



ČESKÉ VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V PRAZE
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská



Isingův model feromagnetizace látek

Ising Model of Ferromagnetism

Diplomová práce

Autor: **Bc. Jan Trödler**

Vedoucí práce: **doc. RNDr. Jan Vybíral, Ph.D.**

Akademický rok: 2021/2022

ZADÁNÍ DIPLOMOVÉ PRÁCE

Student: Bc. Jan Trödler
Studijní program: Aplikované matematicko-stochastické metody
Název práce (česky): Isingův model feromagnetizace látek
Název práce (anglicky): Ising model of ferromagnetism

Pokyny pro vypracování:

- 1) Student se seznámí s řešením Isingova modelu, který popisuje feromagnetizaci látek.
- 2) Dále nastuduje analytická řešení Isingova modelu v závislosti na dimenzi, ve které je model řešen. V případě dvourozměrné verze modelu vzájemně porovná různé přístupy řešení.
- 3) Student se seznámí s aspekty metod Markov Chain Monte Carlo a aplikuje je na řešení klasických verzí Isingova modelu, včetně řešení ve 3D.
- 4) Student otestuje řešení Isingova dvourozměrného modelu na jiných grafech než na čtvercových mřížích.
- 5) Vhodnými numerickými experimenty student podpoří výsledky získané analytickým řešením.

Doporučená literatura:

- 1) R. J. Baxter, Exactly solved models in statistical mechanics. Elsevier, 2016.
- 2) L. Onsager, Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. Physical Review, Series II, 65 (3-4), 1944, 117-149.
- 3) L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Statistical Physics. Vol. 5, 1980.
- 4) D. A. Levin, Y. Peres, E. L. Wilmer, Markov chains and mixing times. American Mathematical Society, Providence, RI, 2009.

Jméno a pracoviště vedoucího diplomové práce:

doc. RNDr. Jan Vybíral, Ph.D.

Katedra matematiky FJFI ČVUT v Praze, Trojanova 13, 120 00 Praha 2

Jméno a pracoviště konzultanta:

Datum zadání diplomové práce: 31.10.2021

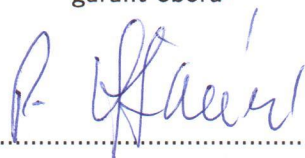
Datum odevzdání diplomové práce: 2.5.2022

Doba platnosti zadání je dva roky od data zadání.

V Praze dne 01.11.2021



garant oboru



vedoucí katedry



děkan

Poděkování:

Chtěl bych zde velmi poděkovat svému školiteli, panu docentu Janu Vybíralovi, za pečlivost, ochotu, vstřícnost a odborné i lidské zázemí při vedení mé diplomové práce. Dále děkuji své rodině, díky které jsem měl možnost až do této chvíle úspěšně studovat a také napsat tuto diplomovou práci.

Čestné prohlášení:

Prohlašuji, že jsem tuto práci vypracoval samostatně a uvedl jsem všechnu použitou literaturu.

V Praze dne 2. května 2022

Jan Trödler

Název práce:

Isingův model feromagnetizace látek

Autor: Bc. Jan Trödler

Program: Aplikované matematicko–stochastické metody

Druh práce: Diplomová práce

Vedoucí práce: doc. RNDr. Jan Vybíral, Ph.D., Katedra matematiky, Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, České vysoké učení technické v Praze

Abstrakt: Tato diplomová práce je rozčleněna do tří částí. V první kapitole jsou vysvětleny základní aspekty Isingova modelu a je představeno řešení jak jednorozměrné, tak dvourozměrné verze tohoto modelu. V případě řešení modelu ve 2D jsou porovnána dvě různá řešení. V druhé kapitole jsou stručně prezentovány metody Markov Chain Monte Carlo. Třetí část práce navazuje praktickými simulacemi na předchozí dvě části, neboť představuje řešení Isingova modelu v 1D, 2D, ale i 3D, vždy na čtvercové mřížce. Simulace jsou poté vyzkoušeny i na jiných mřížkách, konkrétně v případě dvourozměrné verze na hexagonální a trojúhelníkovou mřížce. Součástí této kapitoly je i zkoumání kritické teploty jednotlivých konfigurací.

Klíčová slova: Isingův model, magnetizace, metody Markov Chain Monte Carlo

Title:

Ising Model of Ferromagnetism

Author: Bc. Jan Trödler

Abstract: This thesis is divided into three parts. In the first chapter, the basic aspects of the Ising model are explained and the solution of both one-dimensional and two-dimensional versions of this model is presented. In the case of solving the model in 2D, two different solutions are compared. In the second chapter, Markov Chain Monte Carlo methods are briefly presented. The third part of the thesis follows the previous two parts with practical simulations, as it presents the solution of the Ising model in 1D, 2D, and 3D, always on a square grid. The simulations are then tested on other grids, namely in the case of the two-dimensional version on hexagonal and triangular grids. This chapter also includes an investigation of the critical temperature of each configuration.

Key words: Ising Model, magnetization, Markov Chain Monte Carlo methods

Obsah

Úvod	11
1 Teorie	13
1.1 Fyzikální pohled	13
1.1.1 Konfigurace	13
1.1.2 Partiční suma	14
1.1.3 Magnetizace a ostatní fyzikální veličiny	15
1.2 Obecný Isingův model	16
1.3 Isingův model v 1D	17
1.4 Isingův model ve 2D	21
1.4.1 Základní úprava partiční sumy	21
1.4.2 Přípustné grafy	23
1.4.3 Součet přes cesty	25
1.4.4 Počítání všech cest	28
1.4.5 Teoretická vsuvka	31
1.4.6 Pokračování výpočtu	32
1.5 Isingův model ve 2D – alternativní řešení	35
1.5.1 Vlastnosti matice $(\mathbb{V}\mathbb{W})^{\frac{m}{2}}$	37
1.5.2 Úprava členu $(\mathbb{V}\mathbb{W})_{ij}$	38
1.5.3 Další vlastnosti matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$	39
1.5.4 Inverzní matice k $\mathbb{V}\mathbb{W}$	39
1.5.5 Komutační vztahy pro matice \mathbb{V} a \mathbb{W}	41
1.5.6 Vlastní čísla matic \mathbb{V} a \mathbb{W}	43
1.5.7 Výsledek a shrnutí	44
1.6 Kritická teplota pro čtvercovou mřížku	45
2 Markov Chain Monte Carlo	47
2.1 Základní definice	47
2.2 Metropolisův algoritmus	48
2.2.1 Symetrický řetězec	48
2.2.2 Nesymetrický řetězec	49
2.3 Glauberova dynamika	49
2.3.1 Aplikace Glauberovy dynamiky na Isingův model	50
3 Simulace	51
3.1 Simulace Isingova modelu v 1D	51
3.1.1 Kód simulací v 1D	51
3.1.2 Výsledky simulací v 1D	53

3.2	Simulace Isingova modelu ve 2D	55
3.2.1	Kód simulací ve 2D	55
3.2.2	Výsledky simulací ve 2D	57
3.3	Simulace Isingova modelu ve 3D	60
3.4	Kritická teplota pomocí simulací	63
3.4.1	Kritická teplota v 1D	63
3.4.2	Kritická teplota ve 2D	63
3.4.3	Kritická teplota ve 3D	64
3.5	Simulace modelu ve 3D pomocí obdoby totální variace	65
3.5.1	Výsledky simulací ve 3D pomocí obdoby totální variace	66
3.6	Simulace ve 2D – hexagonální mřížka	66
3.7	Simulace ve 2D – triangulární mřížka	68

Závěr		71
--------------	--	-----------

Úvod

Isingův model feromagnetizace látek patří k známým příkladům fyzikálních modelů. Na základě magnetických dipólových momentů atomárních spinů se snaží nalézt makroskopický popis magnetizace látky. V jedné a ve dvou dimenzích se podařilo tento model analyticky vyřešit, čili nalézt předpis pro fyzikální veličiny, které zaručují možnost exaktního popisu systému. Tato práce, psaná jakožto diplomová práce, má cílů více.

