbb{N}_{\geq 1}, N, k, l \in \mathbb{N}_{\geq 0}$ geldt dat

$$\sum_{m \geq 0} h(m, M, N+2, k, l) z^m = \langle \mathbf{e}_k, T_M^{N+1}(z) \mathbf{e}_l \rangle, \quad (2.1)$$

waarbij $h(m, M, N+2, k, l)$ is gedefinieerd als het aantal correcte M bij $N+2$ matrices A , waarvan kolom 1 en kolom $(N+2)$ gelijk zijn aan v_k respectievelijk v_l en zodanig dat de tweede tot en met $(N+2)$ -de kolom van A samen precies m 1-en bevatten. Het geval $N=0$ volgt direct uit de definitie van $T_M(z)$. Neem daarom aan dat er een N bestaat zodanig dat vergelijking (2.1) geldt voor alle $n < N$. Uitschrijven van het matrixproduct en het gebruiken van de inductieveronderstelling geven dat:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{e}_k, T_M^{N+1}(z) \mathbf{e}_l \rangle &= T_M^{N+1}(z)(k, l) \\ &= \sum_i T_M^N(z)(k, i) \cdot T_M(z)(i, l) \\ &= \sum_i \left(\sum_{m_1 \geq 0} h(m_1, M, N+1, k, i) z^{m_1} \right) \cdot \left(\sum_{m_2 \geq 0} h(m_2, M, 2, i, l) z^{m_2} \right). \end{aligned}$$

Onderstaande figuur maakt inzichtelijk dat dit gelijk is aan $\sum_{m=m_1+m_2 \geq 0} h(m, M, N+2, k, l) z^m$ en daarmee is het inductiebewijs van vergelijking (2.1) rond.



In het bijzonder is $h(m, M, N+2, 0, 0) = g(m, M, N)$, want de nulkolommen v_1 veranderen noch iets aan het aantal 1-en, noch iets aan de correctheid van de matrices die zij insluiten. Het lemma volgt daarom uit Definitie 1.3 en vergelijking (2.1).

□

Omdat $T_M(z)$ niet hermiets is en we die eigenschap wel nodig hebben in enkele bewijzen, definiëren we hulpmatrices $D_M(z)$ en $S_M(z)$.

Definitie 2.5

$D_M(z)$ is de $\text{Fib}(M+2)$ bij $\text{Fib}(M+2)$ diagonaalmatrix waarvan het i -de diagonaalelement gelijk is aan

$$z^{\frac{1}{2}} \cdot \|v_i\|^2.$$

Definitie 2.6

$$S_M(z) := D_M(z) T_M(1) D_M(z)$$

Opmerking 2.7

$$T_M(z) = T_M(1)D_M^2(z)$$

Opmerking 2.8

Voor alle M en z is $S_M(z)$ hermiets, want voor alle i, j geldt:

$$S_M(z)(i, j) = \sum_k \sum_l D_M(i, k)T_M(k, l)D_M(l, j) = D_M(i, i)T_M(i, j)D_M(j, j) = T_M(1)(i, j) \cdot z^{\frac{\|v_i\|^2 + \|v_j\|^2}{2}}$$

hetgeen symmetrisch is in i en j .

Voorbeeld 2.9

Beschouw het geval $M = 3$. Er zijn 5 toegestane vectoren, namelijk (000) , (100) , (010) , (001) en (101) , met gewichten $1, z, z, z$ en z^2 . De bijbehorende overgangsmatrices zijn

$$T_3(z) = \begin{pmatrix} 1 & z & z & z & z^2 \\ 1 & 0 & z & z & 0 \\ 1 & z & 0 & z & z^2 \\ 1 & z & z & 0 & 0 \\ 1 & 0 & z & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z^{1/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & z \end{pmatrix}^2 =$$

$$T_3(1) \cdot D_3^2(z)$$

$$S_3(z) = \begin{pmatrix} 1 & z^{1/2} & z^{1/2} & z^{1/2} & z \\ z^{1/2} & 0 & z & z & 0 \\ z^{1/2} & z & 0 & z & z^{3/2} \\ z^{1/2} & z & z & 0 & 0 \\ z & 0 & z^{3/2} & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Opmerking 2.10

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ en voor alle $N \in \mathbb{N}$:

$$S_M^N(z) = D_M(z)T_M^N(z)D_M^{-1}(z).$$

Opmerking 2.11

Uit de vorige opmerking volgt voor $N = 1$ dat $T_M(z)$ en $S_M(z)$ gelijksoortig zijn, zodat zij de zelfde eigenwaarden hebben.

Lemma 2.12

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ en voor alle $M, N \in \mathbb{N}$:

$$\langle \mathbf{e}, S_M^N(z) \mathbf{e} \rangle = \langle \mathbf{e}, T_M^N(z) \mathbf{e} \rangle.$$

Bewijs. Voor alle M en z is het element in de linker bovenhoek van de diagonaalmatrices $D_M(z)$ en $D_M^{-1}(z)$ gelijk aan 1, i.e.: $D_M(z)(1, 1) = D_M^{-1}(z)(1, 1) = 1$. Er volgt dat

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{e}, S_M^N(z) \mathbf{e} \rangle &= \langle \mathbf{e}, D_M(z)T_M^N(z)D_M^{-1}(z) \mathbf{e} \rangle \\ &= [D_M(z)T_M^N(z)D_M^{-1}(z)](1, 1) \\ &= [T_M^N(z)](1, 1) \\ &= \langle \mathbf{e}, T_M^N(z) \mathbf{e} \rangle. \end{aligned}$$

□

Stelling 2.13*Perron-Frobenius [10, p. 124].**Laat A een vierkante niet-negatieve irreducibele matrix zijn. Dan geldt:*

- (i) *A heeft een reële positieve eigenwaarde λ_1 (de Perronwortel) zodanig dat voor alle eigenwaarden λ_i van A geldt dat $|\lambda_i| \leq \lambda_1$.*
- (ii) *A heeft een positieve eigenvector u_1 die correspondeert met λ_1*
- (iii) *Laat h het aantal eigenwaarden λ_i van A waarvoor $|\lambda_i| = \lambda_1$. Als $h > 1$ dan bestaat er een permutatiematrix P zodanig dat*

$$PAP^t = \begin{pmatrix} 0 & A_{1,2} & & & \\ & 0 & A_{2,3} & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & A_{h-1,h} \\ A_{h,1} & & & & 0 \end{pmatrix}$$

*waarbij de nulblokken op de hoofddiagonaal vierkant zijn.***Definitie 2.14** *$\Lambda_M(z)$ is de positieve eigenwaarde van $T_M(z)$ die in absolute waarde strikt groter is dan de overige eigenwaarden van $T_M(z)$.*

Dat deze definitie zinvol is volgt uit het bewijs van het volgende lemma, waarin onder meer wordt aangetoond dat de met $T_M(z)$ gelijksoortige matrix $S_M(z)$ een positieve eigenwaarde heeft die in absolute waarde strikt groter is dan de overige eigenwaarden van $S_M(z)$.

Lemma 2.15*Voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ en voor alle $M \in \mathbb{N}$:*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{e}, T_M^N(z) \mathbf{e} \rangle^{1/N} = \Lambda_M(z).$$

Bewijs. Neem z en M vast. De matrix $S_M(z)$ is vierkant, reëel en bevat slechts niet-negatieve elementen. Ook geldt dat $S_M(z)$ irreducibel is, want de geassocieerde gerichte graaf (waarin een tak van knoop i naar knoop j loopt precies als $S_M(z)(i, j) > 0$) is sterk samenhangend. Immers: alle correcte vectoren staan loodrecht op de nulvector v_1 , waardoor voor alle $i, j : S_M(z)(i, 1) > 0$ en $S_M(z)(1, j) > 0$, zodat vanaf iedere knoop i er een pad loopt naar iedere andere willekeurige knoop j .

Uit Perron-Frobenius volgt nu dat $S_M(z)$ een reële positieve eigenwaarde λ_1 heeft, zodanig dat voor alle eigenwaarden λ_i van $S(z)$ geldt dat $|\lambda_i| \leq \lambda_1$.

Stel $S_M(z)$ heeft h eigenwaarden $\lambda_1, \dots, \lambda_h$ van modulus λ_1 . Neem aan dat $h > 1$, dan volgt met Perron-Frobenius dat er een permutatiematrix P bestaat zodanig dat $PS_M(z)P^t$ alleen nullen op de diagonaal heeft. Maar per definitie van de permutatiematrix bestaat er een permutatie σ van n elementen waarbij voor alle $i, j : [PS_M(z)P^t](i, j) = [S_M(z)](\sigma(i), \sigma(j))$. In het bijzonder geldt voor de i waarvoor $\sigma(i) = 1$ dat $[PS_M(z)P^t](i, i) = [S_M(z)](\sigma(i), \sigma(i)) = 1$, dus $PS_M(z)P^t$ heeft een niet-nul diagonaalelement. Tegenspraak. Dus $h = 1$.

We weten dus nu dat $S_M(z)$ een positieve eigenwaarde heeft die absoluut strikt groter is dan de overige eigenwaarden.

De matrix $S_M(z)$ is hermiets, dus er is een basis van orthonormale eigenvectoren $\{u_i\}$ met bijbehorende (reële) eigenwaarden λ_i van $S_M(z)$. We kunnen \mathbf{e} bovendien schrijven als $\mathbf{e} := \sum_{i=1}^{\text{Fib}(M+2)} a_i \cdot u_i$, waarbij voor alle i : $a_i = \langle \mathbf{e}, u_i \rangle$. Hieruit volgt dat:

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{e}, S_M^N(z) \mathbf{e} \rangle^{1/N} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left\langle \sum_{i=1}^{\text{Fib}(M+2)} a_i \cdot u_i, \sum_{i=1}^{\text{Fib}(M+2)} a_i \cdot \lambda_i^N \cdot u_i \right\rangle^{1/N} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^{\text{Fib}(M+2)} a_i^2 \cdot \lambda_i^N \right)^{1/N} \\ &= \lambda_1 \cdot \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\sum_{i=1}^{\text{Fib}(M+2)} a_i^2 \cdot \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^N \right)^{1/N} \\ &= \Lambda_M(z). \end{aligned}$$

Waarbij $\Lambda_M(z) = \lambda_1 > 0$ de absoluut grootste eigenwaarde van $S_M(z)$ is. De laatste gelijkheid geldt vanwege het volgende. Laat u_1 de eigenvector die hoort bij λ_1 . Volgens Perron-Frobenius is u_1 positief, dat wil zeggen: ieder element van u_1 is groter dan 0. Dus $a_1 = \langle \mathbf{e}, u_1 \rangle \neq 0$.

Ten slotte vertalen we het probleem van $S_M(z)$ terug naar een probleem in termen van $T_M(z)$ met behulp van Lemma 2.12.

$$\Lambda_M(z) = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{e}, S_M^N(z) \mathbf{e} \rangle^{1/N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{e}, T_M^N(z) \mathbf{e} \rangle^{1/N}.$$

□

Opmerking 2.16

Uit Lemma 2.4 en Lemma 2.15 volgt direct dat $\Lambda_M(z)^{1/M}$ gelijk is aan $\lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$, de partitiefunctie per positie van $M \times N$ roosters voor M eindig en $N \rightarrow \infty$.

Nu we weten dat de enkele limiet voor $N \rightarrow \infty$ bestaat en gelijk is aan de grootste eigenwaarde van de transfermatrix, kunnen we ons richten op de dubbele limiet $k(z)$. Om het bestaan van die limiet (Stelling 2.18) en exacte ondergrenzen (Stelling 2.19) ervan te bewijzen zullen we gebruik maken van het maximumprincipe, dat een speciaal geval is van het Courant min-maxprincipe.

Lemma 2.17

Maximumprincipe [11, p. 179].

Laat A een reële symmetrische matrix en laat Λ de grootste eigenwaarde van A , dan:

$$\Lambda = \max_{\|x\| \neq 0} \frac{\langle x, Ax \rangle}{\langle x, x \rangle}.$$

Stelling 2.18

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ bestaan de geïtereerde limiet $\lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$ en de dubbele limiet $\kappa(z) := \lim_{M,N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$ en zij zijn beide gelijk aan

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z).$$

Bewijs. Voor $z = 0$ is

$$k(0) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} [\mathcal{Z}_{M,N}(0)]^{\frac{1}{MN}} = \lim_{M,N \rightarrow \infty} [g(0, M, N)]^{\frac{1}{MN}} = \lim_{M,N \rightarrow \infty} [1]^{\frac{1}{MN}} = 1$$

Voor $z > 0$ passen we het maximumprincipe toe op machten van de reële symmetrische transfermatrix $S_M(z)$.

Er volgt met Lemma 2.12 dat $\forall p \in \mathbb{N}_{>0}$:

$$\Lambda_M^p(z) \geq \frac{\langle \mathbf{e}, S_M^p(z) \mathbf{e} \rangle}{\langle \mathbf{e}, \mathbf{e} \rangle} = \langle \mathbf{e}, T_M^p(z) \mathbf{e} \rangle.$$

Maar $\langle \mathbf{e}, T_M^p(z) \mathbf{e} \rangle = \langle \mathbf{e}, T_{p-1}^{M+1}(z) \mathbf{e} \rangle$ omdat beide zijdes gelijk zijn aan de partitiefunctie voor M bij $p-1$ roosters (Lemma 2.4)! Dus, na het nemen van M -de machts wortels volgt:

$$(\Lambda_M^{1/M}(z))^p \geq \langle \mathbf{e}, T_{p-1}^{M+1}(z) \mathbf{e} \rangle^{1/M}. \quad (2.2)$$

Neem nu de \liminf van beide zijdes van deze vergelijking, voor $M \rightarrow \infty$, dan verkrijgen we met behulp van Lemma 2.15 dat:

$$\left(\liminf_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z) \right)^p \geq \Lambda_{p-1}(z).$$

Neem vervolgens de $(p-1)$ -de machtswortel en de \limsup voor $p \rightarrow \infty$ om te vinden dat:

$$\liminf_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z) \geq \limsup_{p \rightarrow \infty} \Lambda_p^{1/p}(z).$$

Aangezien de omgekeerde ongelijkheid vanzelfsprekend is, volgt dat de limiet $\lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z)$ bestaat en dus, vanwege Lemma 2.15, bestaat ook de geïtereerde limiet

$$g(z) := \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z) = \lim_{M \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{e}, T_M^N(z) \mathbf{e} \rangle^{1/MN} = \lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z).$$

Ten slotte bewijzen we dat ook de dubbele limiet $\kappa(z) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$ bestaat. Daaruit volgt dan dat $\kappa(z) = g(z) = \lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z)$.

Voor alle $a, M, N \in \mathbb{N}_{\geq 1}$ geldt dat ieder correct M bij aN rooster kan worden opgedeeld in a aparte correcte M bij N roosters. Omdat voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ de som van de gewichten toeneemt met ieder extra toegestaan rooster, volgt dat $\mathcal{Z}_{M,aN}(z) \leq \mathcal{Z}_{M,N}^a(z)$, zodat

$$\mathcal{Z}_{M,aN}^{1/aMN}(z) \leq \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z). \quad (2.3)$$

Hieruit vinden we voor alle M en N een ondergrens van $\mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$:

$$\Lambda_M^{1/M}(z) = \lim_{N' \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N'}^{1/MN'}(z) \leq \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z).$$

Voor een bovengrens van $\mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$ herschrijven we vergelijking (2.2) door daarin $N = p-1$ in te vullen en Lemma 2.4 toe te passen. Dit geeft voor alle M en N dat:

$$\mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z) \leq (\Lambda_M^{1/M})^{1+1/N}(z).$$

We zien dat $\mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$ wordt ingesloten door twee functies waarvan de dubbele limieten $\lim_{M,N \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z)$ en $\lim_{M,N \rightarrow \infty} (\Lambda_M^{1/M})^{1+1/N}(z)$ bestaan en gelijk zijn aan $g(z)$. Er volgt dat $\lim_{M,N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$ bestaat en gelijk is aan $g(z)$.

Iets preciezer: de insluiting van $\mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z)$ impliceert dat voor alle M, N en z :

$$|\mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z) - g(z)| \leq |\Lambda_M^{1/M}(z) - g(z)| + |(\Lambda_M^{1/M})^{1+1/N}(z) - g(z)|$$

en samen met $\lim_{M,N \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z) = g(z)$ en $\lim_{M,N \rightarrow \infty} (\Lambda_M^{1/M})^{1+1/N}(z) = g(z)$ geeft dat:

voor alle $\epsilon > 0$ bestaat er een T zodanig dat voor alle $M, N > T$: $|\Lambda_M^{1/M}(z) - g(z)| < \epsilon/2$ en $|(\Lambda_M^{1/M})^{1+1/N}(z) - g(z)| < \epsilon/2$ en dus ook $|\mathcal{Z}_{M,N}^{1/MN}(z) - g(z)| < \epsilon/2 + \epsilon/2 = \epsilon$.

□

Met een kleine aanpassing van het bovenstaande argument kunnen we ook exacte ondergrenzen van $k(z)$ afleiden. Vanaf nu laten we de variabele z meestal weg bij $T_M(z)$ en $S_M(z)$.

Stelling 2.19

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ en voor alle $p, q \in \mathbb{N}_{>0}$:

$$k(z) \geq \left(\frac{\Lambda_{p+2q-1}(z)}{\Lambda_{2q-1}(z)} \right)^{1/p}.$$

Bewijs. Voor $z = 0$ is het duidelijk, want $\forall x : \Lambda_x(0) = 1 = k(0)$. Neem dus aan dat $z > 0$.

Laat $p, q, M \in \mathbb{N}_{>0}$. Pas het maximumprincipe toe op S_M^p , met de vector $x = S_M^q \mathbf{e}$, dan:

$$\Lambda_M^p(z) \geq \frac{\langle S_M^q \mathbf{e}, S_M^p S_M^q \mathbf{e} \rangle}{\langle S_M^q \mathbf{e}, S_M^q \mathbf{e} \rangle} = \frac{\langle \mathbf{e}, S_M^q S_M^p S_M^q \mathbf{e} \rangle}{\langle \mathbf{e}, S_M^q S_M^q \mathbf{e} \rangle} = \frac{\langle \mathbf{e}, S_M^{p+2q} \mathbf{e} \rangle}{\langle \mathbf{e}, S_M^{2q} \mathbf{e} \rangle} = \frac{\langle \mathbf{e}, S_{p+2q-1}^{M+1} \mathbf{e} \rangle}{\langle \mathbf{e}, S_{2q-1}^{M+1} \mathbf{e} \rangle}$$

waarbij de eerste gelijkheid werkt omdat S_M symmetrisch reël is en de cruciale laatste gelijkheid volgt door Lemma 2.4 op teller en noemer toe te passen. Met Stelling 2.18 komen we tot

$$k(z)^p = \left(\lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z) \right)^p \geq \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\frac{\langle \mathbf{e}, S_{p+2q-1}^{M+1} \mathbf{e} \rangle}{\langle \mathbf{e}, S_{2q-1}^{M+1} \mathbf{e} \rangle} \right)^{1/M} = \frac{\Lambda_{p+2q-1}(z)}{\Lambda_{2q-1}(z)}$$

en het resultaat volgt na het nemen van de p -de machtswortel aan beide zijdes van de vergelijking.

□

Als alleen de eerste M spectraalradii $\Lambda_1(z), \dots, \Lambda_M(z)$ bekend zijn, levert het geval $p = 1$ (en $q = M$) typisch de scherpste ondergrens van $k(z)$ op:

Gevolg 2.20

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ en voor alle $q \in \mathbb{N}_{>0}$ geldt:

$$k(z) \geq \frac{\Lambda_{2q}(z)}{\Lambda_{2q-1}(z)}.$$

Naast een ondergrens willen we natuurlijk ook een bovengrens hebben. Met het oog op de vorm van de ondergrens in Gevolg 2.20 ligt het voor de hand de volgende bovengrens te proberen: $\forall q \in \mathbb{N} : k(z) \leq \frac{\Lambda_{2q+1}(z)}{\Lambda_{2q}(z)}$. Dit is echter in het algemeen niet waar. Hoewel dit voor $q = 0, 1, 2, 3, 4, 5$ inderdaad een zeer scherpe en snel convergerende bovengrens lijkt op te leveren, gaat het mis bij $z = 1, q = 6$, omdat de ‘bovengrens’ daar onder een ondergrens duikt (zie Tabel 1). Het lijkt er dus op dat we onze toevlucht moeten zoeken tot een ander soort bovengrens.

Lemma 2.21

(Zwakke bovengrens)

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$, voor alle $M \in \mathbb{N}$ geldt:

$$\kappa(z) \leq \Lambda_M^{1/M}(z).$$

Bewijs. Neem M vast. Vanwege het argument vlak boven vergelijking (2.3) hebben we voor alle gehele getallen N en $a \geq 1$ dat $\mathcal{Z}_{aM,N}(z) \leq \mathcal{Z}_{M,N}^a(z)$. Met Opmerking 2.16 volgt in de limiet voor $N \rightarrow \infty$ dat $\Lambda_{aM}(z) \leq \Lambda_M^a(z)$. Ten slotte geeft Stelling 2.18 dat:

$$\kappa(z) = \lim_{a \rightarrow \infty} \Lambda_{aM}^{1/aM}(z) \leq \lim_{a \rightarrow \infty} (\Lambda_M^a(z))^{1/aM} = \Lambda_M^{1/M}(z).$$

□

We kunnen een iets scherpere bovengrens formuleren door cyclische randvoorwaarden te gebruiken. Daartoe moeten we eerst een aantal definities invoeren.

Definitie 2.22

Een cyclisch correcte vector $\tilde{v}_i \in \mathbb{R}^M$ is een correcte vector waarvoor bovendien $\tilde{v}_i(1) \cdot \tilde{v}_i(M) = 0$.

Definitie 2.23

Laat $M \in \mathbb{N}, z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$. De M -de cyclische Row Transfer Matrix $\tilde{T}_M(z)$ is een matrix geïndexeerd door alle cyclisch correcte vectoren $\tilde{v}_i \in \mathbb{R}^M$ en gedefinieerd door:

$$\tilde{T}_M(z)(i, j) = \begin{cases} z^{\|\tilde{v}_j\|^2} & \text{als } \langle \tilde{v}_i, \tilde{v}_j \rangle = 0 \\ 0 & \text{anders.} \end{cases}$$

Voor notationeel gemak zullen we vaak \tilde{T}_M schrijven voor $\tilde{T}_M(z)$.

Definitie 2.24

Een correct $M \times N$ rooster $(a_{i,j})$ is M -cyclisch correct als het voldoet aan de extra voorwaarde dat voor alle $j : a_{1,j} \cdot a_{M,j} = 0$, en N -cyclisch correct als het voldoet aan de extra voorwaarde dat voor alle $i : a_{i,1} \cdot a_{i,N} = 0$.

Definitie 2.25

$$\tilde{Z}_{M,N}(z) := \sum_m \tilde{g}(m, M, N) \cdot z^m \text{ en } \tilde{\tilde{Z}}_{M,N}(z) := \sum_m \tilde{\tilde{g}}(m, M, N) \cdot z^m$$

waarbij $\tilde{g}(m, M, N) := \text{aantal } \{N\text{-cyclisch correcte } M \times N \text{ roosters met precies } m \text{ 1-en}\}$ en $\tilde{\tilde{g}}(m, M, N) := \text{aantal } \{M\text{-én } N\text{-cyclisch correcte } M \times N \text{ roosters met precies } m \text{ 1-en}\}$.

Lemma 2.26

Voor alle $M, N \in \mathbb{N}_{>1}$ geldt:

$$\tilde{Z}_{M,N}(z) = \text{tr}(T_M^N) \text{ en } \tilde{\tilde{Z}}_{M,N}(z) = \text{tr}(\tilde{T}_M^N).$$

Bewijs. Het bewijs verloopt op de zelfde manier als in Lemma 2.4 □

Het volgende lemma is de belangrijkste bouwsteen voor de afleiding van de scherpe bovengrens in Stelling 2.30.

Lemma 2.27

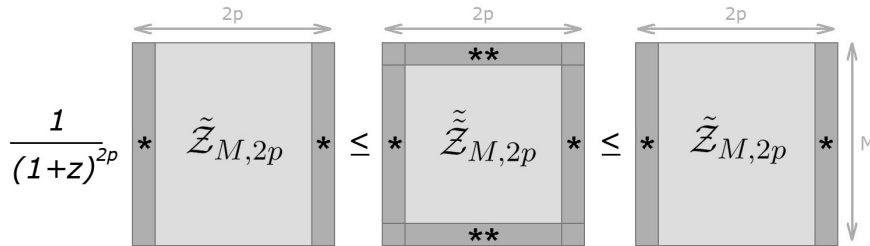
Voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ en alle geheeltallige $p > 0$ en $M > 1$ geldt:

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left(\text{tr} \left(T_M^{2p} \right) \right)^{1/M} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\text{tr} \left(\tilde{T}_{2p}^M \right) \right)^{1/M}.$$

Bewijs. Laat $p \in \mathbb{N}_{>0}$.

We merken eerst op dat voor alle M groter dan 1:

$$\frac{\tilde{Z}_{M,2p}}{(1+z)^{2p}} \leq \frac{\tilde{Z}_{M,2p}}{\tilde{Z}_{1,2p}} \leq \tilde{\tilde{Z}}_{M,2p} \leq \tilde{Z}_{M,2p}. \quad (2.4)$$



Figuur 2: Toelichting van vergelijking (2.4). De symbolen * en ** geven aan dat de betreffende kolommen respectievelijk rijen aangrenzend zijn. Het linker en rechter plaatje kunnen als cilinder worden beschouwd, het middelste plaatje als torus.

De eerste twee ongelijkheden van (2.4) gelden omdat $\tilde{\tilde{Z}}_{M,2p}$ een extra M -cyclische randvoorwaarde heeft ten opzichte van $\tilde{Z}_{M,2p}$. Hierdoor schelen $\tilde{Z}_{M,2p}$ en $\tilde{\tilde{Z}}_{M,2p}$ hoogstens de gewichtsom $\tilde{Z}_{1,2p}$ van een $1 \times 2p$ ring. Voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ neemt de gewichtsom toe met ieder extra rooster dat toegestaan wordt, dus $\tilde{Z}_{1,2p}$ is kleiner of gelijk $(1+z)^{2p}$, de gewichtsom voor een $1 \times 2p$ ring als alle roosters erop toegestaan zouden zijn. De laatste ongelijkheid van (2.4) volgt met een soortgelijk, korter argument.

Vergelijking (2.4) kan met Lemma 2.26 worden omgeschreven tot: $\forall M > 1$:

$$\frac{1}{(1+z)^{2p}} \operatorname{tr} \left(T_M^{2p} \right) \leq \operatorname{tr} \left(\tilde{T}_M^M \right) \leq \operatorname{tr} \left(T_M^{2p} \right).$$

Neem nu de M -de machts wortel en de limiet voor $M \rightarrow \infty$, dan volgt het lemma door insluiting. \square

Lemma 2.28

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ en alle $M, N \in \mathbb{N}$ geldt:

$$\operatorname{tr}(T_M^N) = \sum_{\lambda} \lambda^N \text{ en } \operatorname{tr}(\tilde{T}_M^N) = \sum_{\tilde{\lambda}} \tilde{\lambda}^N$$

waarbij de linker respectievelijk rechter som loopt over alle eigenwaarden van T_M respectievelijk \tilde{T}_M .

Bewijs. Laat A een hermitese matrix zijn. Vanwege de spectraalstelling kan A geschreven worden als PEP^{-1} waarbij P een unitaire matrix is en E de diagonaalmatrix met de eigenwaarden van A op de diagonaal. Er volgt dat

$$\operatorname{tr}(A^N) = \operatorname{tr} \left((PEP^{-1})^N \right) = \operatorname{tr} (PE^N P^{-1}) = \operatorname{tr} (PP^{-1}E^N) = \operatorname{tr} (E^N) = \sum_{\lambda} \lambda^N$$

waarbij de som over alle eigenwaarden λ van A loopt.

Kies nu $A = S_M$ en gebruik Opmerking 2.11 om te vinden dat $\operatorname{tr}(T_M^N) = \sum_{\lambda} \lambda^N$. Voor \tilde{T}_M kunnen we geheel analoog aan Definitie 2.5 en 2.6 een symmetrische matrix $\tilde{S}_M = \tilde{D}_M \tilde{T}_M \tilde{D}_M^{-1}$ met dezelfde eigenwaarden als \tilde{T}_M definiëren. Kies $A = \tilde{S}_M$, dan volgt $\operatorname{tr}(\tilde{T}_M^N) = \sum_{\tilde{\lambda}} \tilde{\lambda}^N$. \square

Definitie 2.29

$\tilde{\Lambda}_M(z)$ is de positieve eigenwaarde van $\tilde{T}_M(z)$ die in absolute waarde strikt groter is dan de overige eigenwaarden van $\tilde{T}_M(z)$.

Stelling 2.30

(Scherpe bovengrens)

Voor alle $z \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ en alle $p \in \mathbb{N}_{>0}$ geldt:

$$\tilde{\Lambda}_{2p}^{1/2p}(z) \geq k(z).$$

Bewijs. Analoog aan het bewijs in Lemma 2.15 volgt met Perron-Frobenius dat definitie 2.29 zinvol is, dus \tilde{T}_{2p} heeft een unieke positieve eigenwaarde $\tilde{\Lambda}_{2p}(z)$ die in absolute waarde groter is dan alle overige eigenwaarden. Daaruit volgt dat

$$\tilde{\Lambda}_{2p}(z) = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\sum_{\tilde{\lambda}} \tilde{\lambda}^M(z) \right)^{1/M} \quad (2.5)$$

waarbij de som loopt over alle eigenwaarden van \tilde{T}_{2p} .

Nu komt alles bij elkaar:

$$\tilde{\Lambda}_{2p}^{1/2p}(z) = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\sum_{\tilde{\lambda}} \tilde{\lambda}^M \right)^{\frac{1}{M} \cdot \frac{1}{2p}} \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\text{tr} \left(\tilde{T}_{2p}^M \right) \right)^{\frac{1}{M} \cdot \frac{1}{2p}} \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\text{tr} \left(T_M^{2p} \right) \right)^{\frac{1}{2p} \cdot \frac{1}{M}} \\ &= \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\sum_{\lambda} \lambda^{2p} \right)^{\frac{1}{2p} \cdot \frac{1}{M}} \end{aligned} \quad (2.7)$$

$$\geq \lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda_M^{1/M}(z) \quad (2.8)$$

$$= k(z). \quad (2.9)$$

In (2.6) en (2.7) wordt gesommeerd over de eigenwaarden van $\tilde{T}_{2p}(z)$ respectievelijk $T_M(z)$. Bij de gelijkheden (2.6) tot en met (2.7) zijn achtereenvolgens vergelijking (2.5), Lemma 2.28, Lemma 2.27 en opnieuw Lemma 2.28 gebruikt. Gelijkheid (2.9) was het onderwerp van Stelling 2.18. Bij de ongelijkheid (2.8) is cruciaal gebruik gemaakt van het feit dat alle termen λ^{2p} in de som niet negatief zijn. Hier komt aan het licht waarom de bovengrens van deze stelling alleen voor even machten $\tilde{\Lambda}_{2p}^{1/2p}(z)$ werkt, en niet voor oneven machten $\tilde{\Lambda}_{2p+1}^{1/(2p+1)}(z)$.

□

2.1 Toepassing RTM-afschattingen op algemenere modellen

De resultaten in dit hoofdstuk voor het Hard Squares Model zijn goed te generaliseren naar een algemenere model waarin horizontale en verticale interacties (next neighbours) wel worden toegestaan, met een zekere wegingsfactor, en ook diagonale interacties (next nearest neighbours) worden meegenomen. Definieer namelijk

$g(M, N, p, q, r) :=$ aantal $M \times N$ binaire matrices met p 1-en, q horizontale of verticale 1-1 paren en r diagonale 1-1 paren

en de algemenere partitiefunctie

$$\mathcal{Z}_{M,N}(z, x, d) = \sum_{p,q,r} g(M, N, p, q, r) z^p x^q d^r.$$

Als $d = 1$ en $x \rightarrow 0$ krijgen we (op de extra sommaties over q en r na) het oorspronkelijke Hard Squares Model terug.

Er is een overeenkomstige transfermatrix $T_M(z, x, d)$ met elementen

$$T_M(z, x, d)(i, j) = z^{\|v_j^2\|} \cdot x^{\langle v_i, v_j \rangle + \sum_{l=1}^{M-1} v_j(l) \cdot v_j(l+1)} \cdot d^{\sum_{l=1}^{M-1} v_i(l) \cdot v_j(l+1) + v_i(l+1) \cdot v_j(l)}.$$

Informeel gezegd: de exponent van z is het aantal 1-en in de nieuwe kolomvector v_j , de exponent van x is het aantal verticaal naburige 1-1 paren in v_j plus het aantal horizontaal

naburige 1-1 paren dat ontstaat als kolomvector v_j naast kolomvector v_i wordt geplaatst, en ten slotte is de exponent van d gelijk aan het aantal diagonale 1-1 paren als v_i naast v_j staat. Om kort te gaan: $T_M(z, x, d)(i, j)$ is het extra gewicht dat aan het gewicht van v_i wordt toegevoegd als v_j er naast komt.