Prvním cílem je seznámení se s problematikou Isingova modelu a následné interpretování jeho řešení v závislosti na dimenzi. Nejznámějším článkem shrnujícím historii Isingova modelu je [1]. Isingův model je pojmenovaný po profesoru Ernstu Isingovi, který se tímto modelem zabýval. Ačkoliv je tento model pojmenovaný právě po Isingovi, tento model poprvé zmínil jeho vedoucí výzkumu, profesor Wilhelm Lenz v práci [2] z roku 1920. Roku 1925 poté model více specifikoval Ernst Ising v původní práci [3]. Následující roky se objevilo velké množství prací, které se pokoušely Isingův model vyřešit - například [4, 5, 6]. Kompletní řešení Isingova dvourozměrného modelu publikoval v roce 1945 L. Onsager v [7].

Čtenáři bude prezentováno jak řešení jednorozměrné verze modelu, tak také řešení ve dvou dimenzích. Nejprve však proběhne stručný exkurz do základních oblastí fyziky. Následně budou v první části této práce prezentována již samotná řešení Isingova modelu. V jedné dimenzi bude představen přímočarý postup, který lze nalézt v mnoha zdrojích, například v [8, 9, 10]. Řešení dvourozměrné verze je ovšem o poznání složitější. V této práci budou prezentovány dva přístupy v řešení. Prvním z nich bude ne tak známá metoda popsaná v [11, 12, 13, 14]. Druhým řešením zreplicovaným v této práci se stane klasický kombinatorický postup, který kompletní jako první prezentoval L. Onsager [7]. Tento výpočet užívá podobných postupů jako řešení v jedné dimenzi - lze nalézt v [8, 15, 16].

Druhou částí této práce bude stručně představení teoretických aspektů metody Markov Chain Monte Carlo. Představeny budou jak Metropolisův algoritmus, tak také Glauberova dynamika. Tyto metody totiž slouží k simulačním řešením studovaného Isingova modelu a představují druhý cíl této práce.

V poslední, tedy třetí části této práce budou prezentovány již samotné výsledky numerických experimentů. Cílů numerických experimentů bude více. Prvním z nich bude vizualizace Isingova modelu, nebo-li zobrazení konfigurací Isingova modelu v závislosti na dimenzi a také na teplotě systému. Tyto vizualizace konkrétních systémů budou provedeny pouze pro 1D a 2D verzi modelu. Ve 3D tyto vizualizace nejsou přínosné, neboť by takovéto vizualizace nebyly přehledné. Proto budou ve třírozměrné verzi simulační výsledky zobrazovány za pomoci tzv. totální variace systému. Druhým cílem simulační části bude hledání tzv. kritické teploty systému. Kritická teplota značí fázový přechod v látce. Pro hodnoty pod kritickou a nad kritickou teplotou se systém chová zcela odlišně. Pro teploty nižší se systém dostává do stavu, kdy magnetické spiny všech částic se synchronizují na stejnou hodnotu. Naopak pro vyšší teploty systém setrvává v „náhodné“ konfiguraci. Takovouto teplotu se tedy budeme snažit nalézt pro všechny modely, tedy 1D, 2D i 3D.

Posledním cílem třetí části této diplomové práce je vyzkoušení simulací Isingova modelu na jiných, než čtvercových grafech. Pro tyto účely byly vybrány mřížky hexagonální a triangulární, vždy pro dvourozměrný model. Hexagonální mřížka se vyznačuje tím, že každá částice má právě tři vazby s ostatními částicemi. Triangulární má pak právě 6 vazeb. Pro takovéto mřížky se tedy opět budeme snažit nalézt kritickou teplotu.

Celkový cíl této práce je tedy shrnout teoretické řešení Isingova modelu v závislosti na dimenzi, ve které je řešen, a podložit toto řešení numerickými simulacemi využívající metody Markov Chain Monte Carlo.

Kapitola 1

Teorie

1.1 Fyzikální pohled

Vysvětleme si nejprve pohled na náš problém z hlediska fyziky. Vše z této kapitoly lze nalézt v [17, 18].

Feromagnetismus je jedním ze základních principů fyziky. Rozumíme jím takový proces, kdy dochází v určitých materiálech (kovech) ke změně magnetických vlastností. Z látky se tak vlivem vnějšího magnetického pole vytvoří magnet. Tato magnetizace může být buďto trvalá, nebo dočasná. K látkám podléhajícím feromagnetizaci patří například železo, nikl, kobalt a většina jejich slitin.

Obecně mechanická statistika nahlíží na celý systém, u kterého sledujeme vnější makroskopické vlastnosti (např. teplota, hustota, magnetizace atd.), jako na systém mnoha individuálních součástí (nejčastěji molekuly, atomy). Cílem je na základě znalostí vnitřních sil, stavů nebo dějů (síla mezi jednotlivými částicemi) vyvodit závěry o systému jako celku. Uved' me jednoduchý příklad. Na základě znalostí mikrostavů systému ve vodě (síla mezi molekulami) bychom chtěli vyvodit závislost hustoty. Víme, že když teplota vzroste z 99° na 100° C, hustota systému o několik řádů klesne. To je způsobeno přechodem kapalné vody na páru. Takovémuto přechodu říkáme *fázový přechod*. Podobný fázový přechod můžeme sledovat i u magnetizace látek. Každý přechod nastává při určité teplotě (nebo také od/do určité teploty) – tuto významnou teplotu budeme nazývat *kritická teplota*.

Pro popis fyzikálního systému, u kterého se budeme zabývat magnetizací M , uvažujeme následující veličiny a konstanty:

- T – termodynamická teplota,
- k_B – Boltzmanova konstanta; $k_B = 1.380649 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$,
- $\beta = \frac{1}{k_B T}$ – inverzní teplota,
- H – magnetické pole.

Stěžejním pojmem této práce je *magnetizace* M . Dříve však, než vysvětlíme, co to magnetizace je, budeme muset definovat následující pojmy.

1.1.1 Konfigurace

Prvním z nich je definování konfigurace σ . Konfigurací rozumíme uspořádání částic (např. atomů, molekul), u kterých nás zajímá hodnota jejich spinů, které mohou nabývat dvou různých hodnot (± 1).