Net als de oorspronkelijke transfermatrix kunnen we T_M schrijven als het product van een symmetrische matrix en een diagonaalmatrix. Definieer namelijk de diagonaalmatrix $D_M(z, x)$ door

$$\forall i : D_M(x)(i, i) = z^{\frac{1}{2} \cdot \|v_i^2\|} \cdot x^{\frac{1}{2} \cdot \sum_{l=1}^{M-1} v_i(l) \cdot v_i(l+1)}$$

waarin alleen het gewicht van de 1-en en de verticale interacties zijn verwerkt.

Definieer ook de symmetrische matrix $Q_M(x, d)$ gegeven door

$$Q_M(x, d)(i, j) = x^{\langle v_i, v_j \rangle} \cdot d^{\sum_{l=1}^{M-1} v_i(l) \cdot v_j(l+1) + v_i(l+1) \cdot v_j(l)}$$

waarin alleen de diagonale en horizontale interacties zijn verwerkt.

Dan geldt:

$$T_M(z, x, d) = Q_M(x, d) \cdot D_M^2(z).$$

Ten slotte kunnen we een veralgemenisering van de symmetrische matrix S_M definiëren:

$$S_M(z, x, d) = D_M(z) \cdot T_M(z, x, d) \cdot D_M^{-1}(z).$$

In deze notatie, voor $z, x, d \in \mathbb{R}_{>0}$, kunnen alle bewijzen vanaf Lemma 2.12 op (vrijwel) precies de zelfde manier worden toegepast. In het bijzonder kan

$$k(z, x, d) := \lim_{M, N \rightarrow \infty} [\mathcal{Z}_{M, N}(z, x, d)]^{\frac{1}{MN}}$$

met de eigenwaardenongelijkheden uit Stelling 2.19 en Stelling 2.30 worden afgeschat.

Merk op dat het moeilijker zal worden om dit resultaat te veralgemeniseren naar interacties tussen nog verder uiteengelegen elementen, want een kolomtransfermatrix laat slechts een eenvoudige beschrijving van een interactie toe tussen elementen in direct naast elkaar gelegen kolommen. Ook kunnen we deze methode niet toepassen op een model waarin de horizontale en verticale interactie verschillend zijn, want dan verliezen we de symmetrie (de partitiefunctie voor $M \times N$ roosters is de partitiefunctie voor $N \times M$ roosters) waarvan we bij de afleiding van de sterke ondergrens (Lemma 2.18) zo handig gebruik konden maken.

3 Corner Transfer Matrices

Corner Transfer Matrices (CTM) zijn vergelijkbaar met Row Transfer Matrices. Waar de laatste als het ware het gewicht van een rij toevoegt, voegt een CTM het gewicht van een heel kwart vlak toe.

CTM's zijn onlosmakelijk verbonden met Rodney Baxter. Met behulp van CTM's heeft hij in de jaren 80 het vergelijkbare Hard Hexagon Model exact opgelost. Daarna zijn ze ook gebruikt in *variational methods* om de entropieconstante van allerlei modellen, zoals de Hard Square Entropy constante $k(z)$, te benaderen. Hoewel deze methoden opmerkelijk snel lijken te convergeren, is een exact bewijs hiervan mij onvindbaar gebleken. Yao-Ban Chan, de schrijver van een proefschrift over onder andere het Hard Squares Model, heeft per mail bevestigd dat er geen bewijs bestaat. De waarde die Baxter voor $\kappa(1)$ vond in [4], op maar liefst 43 decimalen nauwkeurig, ligt wel overtuigend tussen de exacte boven- en ondergrenzen van Calkin en Wilf die in het vorige hoofdstuk besproken zijn.

In dit hoofdstuk zullen we het volgende doen. We definiëren de CTM en enkele hulpmatrices. De geldigheid van de twee zogenaamde CTM vergelijkingen wordt aannemelijk gemaakt, maar niet volledig bewezen. De CTM vergelijkingen beschrijven een relatie die zou moeten gelden voor de CTM matrices in geval van een (in twee richtingen) oneindig groot rooster. Met behulp van de matrices die de oplossing van deze vergelijking vormen, kunnen vervolgens fysisch interessante parameters zoals $k(z)$, de dichtheid $\rho(z)$ en de kans $\rho_2(z)$ dat diagonaal naburige 1-1 paren tegelijk bezet zijn bepaald worden. Ten slotte bespreken we een manier om de oplossing van de CTM vergelijkingen te benaderen. Er zijn in ieder geval twee methodes bekend om dit te doen. De eerste methode, die hier niet aan bod zal komen, is van Baxter en komt neer op itereren door de CTM vergelijkingen, in combinatie met een *power method*. De tweede methode, de Corner Transfer Matrix Renormalisation Group (CTMRG) methode, wordt wel in dit hoofdstuk besproken en is overgenomen uit het proefschrift van Chan [12]. De CTMRG methode komt grofweg neer op het volgende. Gegeven de CTM behorende bij $N \times N$ roosters wordt de CTM van $N + 1 \times N + 1$ roosters bepaald. Deze nieuwe CTM wordt gediagonaliseerd en de kleinste eigenwaarden worden weggegooid (i.e.: alleen de belangrijke *large scale* informatie wordt behouden). Hierna wordt de CTM weer ingeperkt tot het formaat van de oorspronkelijke CTM die bij de $N \times N$ roosters hoorde. Dit proces geeft een benadering waarbij als het ware de *large scale* informatie van een heel grote CTM in het formaat van een kleinere CTM wordt gestopt, wat de berekenbaarheid sterk ten goede komt. De methode van Chan heb ik geïmplementeerd in Matlab en daarmee verkrijg ik precies de waarden van Baxter. In deze scriptie wordt slechts geconcentreerd op het bepalen van numerieke waarden voor gegeven z . Het is ook mogelijk om met de CTMRG een machtreeks voor $k(z)$ te bepalen. Baxter en Chan vonden met hun methodes de lage dichtheidsexpansie rond $z = 0$:

$$\kappa(z) = 1 + z - 2z^2 + 8z^3 - 40z^4 + 225z^5 - 1362z^6 + \dots$$

die echter een nogal kleine convergentiestraal heeft door de singulariteit van $k(z)$ in $z = -0.12 \dots$. Onlangs heeft Chan [3] 92 termen van deze expansie bepaald.

In dit hoofdstuk zullen we, voor notationeel gemak en om consistent te blijven met de gebruikte literatuur, het gewicht van een rooster iets anders benaderen. In plaats van het gewicht van een rooster σ per element $\sigma(i, j)$ te tellen, zullen we hier het gewicht tellen door van ieder deelrooster van 4 elementen $\begin{pmatrix} \sigma(i, j) & \sigma(i, j+1) \\ \sigma(i+1, j) & \sigma(i+1, j+1) \end{pmatrix}$ het gemiddelde

gewicht te bepalen en te sommeren over al deze deelroosters. Vanaf nu noemen we een dergelijk deelrooster een *vlak*.

Definitie 3.1

Laat $a, b, c, d \in \{0, 1\}$. Het gemiddelde gewicht van het vlak $\begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$ is:

$$\omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} := \begin{cases} 0 & \text{als } ab + bd + dc + ca \neq 0 \\ z^{\frac{a+b+c+d}{4}} & \text{anders.} \end{cases}$$

Merk op dat het gemiddelde gewicht van een vlak het gewicht z van ieder aangrenzend element met een factor $1/4$ telt. Als een rooster alle 4 vlakken rond dat element bevat dan zal het gewicht van het element dus volledig geteld zijn. Bijgevolg verschillen het gewicht in de zin van Definitie 1.3 en deze methode¹ slechts van elkaar op de randen van het rooster. Dit verschil wordt verwaarloosbaar in geval van een $M \times N$ rooster, het nemen van de MN -de machtswortel en de limiet $M, N \rightarrow \infty$. Deze benadering geeft dus precies dezelfde waarden voor $k(z)$. Daarom wordt in dit hoofdstuk vanaf nu met ‘gewicht’ de gewichtssom zoals beschreven in de voetnoot bedoeld.

Definitie 3.2

Laat N een positief geheel getal en laat $a \in \{0, 1\}$. Een Corner Transfer Matrix (CTM) $A_N(a)$ is een $\text{Fib}(N+1-a) \times \text{Fib}(N+1-a)$ matrix - geïndexeerd door alle correcte vectoren $v_i \in \mathbb{R}^N$ die voldoen aan $v_i(1) = a$ - waarvan de elementen gegeven zijn door:

$$A_N(a)(i, j) = \sum_{\sigma} \prod_{p=1}^{N-1} \prod_{q=1}^{N-1} \omega \begin{pmatrix} \sigma(p, q) & \sigma(p, q+1) \\ \sigma(p+1, q) & \sigma(p+1, q+1) \end{pmatrix}.$$

De sommatie loopt over alle correcte N bij N roosters σ waarvan de eerste rij en eerste kolom zijn gegeven door $\sigma(1, *) = v_i$ respectievelijk $\sigma(*, 1) = v_j$.

In andere woorden: $A_N(a)(i, j)$ is gelijk aan de som van de gewichten van alle N bij N roosters σ waarvan de bovenste rij en de meest linker kolom gelijk zijn aan de vectoren v_i respectievelijk v_j . De spin in de linker bovenhoek $\sigma(1, 1)$ is gelijk aan a .

Definitie 3.3

Laat N een positief geheel getal zijn en laat $a, b \in \{0, 1\}$. Een matrix $F_N(a, b)$ is een $\text{Fib}(N+1-a) \times \text{Fib}(N+1-b)$ matrix - geïndexeerd door alle correcte vectoren v_i en w_j in \mathbb{R}^N die voldoen aan $v_i(1) = a$ respectievelijk $w_j(1) = b$ - waarvan de elementen gegeven zijn door:

$$F_N(a, b)(i, j) = \prod_{p=1}^{N-1} \omega \begin{pmatrix} \sigma(1, p) & \sigma(2, p+1) \\ \sigma(1, p+1) & \sigma(2, p+1) \end{pmatrix}.$$

Hierbij is σ het $N \times 2$ rooster met kolommen $\sigma(*, 1) = v_i$ en $\sigma(*, 2) = w_j$.

In andere woorden: $F_N(a, b)(i, j)$ is gelijk aan het gewicht van het N bij 2 rooster σ waarvan de linker en rechter kolom gelijk zijn aan de vectoren v_i respectievelijk w_j . De bovenste twee spins zijn $\sigma(1, 1) = a$ en $\sigma(1, 2) = b$.

¹sommeren over de gemiddelde gewichten van alle vlakken van het rooster

Opmerking 3.4

$\text{tr}(A_N(a)^4)$ is gelijk aan de gewichtsom over alle $2N - 1$ bij $2N - 1$ roosters waarvan het middelste element gelijk is aan a .

Het volgende lemma maakt CTM's handig en belangrijk.

Lemma 3.5

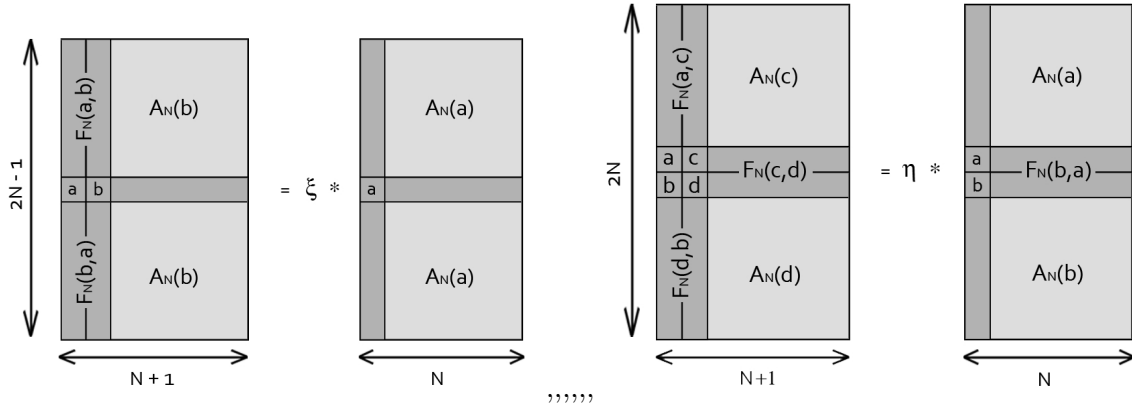
In de limiet voor $N \rightarrow \infty$ gelden voor zekere $\eta, \xi \in \mathbb{R}$ de volgende CTM vergelijkingen

$$\sum_{b \in \{0,1\}} F(a,b)A^2(b)F(b,a) = \xi A^2(a) \quad (3.1)$$

$$\sum_{c,d \in \{0,1\}} \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} F(a,c)A(c)F(c,d)A(d)F(d,b) = \eta A(a)F(a,b)A(b) \quad (3.2)$$

$$\kappa = \eta/\xi. \quad (3.3)$$

'Bewijs 1'. Een intuïtieve verklaring van Lemma 3.5 wordt gegeven door onderstaande plaatjes.



Zoals in de linker figuur te zien is komt de term $\sum_b F(a,b)A^2(b)F(b,a)$ overeen met de gewichtsom van $(N+1)$ bij $(2N-1)$ roosters, terwijl de term $A^2(a)$ overeen komt met de gewichtsom van N bij $(2N-1)$ roosters. De als eerste beschreven roosters bevatten $2N-1$ posities meer. Aangezien κ de partitiefunctie per positie is, is het aannemelijk dat, voor N heel groot, de gewichtsom van het eerste rooster een factor $\xi \approx \kappa^{2N-1}$ groter is dan die van het tweede rooster. Op een zelfde manier volgt uit de tweede vergelijking dat $\eta \approx \kappa^{(N+1)(2N)-N(2N)} = \kappa^{2N}$, zodat $\kappa \approx \eta/\xi$. \square

In [12] geeft Chan een bewijs van de geldigheid van de CTM vergelijkingen, waarvan ik de grote lijnen hieronder zal uitleggen.

'Bewijs 2'. Beschouw eerst een normale rijovergangsmatrix T_M en het maximumprincipe

$$\Lambda_M = \max_{\psi \neq 0} \frac{\psi^t T_M \psi}{\psi^t \psi} \quad (3.4)$$

waarbij ψ een vector uit \mathbb{R}^{2^M} aanduidt. Het doel is om de optimale ψ te vinden omdat $k(z)$ dan uit λ_M gevonden kan worden. Daartoe wordt eerst gemaximaliseerd over een beperkt deel van de vectoren uit \mathbb{R}^{2^M} , namelijk vectoren waarvan de elementen voldoen aan:

$$\psi(\sigma_1, \dots, \sigma_M) := \text{tr}(F_N(\sigma_1, \sigma_2)F_N(\sigma_2, \sigma_3) \dots F_N(\sigma_M, \sigma_1)). \quad (3.5)$$

Hier zijn de $F_N(\sigma_i, \sigma_{i+1})$ nog arbitraire matrices van dimensie 2^N , en voor alle $i \in \{1, \dots, M\}$: $\sigma_i \in \{0, 1\}$. Vanaf nu noemen we een variabele σ_i een *spin*. In de volgende stap definiëren we een 2^{2N+1} bij 2^{2N+1} matrix R , geïndexeerd door $2N+1$ spins. R heeft elementen

$$R_{(\lambda,a,\mu),(\lambda',b,\mu')} := F_{\lambda,\lambda'}(a,b)F_{\mu,\mu'}(a,b)$$

waarbij a en b spins zijn en $\lambda, \lambda', \mu, \mu'$ verzamelingen van N spins. Aan de hand van de definities van ψ en R kan afgeleid worden dat

$$\psi^t \psi = \text{tr}(R^M).$$

Met de restrictie dat $F_M^t(a,b) = F_M(b,a)$ volgt dat R hermiets is, dus als we ξ definiëren als de dominante eigenwaarde van R dan hebben we we (analoog aan het bewijs van Lemma 2.28) dat

$$\lim_{M \rightarrow \infty} (\psi^t \psi)^{1/M} = \lim_{M \rightarrow \infty} (\text{tr}(R^M))^{1/M} = \xi.$$

Er kan eveens een matrix S met dominante eigenwaarde η gedefinieerd worden, waarvoor op de zelfde manier kan worden aangetoond dat

$$\psi^t T_M \psi = \text{tr}(S^M)$$

en

$$\lim_{M \rightarrow \infty} (\psi^t T_M \psi)^{1/M} = \eta.$$

De gevonden vergelijkingen substitueren in het maximumprincipe geeft:

$$\lambda_M = \max_{\psi \neq 0} \frac{\psi^t T_M \psi}{\psi^t \psi} \geq \max_{F \neq 0} \frac{\psi^t T_M \psi}{\psi^t \psi} = \max_{F \neq 0} \frac{S^M}{R^M}$$

zodat

$$\kappa = \lim_{M \rightarrow \infty} \Lambda^{1/M} \geq \max_{F \neq 0} \frac{\eta}{\xi}. \quad (3.6)$$

We zien dus dat $\frac{\eta}{\xi}$ een ondergrens van k geeft.

De derde stap behelst het (deels) vertalen van de matrices R en S naar de matrices in de CTM vergelijkingen. Laat X de eigenvector van R die hoort bij ξ . X bevat 2^{2N+1} elementen, die zo gerangschikt kunnen worden dat zij twee $2^N \times 2^N$ matrices $X(0), X(1)$ vormen. Elk van deze matrices wordt geïndexeerd door N spins en de elementen zijn $X_{\lambda,\mu}(a) = X_{\lambda,a,\mu}$, waarbij λ en μ weer sets van N spins aanduiden. Uit de definities van R en X kan worden afgeleid dat de eigenwaardenvergelijking $\xi X = RX$ equivalent is met:

$$\xi X(a) = \sum_b F(a,b)X(b)F(b,a). \quad (3.7)$$

Op een zelfde manier kan de eigenvector Y van S , die hoort bij eigenwaarde η , geïdentificeerd worden met een verzameling $2^N \times 2^N$ matrices $Y(a,b)$, waarvoor de eigenwaardenvergelijking $\eta Y = SY$ equivalent is met:

$$\eta Y(a,b) = \sum_{c,d} \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} F(a,c)Y(c,d)F(d,b). \quad (3.8)$$

In de vierde stap is het de bedoeling dat uitdrukking (3.6) gemaximaliseerd wordt over alle F . Specifieker: er wordt een noodzakelijke en voldoende conditie afgeleid waaronder

$$\frac{\partial(\eta/\xi)}{\partial F} = 0. \quad (3.9)$$

Met de afgeleide van een scalair getal naar een matrix wordt hier bedoeld: de matrix die gevormd wordt door het scalaire getal naar ieder van de matrixelementen te differentiëren. In andere woorden: $\frac{df(A)}{dA}(i, j) = \frac{df(A)}{dA(i, j)}$. Voorwaarde (3.9) uitwerken geeft de conditie

$$\frac{\eta}{\xi} \frac{\sum_{c,d} \text{tr}(Y(c, d)Y(d, c))}{\sum_c \text{tr}(X^2(c))} \cdot X(a)F(a, b)X(b) = \sum_{c,d} \omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} Y(a, c)F(c, d)Y(d, b). \quad (3.10)$$

In de vijfde stap wordt de matrix $A(a)$ gedefinieerd als wortel van $X(a)$ (waarbij ook opgemerkt wordt dat voor $A(a)$ een CTM gekozen kan worden!):

$$X(a) = A^2(a). \quad (3.11)$$

Met behulp hiervan wordt vervolgens aangetoond dat de identiteit

$$Y(a, b) = A(a)F(a, b)A(b) \quad (3.12)$$

vergelijking (3.10) en dus ook vergelijking (3.9) impliceert.

Samengevat hebben we de vergelijkingen (3.7), (3.8), (3.11) en (3.12) tot onze beschikking. De eerste twee impliceren dat ξ en η de eigenwaarden zijn van de matrices R respectievelijk S , zodat de ondergrens in (3.6) geldt. De laatste twee impliceren dat $\frac{\eta}{\xi}$ afgeleide 0 heeft ten opzichte van de matrices F en dus, zo zegt Chan, de maximale waarde aanneemt.

Door (3.7), (3.8), (3.11) en (3.12) in elkaar in te vullen volgt dat zij overeenkomen met de eerste twee CTM vergelijkingen in Lemma 3.5.

Ten slotte is een verklaring van de derde vergelijking in Lemma 3.5 van belang: er moet nog worden aangetoond dat in oneindig grote roosters (voor $N \rightarrow \infty$) geldt dat de benadering in (3.6) exact wordt: $\kappa = \frac{\eta}{\xi}$. Daartoe wordt afgeleid dat de ruimte gegenereerd door vergelijking (3.5) de optimale ψ van (3.4) bevat.

Dit gebeurt grofweg als volgt. Eerst worden een algemene vector $\phi = T_M^{N-1}\phi_0$ en 2^{N-1} bij 2^{N-1} matrices $F'(a, b)$ gedefinieerd in termen van een zekere functie $f(\sigma_i, \sigma_{i+1})$. Als $F(a, b) = F'(a, b)$ en $\psi = \phi$ worden gesubstitueerd blijken ϕ en $F'(a, b)$ te voldoen aan (3.5). Ten slotte wordt f zodanig gekozen dat ϕ_0 in de basis van eigenvectoren van T_M een niet-nul veelvoud van de eigenvector bij Λ bevat, zodat voor $N \rightarrow \infty$: $\phi = T_M^{N-1}\phi_0$ asymptotisch niet alleen de partitiefunctie voor $M \times N$ roosters wordt, maar ook de optimale ψ . Bijgevolg geldt voor oneindig grote roosters dat de optimale ψ voldoet aan (3.5) voor $F(a, b) = F'(a, b)$. Daarom is voor oneindig grote roosters de optimale ψ bevat in de verzameling vectoren die voldoen aan (3.5). \square

Opmerking 3.6

Waar ik zelf niet geheel van overtuigd ben bij bovenstaand bewijs is het volgende. Er wordt afgeleid dat $\frac{\eta}{\xi}$ de optimale waarde k aanneemt voor oneindig grote roosters, door aan te tonen dat de afgeleide van $\frac{\eta}{\xi}$ naar de F matrices gelijk is aan 0. Naar mijn mening wordt hiermee alleen aangetoond dat $\frac{\eta}{\xi}$ stationair is: het is nog niet uitgesloten dat $\frac{\eta}{\xi}$ eigenlijk een minimum, of een niet-globaal maximum is.

Opmerking 3.7

In het tweede bewijs van de CTM vergelijkingen blijkt het niet nodig te zijn aan te nemen dat X , Y , A en F matrices van de gegeven dimensies zijn. De dimensies in Definitie 3.2 en 3.3 voor $A(a)$ en $F(a, b)$ zijn weliswaar de enige die grafisch zinvol te interpreteren zijn (zoals in het eerste 'bewijs' van de CTM vergelijkingen), maar het blijkt dat net zo goed aangenomen kan worden dat $A(a)$ en $F(a, b)$ van willekeurige grootte zijn (zolang ze maar 'even groot' zijn: de dimensies moeten consistent zijn met de matrixvermenigvuldigingen in de CTM vergelijkingen) [12, p. 75]. De term Corner Transfer Matrix wordt daarom ook wel gebruikt voor alle matrices die voldoen aan de CTM vergelijkingen.

Nu we de CTM vergelijkingen hebben, willen we ze kunnen oplossen om de waarde van κ te vinden. In deze scriptie bespreken we alleen de Corner Transfer Matrix Renormalisation Group (CTMRG) methode. Deze is in 1995 ontwikkeld door Nishino en Okunishi [13]. Hieronder beschrijf ik het algoritme zoals Chan het in zijn proefschrift heeft gebruikt voor het Hard Squares Model. Een belangrijke stap in het algoritme is het uitbreiden van de matrices $A(a)$ naar uitgebreide CTM matrices $A_{ext}(a)$. In de grafische interpretatie van Definitie 3.2 komt dit neer op het uitbreiden van $A_a := A_N(a)$ naar $A_{ext}(a) := A_{N+1}(a)$: het gewicht van een extra rij en kolom wordt toegevoegd.

$$A_{ext}(a) := \begin{pmatrix} \sum_b \omega \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} F(0, b) A(b) F(b, 0) & \sum_b \omega \begin{pmatrix} a & 1 \\ 0 & b \end{pmatrix} F(0, b) A(b) F(b, 1) \\ \sum_b \omega \begin{pmatrix} a & 0 \\ 1 & b \end{pmatrix} F(1, b) A(b) F(b, 0) & \sum_b \omega \begin{pmatrix} a & 1 \\ 1 & b \end{pmatrix} F(1, b) A(b) F(b, 1) \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

Net zo kunnen de F matrices worden uitgebreid tot matrices $F_{ext}(a, b)$. In de grafische interpretatie van Definitie 3.3 komt dit neer op het uitbreiden van $F(a, b) := F_N(a, b)$ naar $F_{ext}(a, b) := F_{N+1}(a, b)$: het gewicht van twee extra spins wordt toegevoegd.

$$F_{ext}(a, b) := \begin{pmatrix} \omega \begin{pmatrix} b & 0 \\ a & 0 \end{pmatrix} F(0, 0) & \omega \begin{pmatrix} b & 1 \\ a & 0 \end{pmatrix} F(0, 1) \\ \omega \begin{pmatrix} b & 0 \\ a & 1 \end{pmatrix} F(1, 0) & \omega \begin{pmatrix} b & 1 \\ a & 1 \end{pmatrix} F(1, 1) \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Algoritme 3.8

De CTMRG methode verloopt als volgt.

- (1) Start met $n \times n$ benaderingen van $A(a)$ en $F(a, b)$, typisch $n = 1$.
- (2) Bereken $A_{ext}(a)$ en $F_{ext}(a, b)$.
- (3) Diagonaliseer $A_{ext}(a)$. Dat wil zeggen: vind orthogonale matrices $P_{ext}(a)$ zodanig dat $P_{ext}^t(a) A_{ext}(a) P_{ext}(a)$ diagonaal is, met de diagonaalelementen geordend van groot naar klein.
- (4) Als we de matrices blijvend willen uitbreiden, zet $n = n + 1$.
- (5) Laat $P(a)$ de matrix bestaande uit de eerste n kolommen van $P_{ext}(a)$.
- (6) Bereken $A(a) = P^t(a) A_{ext}(a) P(a)$ en $F(a, b) = P^t(a) F_{ext}(a, b) P(b)$
- (7) Ga naar stap 2.

In stap 2 worden de matrices uitgebreid zodat zij, als het ware, de gewichtsom van grotere roosters beschrijven. In stap 3 worden de eigenwaarden van A_{ext} bepaald. Als we stap 4 overslaan wordt de nieuwe $A(a)$ in stap 6 gelijk gesteld aan de $n \times n$ diagonaalmatrix met de grootste eigenwaarden van de $2n \times 2n$ matrix A_{ext} op de diagonaal. Terug in stap 2 zijn de matrices $A(a)$ en $F(a, b)$ dan precies even groot als eerst, met als verschil dat alleen de *large scale* informatie (uit de grootste eigenwaarden) is behouden. Als we stap 4 niet overslaan dan wordt $A(a)$ in stap 6 gelijk gesteld aan de $n+1 \times n+1$ diagonaalmatrix met de grootste eigenwaarden van A_{ext} op de diagonaal. Terug in stap 2 is de dimensie van de matrix dan definitief toegenomen.

Opmerking 3.9

Een *Interaction Round a Face (IRF)* model op een vierkant rooster is een interactiemodel waarvan alle interacties plaatsvinden in één vlak en die interacties worden gedefinieerd door een uitdrukking van de vorm van Definitie 3.1. De principes van de CTMRG methode kunnen ook op andere IRF modellen dan het Hard Squares Model worden toegepast. Het enige verschil zit, impliciet, in stap 2 van het algoritme omdat de uitbreidingsregels (3.13) en (3.14) anders zijn. Ieder IRF model heeft immers een andere definitie van $\omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$. Subtiele voorwaarde voor de geldigheid van het bewijs van de CTM vergelijkingen is wel dat de interacties reflectiesymmetrisch moeten zijn: $\omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} b & a \\ d & c \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} c & d \\ a & b \end{pmatrix} = \omega \begin{pmatrix} d & c \\ b & a \end{pmatrix}$.

Als met het CRMGRG algoritme de benaderingen van de matrices $A(0)$, $A(1)$ en $F(0, 0)$, $F(1, 0)$ en $F(0, 1)$ eenmaal gevonden zijn, dan kunnen zij gebruikt worden om dingen te berekenen. Niet alleen de waarde van κ , die vrij direct volgt uit de CTM vergelijkingen, maar ook verwachtingen van spinproducten kunnen worden benaderd (zie [12, p. 67-71] voor afleidingen).

De dichtheid ρ wordt bijvoorbeeld gegeven door

$$\rho = \frac{\sum_{a \in (0,1)} a \cdot \text{tr} A^4(a)}{\sum_{a \in (0,1)} \text{tr} A^4(a)} = \frac{\text{tr} A^4(1)}{\sum_{a \in (0,1)} \text{tr} A^4(a)}$$

hetgeen grafisch goed interpreteerbaar is. Als $A(0)$ en $A(1)$ namelijk de gewichtsom van $N \times N$ roosters beschrijven, dan staat in de teller de gewichtsom van $2N-1 \times 2N-1$ roosters met een 1 in het midden, terwijl in de noemer de hele gewichtsom van alle $2N-1 \times 2N-1$ roosters staat, zodat de formule de kans op een 1 in het midden berekend.

Voor verwachtingen van andere functies van de spins kan het volgende beschouwd worden. Als $\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k$ en σ_l spins zijn rond een enkel vlak $\begin{pmatrix} \sigma_i & \sigma_j \\ \sigma_k & \sigma_l \end{pmatrix}$ en $f(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l)$ een of andere functie van die spins, dan is de verwachtingswaarde van f gegeven door :

$$\langle f(\sigma_i, \sigma_j, \sigma_k, \sigma_l) \rangle = \frac{\sum_{a,b,c,d \in (0,1)} f(a, b, c, d) \cdot Q(a, b, c, d)}{Q(a, b, c, d)}$$

waarbij $Q(a, b, c, d) := \text{tr} \left(\omega \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} A(a)F(a, c)A(c)F(c, d)A(d)F(d, b)A(b)F(b, a) \right)$ geïnterpreteerd

kan worden als de gewichtsom van $2N \times 2N$ roosters met het vlak $\begin{pmatrix} \sigma_i & \sigma_j \\ \sigma_k & \sigma_l \end{pmatrix}$ in het midden.

Voorbeeld 3.10

Als voorbeeld zijn in Figuur 6 de verwachtingswaarde van de dichtheid ρ en het diagonale spinproduct $\rho_2 := \langle \sigma_j \sigma_k \rangle$ bepaald. Een veelgebruikte naam voor ρ_2 is *next nearest neighbour correlatie*. Merk op dat ρ_2 gelijk is aan de kans dat een willekeurig vlak $\begin{pmatrix} \sigma_i & \sigma_j \\ \sigma_k & \sigma_l \end{pmatrix}$ de configuratie $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ heeft.

4 Combinatorische eigenschappen van T_M

In dit hoofdstuk bekijken we allerlei interessante kleine eigenschappen van T_M , zoals de recursieve structuur, de determinant, de inverse en het aantal positieve eigenwaarden.

Lemma 4.1

Definieer voor alle M de matrix C_M als de matrix die bestaat uit de eerste $\text{Fib}(M+1)$ kolommen van T_M , dan geldt voor alle z dat T_M en C_M recursief gegeven zijn door

$$T_{M+1} = \begin{pmatrix} T_M & z \cdot C_M \\ C_M^t & 0 \end{pmatrix} \text{ en } C_M = \begin{pmatrix} T_{M-1} \\ C_{M-1}^t \end{pmatrix}$$

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & z \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \text{ en } C_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Bewijs. Beschouw eerst het geval $z = 1$. Definieer $\Gamma_1 = \{1, \dots, \text{Fib}(M+2)\}$ en $\Gamma_2 = \{\text{Fib}(M+2)+1, \dots, \text{Fib}(M+3)\}$ en bekijk de definitie van T_{M+1} in termen van de $\text{Fib}(M+3)$ correcte kolomvectoren $v_{M+1,i}$ uit \mathbb{R}^{M+1} (Definitie 2.3). Aangezien deze kolomvectoren binair geordend zijn geldt voor alle $i \in \Gamma_1$ dat het $M+1$ -de element van de i -de vector $v_{M+1,i}$ gelijk is aan 0, terwijl voor alle $i \in \Gamma_2$ het $M+1$ -de element van $v_{M+1,i}$ gelijk is aan 1. Nu:

Voor alle $(i, j) \in \Gamma_1 \times \Gamma_1$ geldt dat

$$T_{M+1}(i, j) = 1 \Leftrightarrow \langle v_{M+1,i}, v_{M+1,j} \rangle = 0 \Leftrightarrow \langle v_{M,i}, v_{M,j} \rangle + 0 \cdot 0 = 0 \Leftrightarrow T_M(i, j) = 1$$

dus de $\text{Fib}(M+2)$ bij $\text{Fib}(M+2)$ blokmatrix in de linkerbovenhoek van T_{M+1} is gelijk aan T_M .