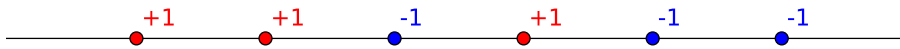
Definice 1.1. Necht' máme N -částicový systém na přímce (v jedné dimenzi). Pak konfigurací tohoto systému rozumíme vektor σ , kde

$$\sigma \in \{-1, +1\}^N,$$

neboli

$$\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N), \quad \sigma_i \in \{-1, +1\} \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, N\}.$$

V jedné dimenzi, tedy pro částice na přímce, lze konfiguraci reprezentovat vektorem, který obsahuje pouze hodnoty ± 1 . Uved' me příklad konfigurace $\sigma_1 = (+1, +1, -1, +1, -1, -1)$ pro $N = 6$. Tuto konfiguraci lze nalézt na obrázku 1.1, přičemž částice se spinem $+1$ budeme pro přehlednost označovat červenou barvou a naopak částice se spinem -1 modrou barvou.

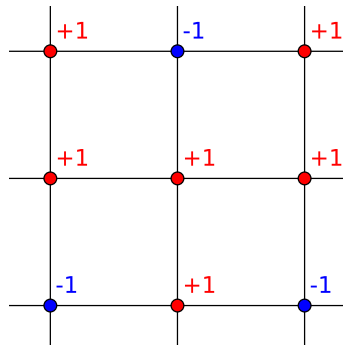


Obrázek 1.1: Příklad konfigurace σ_1 .

Ve dvou dimenzích (částice na mřížce) lze konfiguraci reprezentovat maticí. Příklad konfigurace pro systém velikosti 3×3 částice ($N = 9$) je

$$\sigma_2 = \begin{pmatrix} +1 & -1 & +1 \\ +1 & +1 & +1 \\ -1 & +1 & -1 \end{pmatrix}$$

a tuto konfiguraci lze nalézt na obrázku 1.2, kde využíváme stejnou grafickou reprezentaci jako u příkladu v jedné dimenzi.



Obrázek 1.2: Příklad konfigurace σ_2 .

1.1.2 Partiční suma

Dalším pojmem je partiční suma Z .

Definice 1.2. Necht' Σ je množina všech konfigurací $(\sigma_i)_{i=1}^N$ N -částicového systému. Pak partiční sumu Z tohoto systému definujeme jako

$$Z = \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp(-\beta E(\sigma)), \quad (1.1)$$

přičemž $E(\sigma)$ je energie konkrétní konfigurace σ .

Jak se energie $E(\sigma)$ vypočítá, bude zmíněno v další části 1.2. Pomocí partiční sumy můžeme následně vyjádřit pravděpodobnost systému, že se bude nacházet ve stavu s konfigurací σ , a to jako

$$P(\sigma) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E(\sigma)). \quad (1.2)$$

Partiční suma tedy jinými slovy plní roli normalizační konstanty rozdělení pravděpodobnosti. Někdy budeme také partiční sumu značit Z_N , čímž dáváme najevo, že v systému, který zkoumáme, uvažujeme N částic.

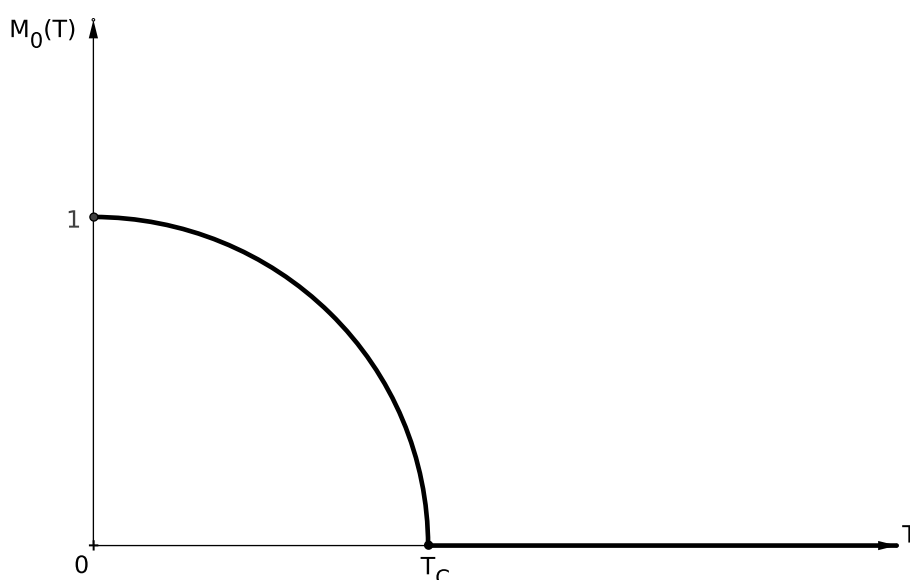
1.1.3 Magnetizace a ostatní fyzikální veličiny

Velmi důležitým pojmem potřebným pro tuto práci je fyzikální veličina *magnetizace* M , kterou lze definovat jako

$$M = \frac{dm}{dV},$$

kde dm je element magnetického momentu a dV je objemový element. Magnetizace tak charakterizuje stav (hustotu) magnetických dipólových momentů v objemovém elementu magnetické látky. Můžeme také říct, že charakterizuje, jestli a jak silný se z látky stal magnet. Tento stav může být vyvolán dvěma způsoby.

Obecně je magnetizace M funkcí H a T , kde H je vnější magnetické pole a T je termodynamická teplota. Ve většině případů dochází k magnetizaci vlivem vnějšího magnetického pole H . Některé látky však mohou podléhat tzv. *spontánní magnetizaci* (značíme M_0) – i při nulové hodnotě magnetického pole H dojde k magnetizaci. Zkoumaná spontánní magnetizace $M_0 = M_0(T)$ je závislá již pouze na teplotě ($H = 0$). Zkoumáním této spontánní magnetizace bylo zjištěno, že k tomuto fyzikálnímu jevu dochází pouze do určité teploty – kritické teploty T_C . Graf přibližné závislosti M_0 na T je možné vidět na následujícím obrázku 1.3.



Obrázek 1.3: Přibližná závislost spontánní magnetizace M_0 na T .

Dále také zmíníme volnou energii F a vnitřní energii U , která je střední hodnotou energie konfigurací σ .

$$F = -k_B T \ln Z = -\frac{1}{\beta} \ln Z,$$

$$U = \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma \in \Sigma} E(\sigma) \exp(-\beta E(\sigma)),$$

$$U = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \ln Z = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right).$$

Potřebná bude také volná energie na částici, kterou značíme f a počítáme dle vztahu

$$f(H, T) = \lim_{N \rightarrow +\infty} f_N(H, T) = -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\ln Z_N(H, T)}{N}. \quad (1.3)$$

Právě volnou energii na částici potřebujeme pro vyjádření předpisu pro magnetizaci M :

$$M(H, T) = -\frac{\partial}{\partial H} f(H, T). \quad (1.4)$$

Předchozí vztah (1.4) vychází z úvahy, že magnetizace je „průměrný“ magnetický moment na částici a následně je použito několik dalších postupů pro odvození. Nicméně všechny výše zmíněné vztahy pochází z fyziky, proto je zde uvádíme bez bližšího odvození. Pro zájemce je tato problematika blíže objasněna například v [8].