Voor alle $(i, j) \in \Gamma_2 \times \Gamma_2$ geldt dat

$$T_{M+1}(i, j) = 0 \Leftrightarrow \langle v_{M,i-\text{Fib}(M+2)}, v_{M,j-\text{Fib}(M+2)} \rangle + 1 \cdot 1 = \langle v_{M+1,i}, v_{M+1,j} \rangle > 0$$

dus de $\text{Fib}(M+1)$ bij $\text{Fib}(M+1)$ blokmatrix in de rechter onderhoek is een 0-matrix.

Voor alle $(i, j) \in \Gamma_1 \times \Gamma_2$ geldt dat

$$T_{M+1}(i, j) = 1 \Leftrightarrow \langle v_{M,i}, v_{M,j-\text{Fib}(M+2)} \rangle + 0 \cdot 1 = \langle v_{M+1,i}, v_{M+1,j} \rangle = 0$$

dus de $\text{Fib}(M+2)$ bij $\text{Fib}(M+1)$ blokmatrix in de rechter bovenhoek van T_{M+1} is C_M , de matrix die bestaat uit de eerste $\text{Fib}(M+1)$ kolommen van T_M . Analoog voor de linker onderhoek.

Hiermee is aangetoond dat $T_{M+1} = \begin{pmatrix} T_M & C_M \\ C_M^t & 0 \end{pmatrix}$. Door deze relatie toe te passen op T_M volgt direct uit de definitie van C_M dat $C_M = \begin{pmatrix} T_{M-1} \\ C_{M-1}^t \end{pmatrix}$.

De recursierelatie voor algemene z volgt ten slotte uit Opmerking 2.5, omdat voor alle $i \in \Gamma_2$ geldt dat $D_{M+1}^2(i, i) = z \cdot D_{M+1}^2(i - \text{Fib}(M+2), i - \text{Fib}(M+2))$. In iets beeldender woorden: de extra factor z ontstaat omdat de $\text{Fib}(M+1)$ correcte vectoren die de $\text{Fib}(M+1)$ 'meest rechtse' kolommen van T_{M+1} indexeren allemaal een extra 1 hebben, op coördinaat $M+1$.

□

Lemma 4.2

Voor alle $M \geq 1$ en $z = 1$ heeft T_{M+2} de volgende decompositie in een bovendriehoeksmatrix L en een diagonale matrix B :

$$T_M = L_M^t B_M L_M$$

waarbij

$$L_{M+2} = \begin{pmatrix} L_{M+1} & \begin{pmatrix} L_M \\ 0 \\ L_M \end{pmatrix} \\ 0 & \end{pmatrix}, L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$B_{M+2} = \begin{pmatrix} B_{M+1} & 0 \\ 0 & -B_M \end{pmatrix}, B_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, B_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Bewijs. We bewijzen met inductie. Neem aan dat er een M bestaat zodanig dat voor alle $m \leq M+1$ geldt dat $T_m = L_m^t B_m L_m$ en $C_{m-1} = L_{m-1}^t \begin{pmatrix} B_{m-2} L_{m-2} \\ 0 \end{pmatrix}$ - de geldigheid hiervan voor kleine m is eenvoudig te checken -, dan geldt ook:

$$\begin{aligned} L_{M+1}^t \begin{pmatrix} B_M L_M \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} L_M^t & 0 \\ (L_{M-1}^t & 0) & L_{M-1}^t \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_{M-1} & 0 \\ 0 & -B_{M-2} \\ & & 0 \end{pmatrix} L_M \\ &= \begin{pmatrix} L_M^t B_M L_M \\ (L_{M-1}^t B_{M-1}, 0) L_M \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} T_M \\ C_M^t \end{pmatrix} \\ &= C_{M+1} \end{aligned} \tag{4.1}$$

zodat

$$\begin{aligned} L_{M+2}^t B_{M+2} L_{M+2} &= \begin{pmatrix} L_{M+1}^t & 0 \\ (L_M^t & 0) & L_M^t \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_{M+1} & 0 \\ 0 & -B_M \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} L_{M+1} & \begin{pmatrix} L_M \\ 0 \\ L_M \end{pmatrix} \\ 0 & \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} L_{M+1}^t & 0 \\ (L_M^t & 0) & L_M^t \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_{M+1} L_{M+1} & \begin{pmatrix} B_M L_M \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 & -B_M L_M \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} L_{M+1}^t B_{M+1} L_{M+1} & L_{M+1}^t \begin{pmatrix} B_M L_M \\ 0 \end{pmatrix} \\ (L_M^t B_M & 0) L_{M+1} & L_M^t B_M L_M + L_M^t (-B_M L_M) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} T_{M+1} & C_{M+1}^t \\ C_{M+1}^t & 0 \end{pmatrix} \\ &= T_{M+2}. \end{aligned} \tag{4.2}$$

De inductieveronderstelling is gebruikt bij stap (4.1) en (4.2) .

□

Gevolg 4.3

Algemeener gelden (vanwege Opmerking 2.7 en Definitie 2.10) voor alle gehele $M \geq 1$ en $z \in \mathbb{R}_{>0}$ de volgende decomposities:

$$T_M(z) = L_M^t B_M (L_M D_M^2(z))$$

$$S_M(z) = (L_M D_M(z))^t B_M (L_M D_M(z))$$

waarbij $L_M D_M^2(z)$ en $L_M D_M(z)$ bovendriehoeksmatrices zijn.

Gevolg 4.4

$$\det(T_M) = z^{(\sum_{i=1}^M \|v_i\|^2)} \cdot \begin{cases} -1 & \text{als } M = 1 \bmod 6 \text{ of } M = 3 \bmod 6 \\ 1 & \text{anders.} \end{cases}$$

Bewijs. Vanwege de expansie in Gevolg 4.3 geldt dat

$$\det(T_M) = \det(L_M^t B_M L_M D_M^2(z)) \quad (4.3)$$

$$= \det(L_M)^2 \cdot \det(D_M^2) \cdot \det(B_M) \quad (4.4)$$

$$= 1^2 \cdot \prod_{i=1}^M z^{\|v_i\|^2} \cdot \det(B_M) \quad (4.5)$$

$$= z^{(\sum_{i=1}^M \|v_i\|^2)} \cdot \det(B_M). \quad (4.6)$$

Vanwege de recursieve definitie in Lemma 4.2 wordt de determinant van B_M bepaald door de relatie $\det(B_{M+2}) = \det(B_{M+1}) \cdot \det(-B_M) = \det(B_{M+1}) \cdot \det(B_M) \cdot (-1)^{\text{Fib}(M+2)}$ met begincondities $\det(B_1) = -1$ en $\det(B_2) = 1$. Aangezien voor de fibonaccigetallen geldt dat $\text{Fib}(N)$ even is dan en slechts dan als $N = 0 \bmod 3$, krijgen we

$$\det(B_{M+2}) = \det(B_{M+1}) \cdot \det(B_M) \cdot \begin{cases} 1 & \text{als } M = 2 \bmod 3 \\ -1 & \text{anders.} \end{cases}$$

Toepassen van deze relatie op de begincondities $B_1 = -1$ en $B_2 = 1$ geeft $B_3 = -1, B_4 = 1, B_5 = 1, B_6 = 1, B_7 = -1, B_8 = 1, \dots$. Vanaf de berekening van B_9 zijn de recursieve relatie en de 'begincondities' B_7 en B_8 precies hetzelfde, zodat het patroon $-1, 1, -1, 1, 1, 1$ zich eendeloos zal herhalen:

$$\det(B_M) = \begin{cases} -1 & \text{als } M = 1 \bmod 6 \text{ of } M = 3 \bmod 6 \\ 1 & \text{anders.} \end{cases}$$

□

We zien dus dat het teken van de determinant periode 6 heeft en dat de absolute waarde van $\det(T_M)$ gelijk is aan z tot de macht 'het totaal aantal 1-en van alle correcte kolomvectoren die in \mathbb{R}^M zitten'. In het bijzonder geldt voor $z = 1$ dat de determinant slechts waarden 1 of -1 kan aannemen.

Stelling 4.5

Sylvesters traagheidswet [14, p. 96]

Laat A een symmetrische matrix en B een inverteerbare matrix, dan heeft BAB^t de zelfde aantallen positieve, negatieve en nulwaardige eigenwaarden als A .

Gevolg 4.6

Laat P_M en N_M de aantallen positieve en negatieve eigenwaarden van $T_M(z)$, dan geldt voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ dat:

$$P_M - N_M = -\frac{2}{\sqrt{3}} \sin \frac{(M-1)\pi}{3}.$$

Bewijs. Omdat $S_M(z)$ en $T_M(z)$ gelijksoortig zijn (Opmerking 2.11) hebben zij de zelfde eigenwaarden. Pas daarom Sylvesters traagheidswet toe op de decompositie van $S_M(z)$ in Gevolg 4.3, daarbij opmerkende dat $L_M D_M(z)$ determinant ongelijk 0 heeft en dus inderdaad een inverteerbare matrix is. Er volgt dat $T_M(z)$ de zelfde aantallen positieve en negatieve eigenwaarden heeft als B_M .

Vanwege de definiërende recursierelatie van B_M in Lemma 4.2, volgt dat $P_{M+2} - N_{M+2} = (P_{M+1} + N_M) - (N_{M+1} + P_M) = (P_{M+1} - N_{M+1}) - (P_M - N_M)$ met begincondities $P_1 - N_1 = 0$ en $P_2 - N_2 = -1$.

Deze relatie toepassen geeft de rij $0, -1, -1, 0, 1, 1, 0, -1, \dots$ die repetent is omdat $P_7 - N_7 = P_1 - N_1$ en $P_8 - N_8 = P_2 - N_2$. Er volgt dat

$$P_M - N_M = \begin{cases} 0 & \text{als } M = 1 \bmod 6 \text{ of } M = 4 \bmod 6 \\ -1 & \text{als } M = 2 \bmod 6 \text{ of } M = 3 \bmod 6 \\ 1 & \text{anders.} \end{cases} = -\frac{2}{\sqrt{3}} \sin \frac{(M-1)\pi}{3}$$

□

Merk op dat de hoeveelheid positieve en negatieve eigenwaarden van $T_M(z)$ onafhankelijk is van z voor $z \in \mathbb{R}_{>0}$! Bovendien is $\lim_{M \rightarrow \infty} \frac{P_M}{M} = \frac{1}{2}$.

Stelling 4.7

Voor $z = 1$ is de inverse van T_M gegeven door

$$T_{M+3}^{-1} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} -T_M^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} T_M^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} & T_{M+1}^{-1} \\ \begin{pmatrix} T_M^{-1} & 0 \end{pmatrix} & -T_M^{-1} & 0 \\ T_{M+1}^{-1} & 0 & -T_{M+1}^{-1} \end{pmatrix}$$

$$T_0^{-1} := (1), T_1^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, T_2^{-1} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Bewijs. Dit kan bewezen worden met inductie door gewoon blok voor blok te controleren of $T_M^{-1} T_M = T_M T_M^{-1} = id$, maar het is iets interessanter om tot het bewijs te komen vanuit de decompositie van Lemma 4.2. Merk eerst op dat voor alle M geldt dat: $L_{M+3}^{-1} = \begin{pmatrix} L_{M+2}^{-1} & \begin{pmatrix} -L_{M+1}^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 & L_{M+1}^{-1} \end{pmatrix}$, iets wat eenvoudig met inductie bewezen kan worden.

Er volgt dat:

$$\begin{aligned}
& T_{M+3}^{-1} \\
&= L_{M+3}^{-1} B_{M+3}^{-1} (L_{M+3}^{-1})^t \\
&= \begin{pmatrix} L_{M+2}^{-1} & \begin{pmatrix} -L_{M+1}^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \\ 0 & L_{M+1}^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} B_{M+2}^{-1} & 0 \\ 0 & -B_{M+1}^{-1} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} (L_{M+2}^{-1})^t & 0 \\ (-L_{M+1}^{-1})^t & (L_{M+1}^{-1})^t \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} L_{M+2}^{-1} B_{M+2}^{-1} (L_{M+2}^{-1})^t + \begin{pmatrix} -L_{M+1}^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} (-B_{M+1}^{-1}) (-L_{M+1}^{-1})^t & \begin{pmatrix} -L_{M+1}^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} (-B_{M+1}^{-1}) (L_{M+1}^{-1})^t \\ L_{M+1}^{-1} (-B_{M+1}^{-1}) (-L_{M+1}^{-1})^t & L_{M+1}^{-1} (-B_{M+1}^{-1}) (L_{M+1}^{-1})^t \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} L_{M+2}^{-1} B_{M+2}^{-1} (L_{M+2}^{-1})^t - \begin{pmatrix} L_{M+1}^{-1} B_{M+1}^{-1} (L_{M+1}^{-1})^t & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} L_{M+1}^{-1} B_{M+1}^{-1} (L_{M+1}^{-1})^t \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} L_{M+1}^{-1} B_{M+1}^{-1} (L_{M+1}^{-1})^t & 0 \end{pmatrix} & -L_{M+1}^{-1} B_{M+1}^{-1} (L_{M+1}^{-1})^t \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} T_{M+2}^{-1} - \begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} & 0 \end{pmatrix} & -T_{M+1}^{-1} \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

De tot nu toe verkregen relatie voor T_{M+2}^{-1} opnieuw invullen in de linker bovenhoek geeft:

$$\begin{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} - \begin{pmatrix} T_M^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} T_M^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} T_M^{-1} & 0 \end{pmatrix} & -T_M^{-1} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} & 0 \end{pmatrix} & -T_{M+1}^{-1} \end{pmatrix}.$$

De termen $\begin{pmatrix} T_{M+1}^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ vallen weg, zodat de gewenste uitdrukking voor T_{M+3}^{-1} ontstaat. \square

Gevolg 4.8

Algemeener geldt, met Opmerking 2.7 en Stelling 4, dat de inverse van $T_M(z)$ voor alle $z \in \mathbb{R}_{>0}$ precies bepaald is door

$$T_M^{-1}(z) = D_M^{-2}(z) \cdot T_M^{-1}(1).$$

Opmerking 4.9

De technieken om de grootste eigenwaarde van T_M te bepalen kunnen niet (in ieder geval niet direct) worden toegepast op zijn inverse, onder meer doordat T_M^{-1} geen niet-negatieve matrix is.

Opmerking 4.10

Om de grootste eigenwaarde van T_M beter af te schatten zou men kunnen kijken naar de positieve eigenwaarde λ_M van T_M^{-1} met de kleinste absolute waarde, want $\Lambda_M = \frac{1}{\lambda_M}$. Verscheidene pogingen hiertoe hebben echter niets interessants opgeleverd.

Opmerking 4.11

Bekijk het geval waarin z een geheel getal ongelijk 0 is. Doordat in dat geval zowel $T_M(z)$ als $T_M^{-1}(z)$ alleen geheeltallige elementen bevat, geldt voor iedere $N \in \mathbb{Z}$ dat $\text{tr}(T_M^N(z))$ een geheel getal is.

Opmerking 4.12

Door te kijken naar een geschikte deelmatrix van $T_M(z)$ kan met behulp van Lemma 4.1 ook eenvoudig een recursierelatie voor $\tilde{T}_M(z)$ bepaald worden. Met behulp hiervan kunnen heel grote matrices $T_M(z)$ en $\tilde{T}_M(z)$ snel worden gegenereerd, ten behoeve van het bepalen van scherpe boven- en ondergrenzen voor $\kappa(z)$.

Stelling 4.13

Laat $A_1, \dots, A_p, B_1, \dots, B_p \in \mathbb{N}_{\geq 2}$. De volgende zaken zijn equivalent:

- (i) $\prod_{i=1}^p \tilde{\Lambda}_{A_i} > \prod_{i=1}^p \tilde{\Lambda}_{B_i}$
- (ii) Er bestaat een $M \in \mathbb{N}_{\geq 1}$ zodanig dat voor alle $m \geq M$ geldt dat:
 $\prod_{i=1}^p \sum_j \tilde{\lambda}_j^{A_i} > \prod_{i=1}^p \sum_j \tilde{\lambda}_j^{B_i}$,
 waarbij de sommen lopen over alle eigenwaarden van \tilde{T}_m .
- (iii) Er bestaat een $M \in \mathbb{N}_{\geq 1}$ zodanig dat voor alle $m \geq M$ geldt dat:
 $\prod_{i=1}^p \sum_j \lambda_j^{A_i} > \prod_{i=1}^p \sum_j \lambda_j^{B_i}$,
 waarbij de sommen lopen over alle eigenwaarden van T_m .