1.2 Obecný Isingův model

V obecném Isingově modelu uvažujeme energii konfigurace σ jako

$$E(\sigma) = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu \sum_j h_j \sigma_j. \quad (1.5)$$

V tomto vztahu vystupují nové veličiny a také značení, které popisují

- J_{ij} je interakce mezi částicemi i a j ,
- μ je magnetický moment,
- h_j je externí magnetické pole, které působí na j -tou částici,
- $\langle ij \rangle$ značí dvě sousední částice i a j ; sumací přes toto značení myslíme sumu přes všechny kombinace sousedů.

Interakce J_{ij} může být buďto záporná, nulová, nebo kladná. Podle znaménka rozlišujeme interakci částic i a j jako

- $J_{ij} > 0$ - feromagnetická interakce,
- $J_{ij} < 0$ - antiferomagnetická interakce,
- $J_{ij} = 0$ - částice jsou neinteragující.

Isingův model obecně uvažuje ty látky, které mají J_{ij} kladnou. Proto lze hovořit o Isingově modelu feromagnetizace látek. Dále se již zaměříme na analytické řešení Isingova modelu v jedné a ve dvou dimenzích. V jedné dimenzi myslíme řešením Isingova modelu nalezení předpisu pro magnetizaci, v případě dvourozměrné verze (díky dodatečným předpokladům, zejména absenci vnějšího magnetického pole) nás bude zajímat nalezení předpisu pro volnou energii f .

1.3 Isingův model v 1D

V této části se zaměříme na řešení Isingova modelu v jedné dimenzi (prezentovaný v [8, 9]). Řešením budeme rozumět vypočítání magnetizace M . Nalezení kritické teploty T_C není možné, jelikož neexistuje pro teploty větší než 0 K. Této teploty není ovšem možné dosáhnout.

Pro analytické řešení však musíme předpokládat dvě následující omezení. Zaprvé budeme uvažovat systém N částic, které jsou na kruhu. Dostaneme tedy periodické okrajové podmínky ($\sigma_{N+1} := \sigma_1$) a tím pádem budeme mít informace i o částicích s indexy 1 a N . Konfigurace σ tohoto systému bude N -složkový vektor, jak již bylo zmíněno v části 1.1.1.

Druhým omezením bude krátkodosahovost systému. Každá částice bude interagovat pouze se svými sousedy na každé straně.

Posledními předpoklady jsou stejné hodnoty J_{ij} a h_j pro všechny i a j oproti rovnici (1.5) z části 1.2.

S těmito omezeními pak můžeme napsat energii konkrétní konfigurace σ následujícím způsobem

$$E(\sigma) = -J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} - H \sum_{j=1}^N \sigma_j, \quad (1.6)$$

kde $H = \mu h$.

Pro vyřešení Isingova modelu v 1D (po zavedení všech dodatečných předpokladů a omezení) je důležité vypočítat partiční sumu Z , abychom mohli následně vyjádřit volnou energii F , případně f , a z té poté odvodit předpis pro magnetizaci M . Od této chvíle budeme také partiční sumu značit symbolem Z_N namísto Z , abychom zdůraznili velikost systému, který je tvořen N částicemi.

Dosadíme tedy vztah (1.6) do obecného vztahu (1.1)

$$Z_N = \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp \left(-\beta \left[-J \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} - H \sum_{j=1}^N \sigma_j \right] \right). \quad (1.7)$$

Pro zjednodušení označme $k = \beta J$ a $h = \beta H$. Můžeme tedy pokračovat v upravování výrazu (1.7)

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp \left(k \sum_{j=1}^N \sigma_j \sigma_{j+1} + h \sum_{j=1}^N \sigma_j \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp \left(k(\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_3 + \dots) + \left(\frac{h}{2} \sigma_1 + \frac{h}{2} \sigma_1 + \frac{h}{2} \sigma_2 + \frac{h}{2} \sigma_2 + \dots \right) \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp \left(k \sigma_1 \sigma_2 + \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) \right) \cdots \exp \left(k \sigma_N \sigma_1 + \frac{h}{2} (\sigma_N + \sigma_1) \right) \\ &= \sum_{\sigma \in \Sigma} \prod_{j=1}^N \exp \left(k \sigma_j \sigma_{j+1} + \frac{h}{2} (\sigma_j + \sigma_{j+1}) \right). \end{aligned}$$

Zavedeme další označení. Funkci ϕ definujeme pro dvě částice i a j z libovolné konfigurace σ jako

$$\phi(\sigma_i, \sigma_j) = \exp \left(k \sigma_i \sigma_j + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_j) \right). \quad (1.8)$$

Díky této funkci ϕ přepíšeme vztah pro partiční sumu následovně

$$Z_N = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \phi(\sigma_1, \sigma_2) \cdot \phi(\sigma_2, \sigma_3) \cdots \phi(\sigma_N, \sigma_1). \quad (1.9)$$

Ve vztahu (1.9) se sčítá přes všechny hodnoty $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N = \pm 1$. Když tedy definujeme pomocnou matici \mathbb{M} jako

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} \phi(+1, +1) & \phi(+1, -1) \\ \phi(-1, +1) & \phi(-1, -1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{k+h} & e^{-k} \\ e^{-k} & e^{k-h} \end{pmatrix},$$

budeme moci vztah (1.9) přepsat do následujícího tvaru

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \phi(\sigma_1, \sigma_2) \cdot \phi(\sigma_2, \sigma_3) \cdots \phi(\sigma_N, \sigma_1) \\ &= \sum_{i_1=1}^2 \sum_{i_2=1}^2 \cdots \sum_{i_N=1}^2 (\mathbb{M})_{i_1 i_2} (\mathbb{M})_{i_2 i_3} \cdots (\mathbb{M})_{i_N i_1} \\ &= \sum_{i_1=1}^2 \sum_{i_3=1}^2 \cdots \sum_{i_N=1}^2 \left(\sum_{i_2=1}^2 (\mathbb{M})_{i_1 i_2} (\mathbb{M})_{i_2 i_3} \right) (\mathbb{M})_{i_3 i_4} \cdots (\mathbb{M})_{i_N i_1} \\ &= \sum_{i_1=1}^2 \sum_{i_3=1}^2 \cdots \sum_{i_N=1}^2 (\mathbb{M}^2)_{i_1 i_3} (\mathbb{M})_{i_3 i_4} \cdots (\mathbb{M})_{i_N i_1}. \end{aligned} \tag{1.10}$$

Postupným využíváním definice maticového násobení tedy dospějeme k výsledku, že

$$Z_N = \sum_{i_1=1}^2 (\mathbb{M}^N)_{i_1 i_1}, \tag{1.11}$$

nebo-li

$$Z_N = \text{Tr}(\mathbb{M}^N). \tag{1.12}$$

Nyní si všimneme, že je matice \mathbb{M} symetrická. Z teorie lineární algebry víme, že tudíž existuje matice \mathbb{R} regulární a matice \mathbb{D} diagonální taková, že

$$\mathbb{M} = \mathbb{R} \mathbb{D} \mathbb{R}^{-1}. \tag{1.13}$$

Prvky diagonální matice \mathbb{D} si označíme

$$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}.$$

Nyní si rozepíšeme matici \mathbb{M}^N , kdy za jednotlivé matice \mathbb{M} dosadíme z rozkladu (1.13) a upravíme

$$\mathbb{M}^N = \mathbb{R} \mathbb{D} \mathbb{R}^{-1} \cdot \mathbb{R} \mathbb{D} \mathbb{R}^{-1} \cdots \mathbb{R} \mathbb{D} \mathbb{R}^{-1} = \mathbb{R} \mathbb{D}^N \mathbb{R}^{-1}.$$

Jelikož je matice \mathbb{D} diagonální, matice \mathbb{D}^N se vypočítá velmi jednoduše, a to následovně

$$\mathbb{D}^N = \begin{pmatrix} \lambda_1^N & 0 \\ 0 & \lambda_2^N \end{pmatrix}.$$

Pro další účely si připomeneme jednoduché lemma.