Bewijs. "(i) \Leftrightarrow (ii)":

In het onderstaande wordt met het subscript $\tilde{\lambda}$ ew \tilde{T}_m bedoeld dat de sommatie over alle eigenwaarden van \tilde{T}_m loopt. Merk allereerst op dat (i) equivalent is met

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^p \sum_{(\tilde{\lambda} \text{ ew } \tilde{T}_{A_i})} \tilde{\lambda}^M \right)^{1/M} = \prod_{i=1}^p \tilde{\Lambda}_{A_i} > \prod_{i=1}^p \tilde{\Lambda}_{B_i} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^p \sum_{(\tilde{\lambda} \text{ ew } \tilde{T}_{B_i})} \tilde{\lambda}^M \right)^{1/M}.$$

Dit geldt dan en slechts dan als er een $M \in \mathbb{N}$ bestaat zodanig dat voor alle $m \geq M$:

$$\prod_{i=1}^p \sum_{(\tilde{\lambda} \text{ ew } \tilde{T}_{A_i})} \tilde{\lambda}^m > \prod_{i=1}^p \sum_{(\tilde{\lambda} \text{ ew } \tilde{T}_{B_i})} \tilde{\lambda}^m. \quad (4.7)$$

Voor alle $m, A \in \mathbb{N}$ hebben we vanwege Lemma 2.28 dat:

$$\sum_{(\tilde{\lambda} \text{ ew } \tilde{T}_A)} \tilde{\lambda}^m = \text{tr}(\tilde{T}_A^m) = \text{tr}(\tilde{T}_m^A) = \sum_{(\tilde{\lambda} \text{ ew } \tilde{T}_m)} \tilde{\lambda}^A. \quad (4.8)$$

Invullen van (4.8) in (4.7) geeft (ii):

"(i) \Leftrightarrow (iii)"

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^p \langle \mathbf{e}, \tilde{T}_{A_i}^{M+1} \mathbf{e} \rangle \right)^{1/M} = \prod_{i=1}^p \tilde{\Lambda}_{A_i} > \prod_{i=1}^p \tilde{\Lambda}_{B_i} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left(\prod_{i=1}^p \langle \mathbf{e}, \tilde{T}_{B_i}^{M+1} \mathbf{e} \rangle \right)^{1/M}$$

Dit geldt dan en slechts dan als er een $M \in \mathbb{N}$ bestaat zodanig dat voor alle $m \geq M$:

$$\prod_{i=1}^p \langle \mathbf{e}, \tilde{T}_{A_i}^{m+1} \mathbf{e} \rangle > \prod_{i=1}^p \langle \mathbf{e}, \tilde{T}_{B_i}^{m+1} \mathbf{e} \rangle. \quad (4.9)$$

Voor alle $m, A \in \mathbb{N}_{\geq 2}$ hebben we vanwege Lemma 2.26, 2.28 en het bewijs van Lemma 2.4 dat:

$$\langle \mathbf{e}, \tilde{T}_A^{m+1} \mathbf{e} \rangle = \tilde{Z}_{m,a}(z) = \text{tr}(T_m^A) = \sum_{(\lambda \text{ ew } T_m)} \lambda^A. \quad (4.10)$$

Invullen van (4.10) in (4.9) geeft (iii): □

5 Hard Squares Model als ééndimensionaal probleem

Het bepalen van de partitiefunctie voor 1 bij M roosters bleek makkelijk op te lossen, met als resultaat de fibonaccigetallen. Het geval met algemene $M \times N$ roosters is, zoals blijkt uit de vele pagina's die deze woorden zijn voorgegaan, veel moeilijker op te lossen. Dit suggereert dat het handig zou kunnen zijn om het tweedimensionale model te vertalen naar een model op ééndimensionale roosters. Het volgende lemma doet dit voor de Hard Square Entropy constante. Ten behoeve van de overzichtelijkheid en omdat de hier beschreven gedachten jong zijn, beperkt dit hoofdstuk zich tot schetsmatige bewijzen en alleen het geval $z = 1$.

Lemma 5.1

Laat $\mathcal{Y}_{N,R}$ het aantal correcte binaire vectoren $v \in \mathbb{R}^R$ waarvoor, naast $v(i) \cdot v(i+1) = 0$ voor alle $i = 1 \dots R-1$, ook $v(i) \cdot v(i+N) = 0$ voor $i = 1 \dots R-N$ geëist wordt. Dan:

$$\kappa(1) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} [\mathcal{Y}_{N,MN}(1)]^{\frac{1}{MN}}.$$

Bewijs. Laat W_1 de verzameling van correcte binaire vectoren uit \mathbb{R}^{MN} die aan de eisen van dit lemma voldoen, laat W_2 de verzameling van correcte $M \times N$ matrices (zoals in Definitie 1.1) en laat W_3 de deelverzameling van W_2 bestaande uit matrices A waarvan bovendien geëist wordt dat voor alle $i = 1, \dots, M-1$: $A(i, N) \cdot A(i+1, 1) = 0$. Op matrices A uit W_3 is met andere woorden een extra randvoorwaarde opgelegd die eist dat een 1 in de meest linker kolom niet kan coëxisteren met een 1 in de meest rechter kolom, een rij daarboven. Aangezien dit alleen beperkingen oplegt aan de linker en rechter M -kolomvectoren van A kan de extra randvoorwaarde het aantal toegestane matrices ten hoogste met een factor 2^{2M} verminderen. De MN -de machtswortel van deze factor gaat naar 1 in de limiet van $M, N \rightarrow \infty$, zodat de extra randvoorwaarde verwaarloosbaar wordt. Dus

$$\kappa(1) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} \mathcal{Z}_{M,N}(1)^{\frac{1}{MN}} = \lim_{M,N \rightarrow \infty} |W_2|^{\frac{1}{MN}} = \lim_{M,N \rightarrow \infty} |W_3|^{\frac{1}{MN}}. \quad (5.1)$$

De belangrijkste stap in het bewijs is nu de observatie dat er een *bijjectie* is tussen W_1 en W_3 : dit is in te zien door alle rijen van een matrix uit W_3 naast elkaar te plaatsen zodat een vector uit W_1 ontstaat. We hebben daarom dat $\mathcal{Y}_{N,MN}(1) = |W_1| = |W_3|$ en met vergelijking (5.1) volgt het resultaat. \square

Een mogelijke manier om het probleem van Lemma 5.1 aan te vallen, is door het in de vorm van een polynoom te schrijven. De meest natuurlijke manier lijkt de volgende:

Lemma 5.2

$$\kappa(1) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} \left[\sum_{x_1=0}^1 \dots \sum_{x_{MN}=0}^1 \prod_{i=1}^{MN-N} (1 - x_i x_{i+1}) (1 - x_i x_{i+N}) \right]^{\frac{1}{MN}}.$$

Bewijs. Laat $x = (x_1, \dots, x_{MN})$ een binaire vector. We hebben dat x voor alle $i = 1, \dots, MN-1$ voldoet aan $x_i \cdot x_{i+1} = 0$ en voor alle $i = 1 \dots MN-N$ aan $x_i \cdot x_{i+N} = 0$, dan en slechts dan als $\prod_{i=1}^{MN-1} (1 - x_i x_{i+1}) \cdot \prod_{i=1}^{MN-N} (1 - x_i x_{i+N}) = 1$. Dit product is

bovendien gelijk aan 0 als x níet aan de genoemde voorwaarden voldoet. Als we sommeren over alle 2^{MN} mogelijke vectoren krijgen we

$$\mathcal{Y}_{N,MN}(1) = \sum_{x_1=0}^1 \dots \sum_{x_{MN}=0}^1 \prod_{i=1}^{MN-1} (1 - x_i x_{i+1}) \cdot \prod_{i=1}^{MN-N} (1 - x_i x_{i+N}).$$

Het resultaat volgt met Lemma 5.1 en na het verwaarlozen van effecten van de rand. \square

Gevolg 5.3

$$\kappa(1) = \lim_{M,N \rightarrow \infty} \left[\sum_{n=1}^{2^{MN}} \prod_{i=1}^{MN-N} (1 - x_i(n) x_{i+1}(n)) (1 - x_i(n) x_{i+N}(n)) \right]^{\frac{1}{MN}}$$

waarbij

$$x_i(n) = \sin^2 \left(\left\lfloor \frac{n-1}{2^{i-1}} \right\rfloor \frac{\pi}{2} \right).$$

Bewijs. De MN sommen van Lemma 5.2 komen neer op een sommatie over alle 2^{MN} binaire vectoren (x_1, \dots, x_{MN}) . Een andere manier om over deze vectoren te sommeren is door de binaire vectoren in lexicografische volgorde te ordenen en vervolgens voor alle n iedere coördinaat van de n -de vector te geven als functie van n . De i -de coördinaat $x_i(n)$ is precies gegeven door $\sin^2 \left(\left\lfloor \frac{n-1}{2^{i-1}} \right\rfloor \frac{\pi}{2} \right)$. \square

Een totaal andere methode om het probleem van Lemma 5.1 aan te vallen, is door er een nieuw soort transfermatrix op los te laten.

Definitie 5.4

Een $(1, N)$ -correcte vector v is een binaire vector die voor alle i voldoet aan $v(i) \cdot v(i+1) = 0$ en $v(i) \cdot v(i+N) = 0$.

Definitie 5.5

De N -de Enkelelementsovergangsmatrix E_N is een matrix die geïndexeerd wordt door alle $(1, N)$ -correcte vectoren uit \mathbb{R}^{N+1} , gegeven door

$$E_N(i, j) = \begin{cases} 1 & \text{als } v_i(k) = v_j(k-1) \text{ voor alle } k = 2, 3, \dots, N \\ 0 & \text{anders.} \end{cases}$$

Een vermenigvuldiging met de matrix E_N komt neer op het toevoegen van een extra element aan een vector met behoud van $(1, N)$ -correctheid van die vector, vergelijkbaar met de manier waarop een RTM het gewicht van een extra kolom aan een correcte matrix toevoegt. Bijgevolg kan $\mathcal{Y}_{N,R}(1)$ voor alle N en R geteld worden met behulp van E_N^R , vergelijkbaar met de manier waarop $\mathcal{Z}_{M,N}$ in Lemma 2.4 wordt geteld met behulp van een macht van T_M .

Voor de eerste paar matrices E_1, E_2, \dots, E_6 is numeriek geverifieerd dat E_N een reëel positieve eigenwaarde $\check{\Lambda}_N$ heeft die in absolute waarde groter is dan alle overige eigenwaarden. Indien dit vermoeden voor alle N klopt dan volgt met Lemma 5.1 dat de Hard Square Entropy Constante is gegeven door $\lim_{N \rightarrow \infty} \check{\Lambda}_N$.

Met een aantal tussenstappen, die hier te veel ruimte zouden vergen, kan een zelfde 'afleiding' gegeven worden voor een vergelijkbare Enkelementsovergangsmatrix X_N , waarvan de recursieve structuur gegeven is door:

$$A_3 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

en voor alle $N \geq 3$:

$$A_{N+1} = \begin{pmatrix} A_N & 0 \\ 0 & A_N \end{pmatrix}$$

$$B_{N+1} = \begin{pmatrix} B_N & 0 \\ 0 & B_N \end{pmatrix}$$

$$X_N = \begin{pmatrix} A_N & 0 & B_N & 0 \\ 0 & A_N & 0 & B_N \end{pmatrix}.$$

Deze matrix $X(N)$ is niet alleen computationeel interessant omdat hij naar verhouding heel veel nullen bevat, ook lijkt hij erg op een circulante matrix en preliminaire beschouwingen lijken erop te wijzen dat hij inderdaad een deel van de structuur van het spectrum van circulante matrices geërfd heeft. Het zou mooi zijn als we de spectraalradius van X_N in de limiet voor $N \rightarrow \infty$ exact kunnen vinden, want dat resultaat zal hoogstvermoedelijk gelijk zijn aan de Hard Square Entropy constant.

6 Monte Carlo

Het Hard Squares Model kan, zoals ontzettend veel statistische modellen, ook met een Monte Carlo simulatie benaderd worden. Een Monte Carlo simulatie komt grofweg neer op het heel vaak herhalen van een numeriek experiment, waarna de waarde die men wil weten gemiddeld wordt over alle experimenten. Een veel gebruikte techniek in de statistische mechanica is het zogenaamde Metropolisalgoritme [15], dat onder andere gebaseerd is op Markovketens. Voor het Hard Squares Model gaat het algoritme als volgt:

- (i) Begin met een N bij M binair rooster σ .
- (ii) Kies uniform random een spin σ_i op σ .
- (iii) Bereken het energieverval ∂E dat ontstaat als σ_i omklapt, i.e.: als σ_i verandert in $1 - \sigma_i$.
- (iv) Als $\partial E < 0$ dan is de nieuwe situatie waarin σ_i omgeklapt is energetisch gunstiger. Klap daarom σ_i om en ga terug naar stap (ii). Als echter $\partial E \geq 0$: ga naar stap (v).
- (v) De nieuwe situatie is energetisch ongunstiger, maar toch wordt deze met een zekere kans toegelaten. Genereer een uniform random variabele $X \in [0, 1]$. Nu wordt σ_i omgeklapt dan en slechts dan als $X < e^{-\beta \partial E}$. Hierbij is β de inverse temperatuur. Ga terug naar stap (ii).

Als dit algoritme zodanig vaak is uitgevoerd dat er een configuratie is bereikt die typisch is voor de parameters van het model, dan volgt een grote hoeveelheid iteraties van het algoritme waarbij in iedere iteratie ook een of andere wetenswaardige variabele, bijvoorbeeld de dichtheid, wordt berekend. Na afloop wordt over al deze dichtheden gemiddeld. Om te bepalen wanneer een typische configuratie bereikt is kan bijvoorbeeld kwalitatief gekeken worden naar het verloop van de fluctuaties in de dichtheid; als de fluctuaties niet meer afnemen zit je meestal goed.

Om het algoritme uit te voeren moeten we het energieverval ∂E kunnen uitrekenen en we moeten weten hoe we de voorwaarde in stap (v) in termen van het model kunnen schrijven. Voor dit alles hebben we de Hamiltoniaan van het Hard Squares Model nodig. Deze is, als functie van alle MN spins van het rooster, gegeven door:

$$\mathcal{H}(\sigma_1, \dots, \sigma_{MN}) = -\mu \sum_{i=1}^{MN} \sigma_i + J(\sigma).$$

Hierbij is μ de chemische potentiaal. De tweede term $J(\sigma)$ is gedefinieerd als 0 indien het rooster σ correct is en ∞ indien het rooster niet correct is, zodat een incorrect rooster energetisch oneindig ongunstig is. Ter verificatie dat deze Hamiltoniaan consistent is met de gebruikelijke definitie van een canonicke partitiefunctie in termen van een Hamiltoniaan:

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{MN}} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma_1, \dots, \sigma_{MN})} &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{MN}} e^{\mu \beta (\sum_{i=1}^{MN} \sigma_i - J(\sigma))} \\
&= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_{MN}} z^{(\sum_{i=1}^{MN} \sigma_i - J(\sigma))} \\
&= \sum_{m=0} g(M, N, m) z^m \\
&= \mathcal{Z}_{M,N}(z).
\end{aligned}$$

In het bovenstaande is gebruikt dat de activiteit is gegeven door $z = e^{\mu\beta}$.

Nu is alles in het algoritme te beschrijven in termen van het Hard Squares Model:

$$\partial E(\sigma_i) = \begin{cases} \infty & \text{als het nieuwe rooster niet correct is} \\ -\mu & \text{als het nieuwe rooster correct is en } \sigma_i = 0 \\ \mu & \text{als het nieuwe rooster correct is en } \sigma_i = 1. \end{cases}$$

zodat de voorwaarde voor het omklappen van een spin in stap (iv) wordt:

Als het rooster incorrect is of $z = 1$, klap geen spin om. In de overige gevallen:

Als $z > 1$: klap de spin om als $\sigma_i = 0$.

Als $z < 1$: klap de spin om als $\sigma_i = 1$.

en in stap (v) wordt de voorwaarde:

Als het rooster incorrect is, klap geen spin om. In de overige gevallen:

Als $z \geq 1$: klap de spin om als $X < e^{-\beta \cdot \partial E} = e^{-\mu\beta} = \frac{1}{z}$.

Als $z \leq 1$: klap de spin om als $X < e^{-\beta \cdot \partial E} = e^{\mu\beta} = z$.