Lemma 1.3. *Necht' $\mathbb{A}, \mathbb{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Pak*

$$\text{Tr}(\mathbb{A}\mathbb{B}) = \text{Tr}(\mathbb{B}\mathbb{A}).$$

Za využití značení z tohoto lemmatu 1.3, kdy označíme

- $\mathbb{A} = \mathbb{R}$,
- $\mathbb{B} = \mathbb{D}^N \mathbb{R}^{-1}$,

můžeme psát

$$Z_N = \text{Tr}(\mathbb{M}^N) = \text{Tr}(\mathbb{R} \mathbb{D}^N \mathbb{R}^{-1}) = \text{Tr}(\mathbb{D}^N \mathbb{R}^{-1} \mathbb{R}) = \text{Tr}(\mathbb{D}^N).$$

Partiční suma Z_N se tedy rovná stopě diagonální matice \mathbb{D}^N , proto

$$Z_N = \lambda_1^N + \lambda_2^N.$$

Zároveň také víme, že λ_1 a λ_2 jsou vlastní čísla matice \mathbb{M} (vlastnost rozkladu z lineární algebry). Pro výpočet těchto vlastních čísel využijeme charakteristický polynom matice \mathbb{M} . Ten je řešením rovnice

$$\det(\mathbb{M} - \lambda \mathbb{1}) = 0.$$

Dosadíme za matici \mathbb{M}

$$\begin{vmatrix} e^{k+h} - \lambda & e^{-k} \\ e^{-k} & e^{k-h} - \lambda \end{vmatrix} = (e^{k+h} - \lambda) \cdot (e^{k-h} - \lambda) - e^{-2k} = e^{2k} + \lambda^2 - \lambda e^{k+h} - \lambda e^{k-h} - e^{-2k} \stackrel{!}{=} 0.$$

Dostáváme tedy kvadratickou rovnici pro proměnnou λ

$$\lambda^2 - (e^{k+h} + e^{k-h}) \cdot \lambda + e^{2k} - e^{-2k} \stackrel{!}{=} 0.$$

Řešení této kvadratické rovnice je následujícího tvaru

$$\lambda_{1,2} = \frac{e^{2k} - e^{-2k} \pm \sqrt{e^{2k+2h} - 2e^{2k} + 4e^{-2k} + e^{2k-2h}}}{2}.$$

Toto řešení si následně upravíme do co nejjednoduššího tvaru. K tomu využijeme přepis do hyperbolických funkcí

$$\lambda_{1,2} = e^k \cosh(h) \pm \left(e^{2k} \cdot \frac{1}{2} (\cosh(2h) - 1) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Za využití rovnosti

$$\frac{1}{2} (\cosh(2h) - 1) = \sinh^2(h)$$

tak dostáváme

$$\lambda_{1,2} = e^k \cosh(h) \pm \left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (1.14)$$

Při znalosti vlastních čísel λ_1 a λ_2 můžeme dosadit do předpisu pro volnou energii na částici (1.3)

$$\begin{aligned} f_N(H, T) &= -k_B T \frac{\ln Z_N}{N} = -k_B T \frac{1}{N} \ln(\lambda_1^N + \lambda_2^N) \\ &= -k_B T \frac{1}{N} \left(N \ln \lambda_1 + \ln \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) \right). \end{aligned}$$

Jelikož $\lambda_1 > \lambda_2$, můžeme upravit následující výraz takto

$$f(H, T) = \lim_{N \rightarrow +\infty} f_N(H, T) = -k_B T \ln \lambda_1 - \lim_{N \rightarrow +\infty} k_B T \frac{1}{N} \ln \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) = -k_B T \ln \lambda_1, \quad (1.15)$$

neboť limita

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} k_B T \frac{1}{N} \ln \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) = 0,$$

jelikož $\lambda_2 < \lambda_1$, tedy $\frac{\lambda_2}{\lambda_1} < 1$ a tudíž

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \ln \left(1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right) = 0.$$

Volnou energii avšak pro jednoduchost ponecháme v proměnné h místo H .

$$f(h, T) = -k_B T \ln \left(e^k \cosh(h) + \left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}} \right). \quad (1.16)$$

V první části jsme uvedli vztah (1.4), díky kterému nyní můžeme vypočítat magnetizaci M následovně

$$\begin{aligned} M(H, T) &= -\frac{\partial}{\partial H} f(H, T) = -\beta \frac{\partial}{\partial h} f(h, T) \\ &= -\frac{1}{k_B T} \frac{\partial}{\partial h} \left(-k_B T \ln \left(e^k \cosh(h) + \left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}} \right) \right) \\ &= \frac{1}{e^k \cosh(h) + \left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}}} \cdot \left(e^k \sinh(h) + \left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{-\frac{1}{2}} e^{2k} \sinh(h) \cosh(h) \right) \\ &= \frac{1}{e^k \cosh(h) + \left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}}} \cdot e^k \sinh(h) \cdot \frac{\left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}} + e^k \cosh(h)}{\left(e^{2k} \sinh^2(h) + e^{-2k} \right)^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned}$$