7 Resultaten

M	$\frac{\Lambda_{M+1}}{\Lambda_M}$	$\frac{\tilde{\Lambda}_{M+1}}{\tilde{\Lambda}_M}$	$\Lambda_M^{1/M}$	$\tilde{\Lambda}_M^{1/M}$
1	1.49206603764753...	1.4920660376475...	1.61803398874989...	1.61803398874989...
2	1.50416736820669...	1.3680544626242...	1.55377397403004...	1.55377397403004...
3	1.50292822609300...	1.5612096431108...	1.53705927541412...	1.48922284859254...
4	1.50306009551534...	1.4811943040920...	1.52845452584494...	1.50690222590181...
5	1.50304676764349...	1.5124949400374...	1.52334154618348...	1.50172519164424...
6	1.50304820872735...	1.4990187533992...	1.51994015251839...	1.50351480947590...
7	1.50304806757356...	1.5048302768823...	1.51751544433439...	1.50287169106996...
8	1.50304808371067...	1.5022566096977...	1.51569943415136...	1.50311637482104...
9	1.50304808228931...	1.5034042574246...	1.51428848619865...	1.50302082106893...
10	1.50304808248385...	1.5028869349325...	1.51316067342597...	1.50305916030338...
11	1.50304808247237...	1.5031214743576...	1.51223854234046...	1.5030435-263596...
12	1.50304808247523...	1.5030145138974...	1.51147052905271...	1.50305000012495...
13	1.50304808247526...	1.5030634992129...	1.51082097631579...	1.50304727038539...
14	1.50304808247532...	1.5030409794476...	1.51026443900783...	1.50304842958155...
15			1.50978227250749...	1.50304793290481...

Tabel 1: Voor $z = 1$ zijn met behulp van de eerste 15 eigenwaarden berekend: de ondergrenzen $\frac{\Lambda_{M+1}}{\Lambda_M}$ en bovengrenzen $\Lambda_M^{1/M}$ en $\tilde{\Lambda}_{2p}^{1/2p}$ van $\kappa(1)$. Voor de volledigheid is ook $\frac{\tilde{\Lambda}_{M+1}}{\tilde{\Lambda}_M}$ berekend. Merk op dat $\Lambda_M^{1/M}$ de partitiefunctie per positie is van de M bij N roosters voor M vast en $N \rightarrow \infty$. De berekeningen zijn met Matlab uitgevoerd.

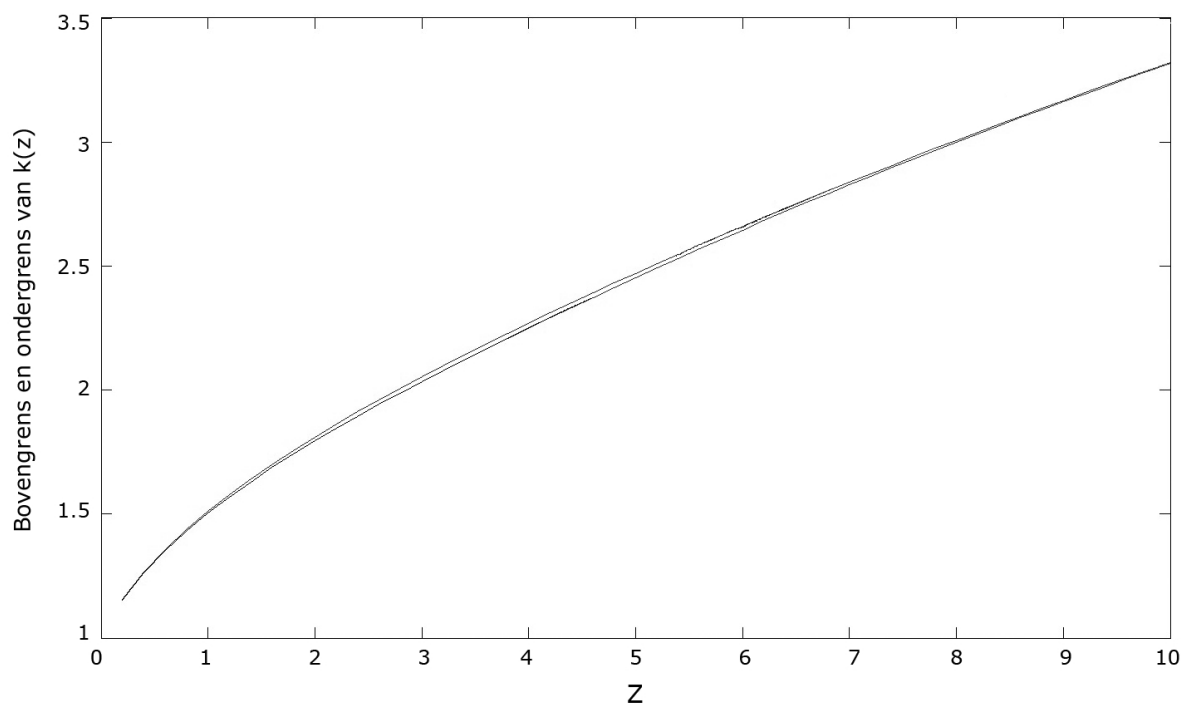
De beste boven- en ondergrenzen uit Tabel 1 geven voor de Hard Square Entropy constante $\kappa(1)$ dat:

$$1.503048082475(26) \leq \kappa(1) \leq 1.503048429581(55).$$

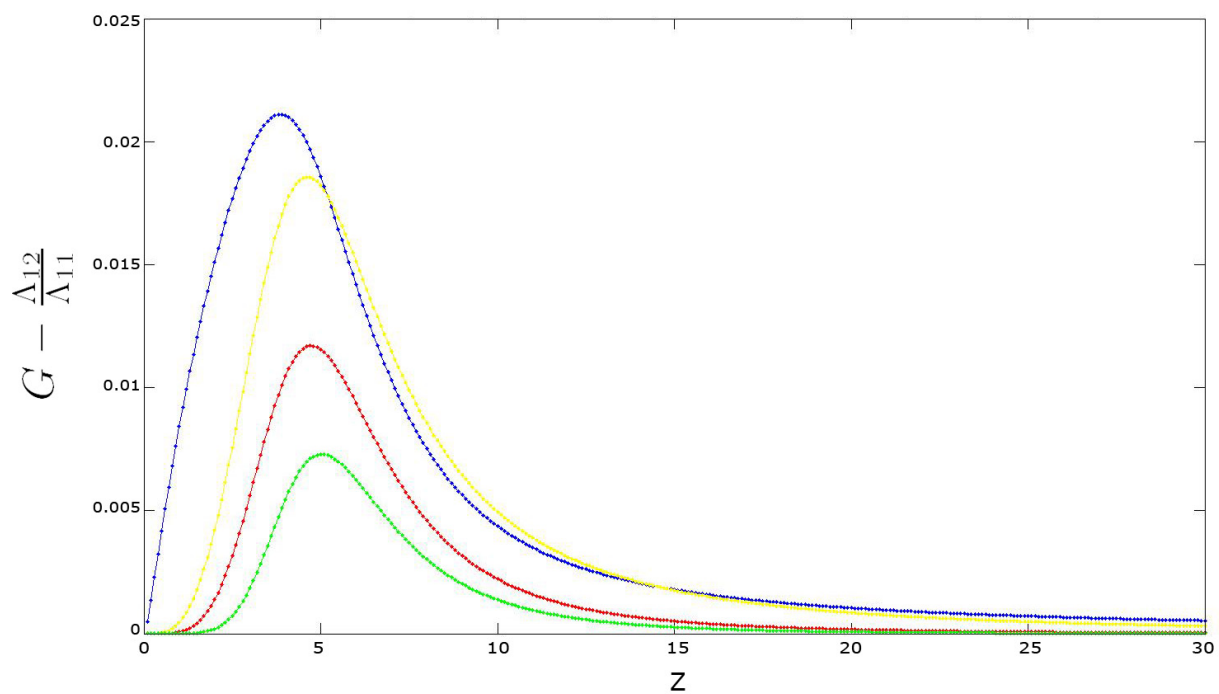
Een CTMRG benadering met 900 iteraties, waarvan 3 per matrixgrootte, geeft de benaderingen:

$$\kappa(1) = 1.503048082475332..., \rho(1) = 0.226570815462714... \text{ en } \rho_2(1) = 0.0819820025822159...$$

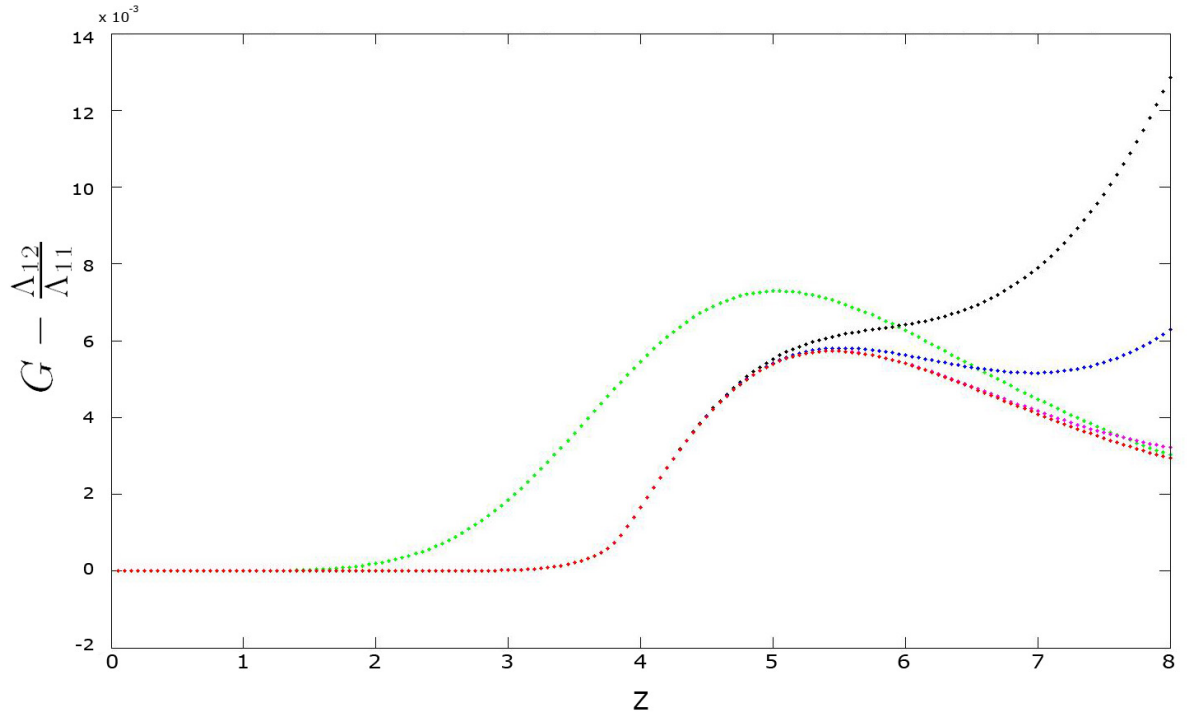
hetgeen de maximale precisie van de gebruikte variabelen in Matlab was en volledig overeenkomt met de waarden gevonden in [4].



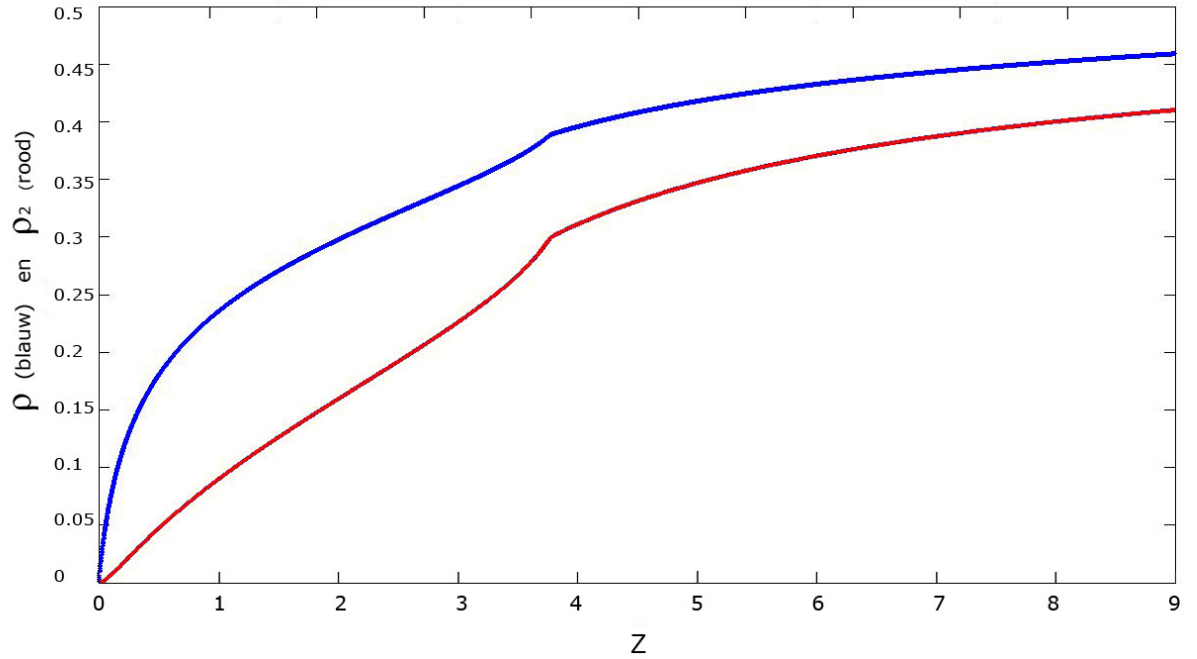
Figuur 3: De ondergrens $\frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{11}}$ en bovengrens $\Lambda_{12}^{1/12}$ als functie van z geven voor alle $z \geq 0$ een goede benadering van $k(z)$.



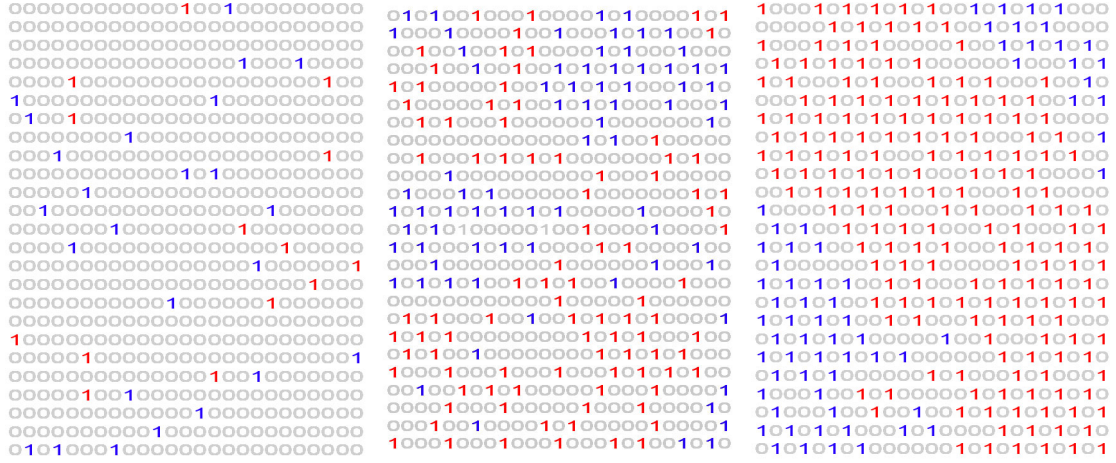
Figuur 4: Het verschil $G - \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{11}}$ tussen bovengrenzen en een sterke ondergrens van $\kappa(z)$ is uitgezet tegen z . Hierbij is $G = \tilde{\Lambda}_{12}^{1/12}$ (groen), $\tilde{\Lambda}_8^{1/8}$ (rood), $\tilde{\Lambda}_6^{1/6}$ (geel) of $\Lambda_{12}^{1/12}$ (blauw).



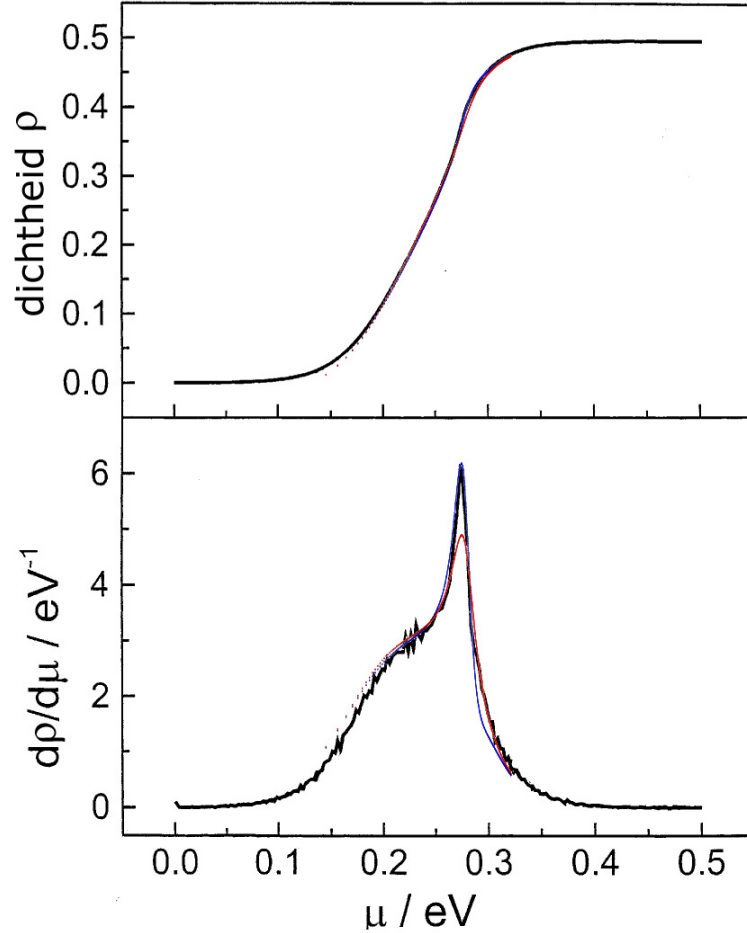
Figuur 5: Het verschil $G - \frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{11}}$ is uitgezet tegen z . Hierbij is G gelijk aan de cyclische bovengrens $\tilde{\Lambda}_{12}^{1/12}$ (groen) of gelijk aan een CTMRG benadering met in totaal 300 iteraties waarvan 8 (zwart), 10 (blauw), 15 (magenta) of 20 (rood) iteraties per matrixgrootte.