Po zpětném dosazení za k a h dostaneme finální výraz

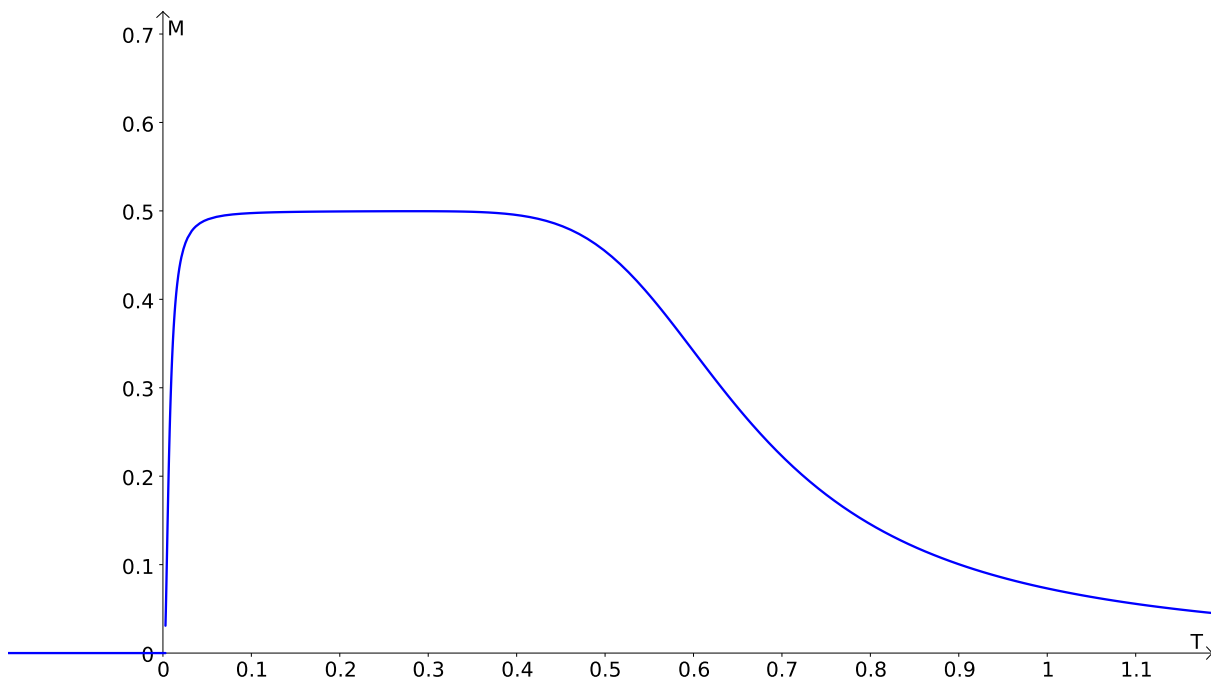
$$M(H, T) = \frac{e^{J\beta} \sinh(H\beta)}{\left(e^{2J\beta} \sinh^2(H\beta) + e^{-2J\beta} \right)^{\frac{1}{2}}}, \quad (1.17)$$

přičemž závislost na T je skryta v proměnné β .

Pro okomentování výsledku si však vztah (1.17) přepíšeme do proměnné T

$$M(H, T) = \frac{e^{\frac{J}{k_B T}} \sinh\left(\frac{H}{k_B T}\right)}{\left(e^{\frac{2J}{k_B T}} \sinh^2\left(\frac{2H}{k_B T}\right) + e^{\frac{-2J}{k_B T}} \right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (1.18)$$

Pokud uvažujeme $T > 0$ (teplota $T = 0$ nelze dle současných vědeckých poznatků dosáhnout), funkce $M(H, T)$ je pro takovéto T a libovolné reálné H spojitou funkcí na tomto svém definičním oboru. Nelze tedy najít žádnou kladnou hodnotu T , při které by v M nastávala singularita (skok), která by značila přítomnost fázového přechodu. To tedy potvrzuje fakt, že v jedné dimenzi nemá Isingův model žádnou (dosažitelnou) kritickou teplotu. Pro názornost lze na obrázku 1.4 vidět průběh magnetizace M dané předpisem (1.18).



Obrázek 1.4: Průběh magnetizace M v závislosti na T pro hodnoty $k_B = 1$, $J = 1$ a $H = 0.01$.

1.4 Isingův model ve 2D

V této části se budeme zabývat řešením Isingova dvourozměrného modelu. Konkrétně se budeme zabývat kombinatorickou metodou řešení prezentovanou například v [11, 12, 13, 14], která je méně známá.

Pro jednoduchost budeme uvažovat mřížku velikosti $n \times n$. Celkem máme tedy $n^2 = N$ částic. Každá částice může mít hodnotu spinu ± 1 ($\sigma_{i,j} = \pm 1$). Všech konkrétních konfigurací $\sigma = (\sigma_{i,j})_{i,j=1}^n$ je tedy celkem $|\Sigma| = 2^N$.

Dalším předpokladem pro řešení Isingova modelu ve 2D je absence vnějšího magnetického pole ($H = 0$) a zároveň toroidální podmínka na periodičnost (periodičnost v obou směrech). Dalším zjednodušením je opět podmínka $J_{ij} = J$ pro každé i a j . To vše nám implikuje tvar energie konfigurace σ . Ta přechází na rozdíl od (1.5) na jednodušší tvar

$$E(\sigma) = - \sum_{\langle ij \rangle} J \sigma_i \sigma_j, \quad (1.19)$$

přičemž součet je přes všechny sousedící částice – sčítanců je tedy celkem $2N$. Zavedme ještě pro jednoduchost množinu \mathcal{M} , kterou označíme množinu všech sousedních indexů, tj.

$$\mathcal{M} := \{(i, j) : \langle ij \rangle\}.$$

V našem případě, kdy uvažujeme N částic spolu s toroidální periodickou podmínkou, platí, že $|\mathcal{M}| = 2N$.

1.4.1 Základní úprava partiční sumy

Stejně jako v sekci 1.3, pro analytické vyřešení modelu ve 2D potřebujeme vypočítat partiční sumu Z_N . Za využití předpisu (1.19) dosadíme do obecného předpisu (1.1) a začneme výraz upravovat

$$Z_N = \sum_{\boldsymbol{\sigma} \in \Sigma} \exp(-\beta E(\boldsymbol{\sigma})) = \sum_{\boldsymbol{\sigma} \in \Sigma} \exp\left(\beta \sum_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} J \sigma_i \sigma_j\right) = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp\left(k \sum_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} \sigma_i \sigma_j\right).$$

Symbolem k , stejně jako v části 1.3, označujeme $k = \beta J$. Dále využijeme vlastnost exponenciely

$$Z_N = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} \exp(k \sigma_i \sigma_j). \quad (1.20)$$

Exponenciely ve výrazu (1.20) chceme nahradit hyperbolickými funkcemi. K tomu využijeme jednoduchého vztahu, který vychází z definice funkcí sinh a cosh

$$e^x = \cosh(x) + \sinh(x).$$

Současně ve vztahu (1.20) vystupuje součin $\sigma_i \sigma_j$. Jelikož σ_i nabývá pouze hodnot ± 1 , rovněž součin $\sigma_i \sigma_j$ nabývá hodnot ± 1 . Zároveň víme, že cosh je funkce sudá a sinh funkce lichá, čili platí

$$\cosh(-x) = \cosh(x),$$

$$\sinh(-x) = -\sinh(x).$$

Se všemi zmíněnými poznatky můžeme přepsat součin exponenciely z výrazu (1.20) následovně:

$$\prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} \exp(k \sigma_i \sigma_j) = \prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} (\cosh(k \sigma_i \sigma_j) + \sinh(k \sigma_i \sigma_j)) = \prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} (\cosh(k) + \sigma_i \sigma_j \sinh(k)).$$

Tento výraz chceme dále zjednodušit. Budeme tedy dále upravovat

$$\cosh(k) + \sigma_i \sigma_j \sinh(k) = \cosh(k) (1 + \sigma_i \sigma_j \tanh(k)).$$

Po substituci $u = \tanh(k)$ a vyjádření funkce cosh(k) pomocí proměnné u , které vychází pouze z vlastností hyperbolických funkcí, dostáváme

$$\prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} (\cosh(k) + \sigma_i \sigma_j \sinh(k)) = \prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} \frac{1}{\sqrt{1-u^2}} (1 + \sigma_i \sigma_j u) = (1-u^2)^{-\frac{|\mathcal{M}|}{2}} \prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} (1 + \sigma_i \sigma_j u).$$

Jelikož víme, že $|\mathcal{M}| = 2N$, můžeme přepsat vztah (1.20) jako

$$Z_N = (1-u^2)^{-N} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} (1 + \sigma_i \sigma_j u). \quad (1.21)$$

Dále se budeme snažit upravovat tento výraz. Rozepíšeme si produkt vystupující v tomto výrazu.

$$\prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} (1 + \sigma_i \sigma_j u) = (1 + \sigma_{i_1} \sigma_{j_1} u) (1 + \sigma_{i_2} \sigma_{j_2} u) \dots \quad (1.22)$$

Při roznásobování tohoto produktu tedy budeme získávat mocniny u s příslušnými koeficienty. Tento výraz (1.22) lze tedy přepsat do tvaru

$$\prod_{\langle ij \rangle \in \mathcal{M}} (1 + \sigma_i \sigma_j u) = \sum_{m=0}^{2N} u^m \sum_{\{(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_m, j_m)\} \in \mathcal{M}} \prod_{k=1}^m (\sigma_{i_k} \sigma_{j_k}).$$

Po dosažení tohoto výsledku do (1.21) dostáváme

$$Z_N = (1 - u^2)^{-N} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \sum_{m=0}^{2N} u^m \sum_{\{(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_m, j_m)\} \subseteq \mathcal{M}} \prod_{k=1}^m (\sigma_{i_k} \sigma_{j_k}). \quad (1.23)$$

Před dalším pokračováním ve výpočtu si definujeme grafy, které budeme pro další práci potřebovat. Obecně budeme grafem rozumět množinu vrcholů a hran. Každý vrchol bude reprezentovat konkrétní σ_i . Stupněm vrcholu budeme rozumět počet hran, které z daného vrcholu vychází.

V průběhu dalších výpočtů uvidíme, že ze všech obecných grafů, které lze sestavit na množině $(\sigma_{ij})_{i,j=1}^n$, nás budou zajímat pouze určité grafy se specifickými vlastnostmi.

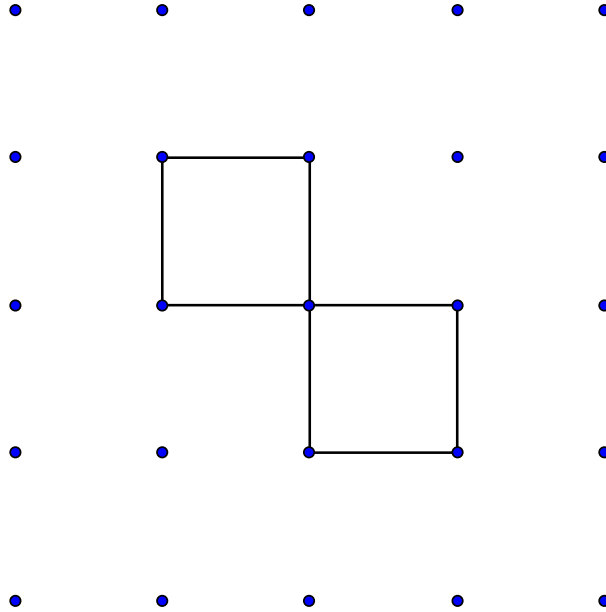
Vraťme se však zpět k výrazu (1.23). Uvědomme si, že sčítací index m nám udává, kolik dvojic sousedních částic bereme do konkrétního grafu v potaz. Neboli m udává počet hran uvažovaného grafu. Jelikož je součet komutativní, můžeme zaměnit ve výrazu (1.23) sumy.

$$Z_N = (1 - u^2)^{-N} \sum_{m=0}^{2N} u^m \sum_{\{(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_m, j_m)\} \subseteq \mathcal{M}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{k=1}^m \sigma_{i_k} \sigma_{j_k}. \quad (1.24)$$

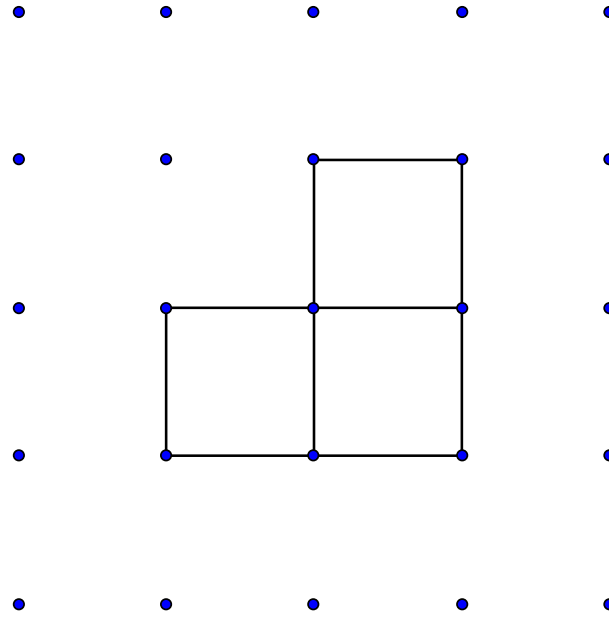
V tomto výrazu tedy vystupuje součin různých σ_k , který sčítáme přes hodnoty ± 1 . Pokud tedy v součinu $\prod_{k=1}^m \sigma_{i_k} \sigma_{j_k}$ bude nějaká σ_k obsažena lichý početkrát (bude obsahovat člen σ_k^{2n+1} , kdy $n \in \mathbb{N}$), výsledný součet $\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N=\pm 1}$ zařídí, že příspěvek od takového členu do hodnoty Z_N bude nulový. Jinými slovy, grafy, které budou obsahovat σ_k lichého stupně, nemusíme uvažovat, jelikož jejich příspěvek je nulový. Pro další práci tedy zavedeme pojem *přípustný graf*.

1.4.2 Přípustné grafy

Označme množinu přípustných grafů jako \mathcal{A} (od slova *admissible graphs*). Tato množina bude obsahovat pouze grafy, jejichž všechny vrcholy jsou sudého stupně. Ukázku přípustného grafu lze nalézt na obrázku 1.5, naopak ukázku nepřípustného grafu na obrázku 1.6.



Obrázek 1.5: Ukázka přípustného grafu; všechny vrcholy mají sudý stupeň.



Obrázek 1.6: Ukázka nepřipustného grafu; graf obsahuje vrcholy lichého stupně.