Figuur 6: CTMRG benadering van de dichtheid ρ (blauw) en next nearest neighbour correlatie ρ_2 (rood) als functie van z . Berekend met 1000 CTMRG iteraties, waarvan 500 per matrix grootte. In beide gevallen is er een discontinuïteit in de afgeleide bij $z \approx 3.8$.



Figuur 7: Monte Carlo snapshots van een 25 bij 25 rooster na 2 miljoen iteraties. Van links naar rechts: $z = 0.1$, $z = 2$ en $z = 6$. De kleuren rood en blauw geven aan op welke van de twee 'schaakbord' subroosters een 1 zich bevindt.



Figuur 8: Benaderingen van de dichtheid ρ en $dp/d\mu/eV^{-1}$ als functie van μ/eV . De zwarte lijn is een Monte Carlo simulatie van Koper en Lukkien uit [6]. De blauwe en rode lijn zijn benaderingen op basis van de ondergrens $\frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{11}}$ respectievelijk de zwakke bovengrens $\Lambda_{12}^{1/12}$ van $\kappa(z)$, verkregen door de relatie $\rho(z) = d/dz(\ln(\kappa(z)))$ uit [4, p. 3] op deze grenzen los te laten.

8 Discussie

We hebben grofweg drie benaderingsmethodes van $\kappa(z)$ bekeken: ten eerste de exacte boven- en ondergrenzen met Row Transfer Matrices, ten tweede de benaderingen met de CTMRG methode en ten derde een Monte Carlo simulatie.

VERGELIJKING VAN DE BENADERINGSMETHODES

De RTM methode heeft het voordeel dat de boven- en ondergrenzen bewezen zijn. Uit Figuur 4 blijkt dat de grenzen in het regime $0 \leq z \leq 3.79$ dichter bij elkaar liggen naarmate z dichter bij 0 ligt, vlak na de singulariteit $z_+ = 3.79...$ [2] zijn de benaderingen het slechtst en voor nog grotere z kruipt het verschil tussen de boven- en ondergrens terug naar 0; de grenzen komen steeds dichter bij de functie \sqrt{z} . Dat laatste is niet verwonderlijk omdat het laat zien dat voor grote z geldt: $\rho(z) = z \frac{d}{dz} \ln(k(z)) \approx z \frac{d}{dz} \ln(\sqrt{z}) = \frac{1}{2}$, de grootst mogelijke dichtheid die overeenkomt met een schaakbordpatroon van 1-en en 0-en.

Een ander voordeel van de RTM grenzen is dat zij een goede indicatie geven van voor welke parameters de CTMRG methode nog betrouwbaar is: in Figuur (5) is te zien dat CTMRG voor kleine z goed werkt, maar voor grotere z doorbreekt de curve de exacte bovengrens. Uit verscheidene simulaties blijkt dat de CTMRG methode, bij een vast totaal aantal iteraties, de exacte RTM bovengrens pas bij een hogere z doorbreekt als stap (4) van het CTMRG algoritme weinig wordt uitgevoerd, dus als er veel iteraties per matrixgrootte zijn. Indien stap(4) wel relatief vaak wordt uitgevoerd ontvangt men in ruil een enorm snelle convergentie van $\kappa(z)$ voor kleine z . Aangezien de waarde $z = 1$ in dit 'kleine z ' gebied valt was het mogelijk om met Matlab binnen weinige seconden de eerste 15 decimalen van $\kappa(1), \rho(1)$ en $\rho_2(1)$ te vinden (variabelen met meer decimalen bleken lastig te implementeren in Matlab), precies overeenkomend met de resultaten van Baxter in [4]. Hiermee stippen we en passant een ander belangrijk voordeel van CTMRG aan: het is relatief eenvoudig om andere observabelen zoals ρ en ρ_2 te berekenen, zoals aan het eind van het hoofdstuk over CTM's is toegelicht.

In Figuur 6 zijn ρ en ρ_2 als functie van z weergegeven. Beide lijken een discontinuïteit in de afgeleide te hebben bij $z = 3.8...$, een punt dat goed overeenkomt met de fysische singulariteit van $\kappa(z)$. Voor nog grotere z is de CTMRG benadering met deze parameters niet betrouwbaar, maar in de figuur is wel al zichtbaar dat ρ en ρ_2 beide richting de te verwachten maximale waarde $1/2$ kruipen.

Wat opvalt is dat de CTMRG benadering voor kleine z zeer dicht tegen de RTM ondergrens aanzit. Dit versterkt het beeld dat uit tabel 1 naar voren springt, namelijk dat de eigenwaardenquotiënten Λ_{M+1}/Λ_M een veel betere benadering van $\kappa(z)$ geven dan $\Lambda_M^{1/M}$ en $\tilde{\Lambda}_M^{1/M}$, in ieder geval voor kleine z . Voor grote z , ongeveer $z \geq 4$, lijkt uit Figuur 5 te blijken dat de bovengrens $\tilde{\Lambda}_M^{1/M}$ juist een betere benadering geeft.

De Monte Carlo simulatie biedt een tweede check op de bovengenoemde methodes. Door de formule $\rho(z) = d/dz(\ln(\kappa(z)))$ op de RTM onder- en bovengrens toe te passen kan een benadering van de dichtheid als functie van z gevonden worden. Dat deze benadering dicht bij de werkelijke dichtheid ligt is allerm minst vanzelfsprekend, want we hebben geen boven- en ondergrenzen voor de *afgeleide* van $\kappa(z)$. Toch blijkt uit Figuur 8 dat de (afgeleide van de) benadering van de dichtheid uitstekend overeen komt met een Monte Carlo-simulatie van het Hard Squares Model. Aangezien beide methodes zeer weinig met elkaar te maken is het aannemelijk dat wat we in de figuur zien juist is.

UITBREIDBAARHEID NAAR ANDERE MODELLEN

Zoals in subsectie 2.1 is beschreven, is het goed mogelijk om de RTM benaderingen toe te passen op een algemener model waarin ook horizontale, verticale en diagonale interacties worden meegenomen. Nadeel is dat er geen onderscheid gemaakt kan worden tussen horizontale en verticale interactie, noch tussen de twee diagonale interacties, en dat de interactie niet verder reikt dan next nearest neighbours.

In Opmerking 3.9 is beschreven hoe de CTMRG methode op andere modellen toegepast kan worden. Voordeel is dat de aard van de interacties van alles kan zijn; ieder reflectie-invariant IRF model werkt in principe. Nadelen zijn dat de interactie niet verder kan reiken dan next nearest neighbours en dat vanwege gebrek aan bewijzen a priori onduidelijk is of er parameters bestaan waarvoor de CTMRG benadering voldoende accuraat of precies zal zijn.

Het idee beschreven in Hoofdstuk 5, het vertalen naar een ééndimensionaal model, is zeer geschikt voor generalisering naar modellen waarin er sprake is van een willekeurig aantal interacties, interacties die ook verder kunnen reiken dan de next nearest neighbours. Vooral-snog is echter nog onzeker of dit jonge idee een efficiënte benaderingsmethode kan opleveren. Het biedt in ieder geval wel een interessant perspectief om allerlei modellen equivalent aan elkaar te praten.

Monte Carlo simulaties worden heel veel gebruikt in de statistische mechanica. Een grote kracht is dat veel ingewikkelder statistische modellen ermee aangevallen kunnen worden, modellen die allerlei extra effecten en zelfs tijdsafhankelijkheid meenemen waardoor zij natuurkundig interessant, maar wiskundig onelegant en ‘dus’ moeilijk tot onmogelijk oplosbaar worden. Een Monte Carlo simulatie is de meest wijd toepasbare methode die in deze scriptie genoemd wordt, maar heeft misschien meer weg van een experiment dan van een wiskundige benadering. Wie niet goed oplet ziet numerieke artefacten voor natuurverschijnselen aan. De simulaties kunnen goed dienen als bron van vermoedens en voor het kweken van begrip. Uit de simulaties van Koper en Lukkien komt bijvoorbeeld naar voren dat de vorm van de grafiek van de compressibiliteit vooral afhangt van de aard en hoeveelheid van de interacties en niet van de geometrische structuur van die interacties, hetgeen uitnodigt tot het zoeken naar wiskundige overeenkomsten tussen die modellen.

EXPERIMENTELE COMPONENT

In Figuur 8 zijn de dichtheid en de compressibiliteit (de afgeleide van de dichtheid) als functie van μ weergegeven. De Monte Carlo simulatie komt goed overeen met de RTM benaderingen. We zien dat er een scherpe piek in de compressibiliteit zit bij $\rho \approx 0.37$. Wat verder opvalt is dat er een soort ‘voorgolf’ is: bij toenemende z neemt de compressibiliteit eerst snel toe, maar vlak voor de piek zwakt die groei tijdelijk af. Bij experimenten in het verleden is dit fenomeen wel eens toegeschreven aan extra natuurkundige verschijnselen waar het model geen rekening mee zou houden. In het experiment over adsorptie van bromide op een Ag(001) oppervlak dat in de inleiding beschreven is wordt de voorgolf toegeschreven aan ‘the reorientation of surface water’. Figuur 4 laat echter zien dat de voorgolf puur een gevolg is van de definiërende interacties van het Hard Squares Model.

Hoe zouden we deze voorgolf kunnen interpreteren? Dat kan als volgt. Laten we in gedachten beginnen in $z = 0$ en daarna z steeds een beetje ophogen. Voor kleine z bevat een gemiddeld rooster weinig 1-en (zie Figuur 7 voor $z = 0.1$), dus er zijn veel mogelijkheden om een extra 1 toe te voegen; de dichtheid kan vrijwel onbelemmerd toenemen. Vanaf een zekere z zal een gemiddeld rooster echter dichtgegroeid zijn met ‘eilandjes’ van correcte gebieden die op een van de twee subroosters (zwart of wit) van een schaakbord zitten. Daar waar deze eilandjes elkaar ontmoeten ontstaat een domeinmuur, een grensgebied dat niet

optimaal gevuld is, maar ook geen extra 1-en meer toelaat (zie Figuur 7 voor $z = 2$). Om een extra 1 toe te kunnen voegen moet eerst een deel van een van beide eilanden weer verdwijnen door toevallige fluctuaties. Dit bemoeilijkt de toename van de dichtheid, zodat de compressibiliteit afzwakt. Dit verklaart de voorgolf van Figuur 8.

Als z nog verder toeneemt dan wordt de statistische voorkeur voor gebieden met heel veel 1-en zo groot, dat roosters met 1-arme domeinmuren zeer ongunstig worden, met als gevolg dat de kans dat domeinmuren worden doorbroken toeneemt. Als een domeinmuur eenmaal doorbroken is, eilanden samengevoegd, dan passen er ineens veel meer 1-en op het rooster. Er hoeft niet noodzakelijk sprake te zijn van het *doorbreken* van domeinmuren. Wat vooral belangrijk is dat het aantal posities dat deel uitmaakt van een domeinmuur afneemt, dat het aantal eilanden afneemt, dat ieder overlevend eiland groter wordt -‘meer oppervlakte per rand bevat’- en daardoor naar verhouding meer 1-en kan bevatten. Deze overwegingen verklaren de aanwezigheid van de piek in de compressibiliteit bij $\rho \approx 0.37$.

Na de piek zijn er typisch geen concurrerende eilanden meer. Er zijn typisch slechts een of twee continenten (zie Figuur 7 voor $z = 6$), waarin nog enkele kleine gaten zitten die af en toe verschijnen, zich verplaatsen en weer verdwijnen. De compressibiliteit neemt af, want de maximum dichtheid $\rho = 0.5$ is al bijna bereikt.

Aangezien in deze interpretatie de piek veroorzaakt wordt door het verdwijnen van domeinmuren en het groter worden van eilanden, zodat 1-en over grotere afstanden op het zelfde subrooster van een schaakbord zitten, valt het te verwachten dat rondom de piek de correlatielengte ook plots snel toeneemt. Ocko c.s. lieten iets dergelijks al in een experimentele context zien met behulp van Figuur 1.e. Het is interessant om dit in de toekomst met Monte Carlo ook direct uit het Hard Squares Model te verifiëren.

Conclusies

- (i) De drie gebruikte benaderingsmethodes van $\kappa(z)$ (exacte RTM boven- en ondergrenzen, de CTMRG methode en Monte Carlo simulaties) komen goed overeen. De CTMRG methode is in de huidige vorm zeer precies voor kleine z , maar wordt snel onbetrouwbaar voor toenemende z , terwijl de exacte boven- en ondergrenzen juist steeds scherper worden in dit regime.
- (ii) De exacte grenzen van Calkin en Wilf voor de Hard Square Entropy constante zijn, met behulp van hun eigen technieken, met drie decimalen verbeterd tot:

$$1.503048082475(26) \leq \kappa(1) \leq 1.503048429581(55).$$

- (iii) Alle drie de methodes kunnen op analoge wijze op algemenere interactiemodellen worden toegepast. Een vierde methode, waarin het model is vertaald naar een model met interacties op een ééndimensionaal rooster, biedt wellicht perspectief voor toekomstige toepassingen.
- (iv) De karakteristieke ‘butterfly’ patronen in het voltammogram van het adsorptie-experiment in [8] zijn een direct gevolg van de interacties in het Hard Squares Model en behoeven dus geen verklaring uit extra fysische effecten.

Referenties

- [1] G.M. D'Ariano, M.G. Rasetti, A. Montorsi, *Integrable systems in statistical mechanics*, World Scientific Publishing, 1985
- [2] S. Todo, *Transfer-Matrix Study of Hard-Core Singularity for Hard-Square Lattice Gas*, 2008
- [3] Y. Chan, *Series expansions from the corner transfer matrix renormalization group method: the hard squares model*, arXiv:1107.1677v2, 2011
- [4] R.J. Baxter, *Planar Lattice gases with nearest-neighbour exclusion*, arXiv:cond-mat/9811264v3, 1998
- [5] N.J. Calkin, H.S. Wilf, *The Number of Independent Sets in a Grid Graph*, SIAM J. Discrete Math., p.54-60, 1998
- [6] M.T.M. Koper, J.J. Lukkien, *Modeling the butterfly: influence of lateral interactions and adsorption geometry on the voltammetry at (111) and (100) electrodes*, Surface Science, Volume 498, Number 1-2, p.105-115 (2002)
- [7] M.T.M. Koper, J.J. Lukkien, *Modeling the butterfly: the voltammetry of $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})$ R30 degrees and $p(2 \times 2)$ overlayers on (111) electrodes*, Journal of Electroanalytical Chemistry, Volume 485, Number 2, p.161-165 (2000)
- [8] B. M. Ocko, J. X. Wang, T. Wandlowski, *Bromide Adsorption on Ag(001): A Potential Induced Two-Dimensional Ising Order-Disorder Transition*, Phys. Rev. Lett. 79, 15111514 (1997)
- [9] X. Yong, M.J. Golin, *Algebraic and Combinatorial Properties of the Transfer Matrix of the 2-Dimensional $(1, \infty)$ -Runlength Limited constraint*, The Hong Kong University of Science and Technology, 2002
- [10] M. Marcues, H. Minc, *A survey of matrix theory and matrix inequalities*, Courier Dover Publications, 1992
- [11] R.A. Horn, C.R. Johnson, *Matrix analysis*, Cambridge University Press, 1990
- [12] Y. Chan, *Selected problems in lattice statistical mechanics*, PhD thesis, Department of Mathematics and Statistics, The University of Melbourne, 2005
- [13] T. Nishino, K. Okunishi, *Corner Transfer Matrix Renormalization Group Method*, arXiv:cond-mat/9507087v5, 1995
- [14] A. Björk, *Numerical methods for least squares problems*, SIAM, 1996
- [15] M.E.J. Newman, G.T. Barkema, *Monte Carlo methods in statistical physics*, Oxford University Press, 1999