Když již tedy uvažujeme stupně všech σ_k sudé, pokaždé bude platit, že $\prod_{k=1}^m \sigma_{i_k} \sigma_{j_k} = 1$, a tudíž místo celého výrazu (1.24) budeme moci psát

$$Z_N = (1 - u^2)^{-N} \sum_{m=0}^{2N} u^m \sum_{\{(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_m, j_m)\} \in \mathcal{A}} \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \sum_{\sigma_2 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} 1.$$

Ovšem

$$\sum_{\sigma_1 = \pm 1} \sum_{\sigma_2 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} 1 = 2^N, \quad (1.25)$$

tudíž celý výraz (1.4.2) je roven

$$Z_N = \frac{2^N}{(1 - u^2)^N} \sum_{m=0}^{2N} u^m \sum_{\{(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_m, j_m)\} \in \mathcal{A}} 1.$$

Jelikož pro $m > 0$ výraz

$$\sum_{\{(i_1, j_1), (i_2, j_2), \dots, (i_m, j_m)\} \in \mathcal{A}} 1$$

představuje počet grafů, které mají právě m hran, můžeme rovnici (1.4.2) následně přepsat do tvaru

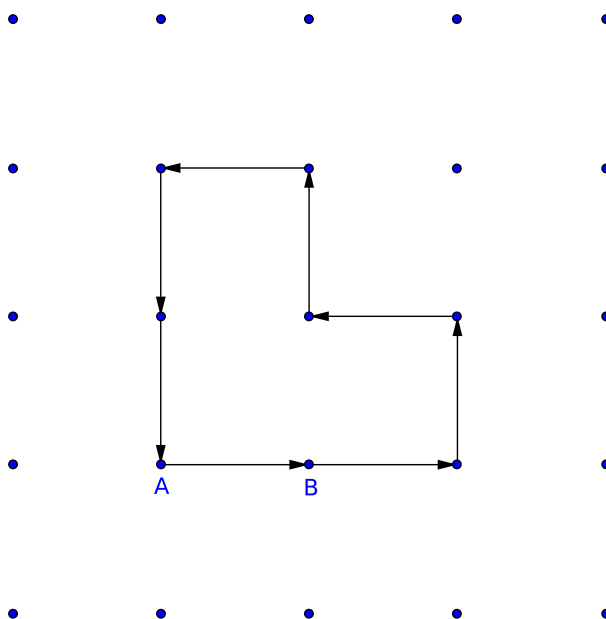
$$Z_N = \frac{2^N}{(1 - u^2)^N} \left(1 + \sum_{G \in \mathcal{A}} u^{m(G)} \right). \quad (1.26)$$

Zde značkou $m(G)$ rozumíme počet hran v přípustném grafu G . Ve výrazu (1.26) vystupuje suma přes přípustné grafy \mathcal{A} . Tuto sumu se nyní budeme snažit přepsat do jiného tvaru, který se nám následně podaří vyjádřit do řešitelné podoby. K tomu definujeme následující.

1.4.3 Součet přes cesty

Každý graf (v našem případě přípustný graf $G \in \mathcal{A}$) obsahuje pouze uzly se sudým stupněm. Z toho vyplývá, že ho můžeme rozložit na uzavřené smyčky. Definujeme nyní cestu jako posloupnost vazeb (žádná vazba se nesmí opakovat více než jednou v každé cestě). Každá další vazba na cestě začíná tam, kde předchozí skončila, přičemž poslední končí tam, kde začala první. Cesty jsou tedy uzavřené.

Takto definované cesty jsou nejednoznačné v tom, že počáteční bod cesty můžeme zvolit libovolně (v cestě délky n to bude právě n možností, jak vybrat počáteční bod) a tyto cesty si jsou ekvivalentní. Dále tedy nebudeme rozlišovat mezi ekvivalentními cestami, budeme s nimi pracovat jako s třídou ekvivalence. Ukázkou konkrétní cesty s různou volbou počátečních bodů A a B lze vidět na obrázku 1.7.



Obrázek 1.7: Ukázka cesty délky $n = 8$ a dvou možných počátečních bodů A a B.

Jelikož se pohybujeme na čtvercové mřížce, celkový počet rotací, které cesta opíše, je celé číslo. Necht' t je tedy počet rotací provedený tečným vektorem cesty (tj. celkový úhel rotace dělený 2π , přičemž dodržujeme konvenci, že kladný směr je proti směru hodinových ručiček). Díky tomuto počtu rotací můžeme dále definovat znaménko s cesty p , které provedla t rotací, jako

$$s(p) = -(-1)^t. \quad (1.27)$$

Znaménko cesty je tedy $+1$, pokud cesta provedla lichý počet rotací, a -1 , pokud provedla sudý počet rotací. Pokud by nějaká cesta p' byla periodická (na obrázku 1.7 bychom z bodu A prošli cestu $2 \times$ po sobě; délka by tedy byla $n = 16$), označíme její periodou w (w je tedy největší číslo takové, že w podcest cesty p' je již neperiodický). Pro periodickou cestu p' s periodou w definujeme znaménko

$$s(p') = -(-1)^{wt}, \quad (1.28)$$

kde t' je počet rotací pro největší neperiodickou podcestu cesty p' . Povšimněme si, že znaménko periodické cesty není součinem znamének jejích neperiodických podcest. To platí pouze pro periodické cesty s lichou periodou.

Dále definujeme váhu (amplitudu) W cesty p jako

$$W(p) = s(p)u^{m(p)}, \quad (1.29)$$

kde $m(p)$ je délka cesty p .

Pro postup výpočtu partiční sumy představený v této části práce je následující krok stěžejní. Budeme chtít ukázat, že platí následující rovnost

$$1 + \sum_{G \in \mathcal{A}} u^{m(G)} = \prod_{[p]} (1 + W(p)). \quad (1.30)$$

Tato rovnost říká, že součet přes všechny grafy je ekvivalentní součinu přes všechny ekvivalentní cesty (symbol $[p]$ představuje označení ekvivalentních cest p). Toto se nyní budeme snažit dokázat.

Produkt na pravé straně rovnice (1.30) bude obsahovat kromě konstantního členu 1 také členy, které budou následujícího tvaru

$$W(p_1)W(p_2) \dots W(p_k) = s_1 u^{m_1} s_2 u^{m_2} \dots s_k u^{m_k}, \quad (1.31)$$

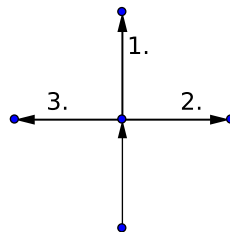
kde používáme značení $s_i \stackrel{\text{ozn.}}{=} s(p_i)$ a $m_i \stackrel{\text{ozn.}}{=} m(p_i)$.

Označme nyní $s \stackrel{\text{ozn.}}{=} s_1 s_2 \dots s_k$. Zároveň $|s| = 1$, čili $|W(p_1)W(p_2) \dots W(p_k)| = u^{\sum_{i=1}^k m_i}$. Tento člen obsahující $u^{\sum_{i=1}^k m_i}$ budeme chtít rozložit podle toho, kolikrát se daná konkrétní vazba v této cestě vyskytuje.

V členu (1.31) se budou objevovat jak vazby, které budou zastoupeny právě jednou (v celém součinu), tak vazby objevující se vícekrát. Tyto dvě situace si rozdělíme. Uvažujme tedy nejdříve případ, kdy se všechny vazby i, j vyskytují ve výrazu (1.31) nejvýše jednou v uvažovaných k cestách. Z toho vyplývá, že buďto jsou cesty p_1, p_2, \dots, p_k disjunktní (nemají žádný společný vrchol), a nebo se cesty navzájem kříží (obsahují společný vrchol l , který je stupně 4).

Mějme tedy graf $G \in \mathcal{A}$. Označme N_4 jako počet vrcholů stupně 4 grafu G . Když bychom procházeli vrcholy grafu G , v každém vrcholu, který má stupeň 4, můžeme buďto (viz obrázek 1.8)

1. pokračovat rovně,
2. odbočit po směru hodinových ručiček (doprava),
3. odbočit proti směru hodinových ručiček (doleva).



Obrázek 1.8: Ukázka možných pokračování v uzlu stupně 4.

Dále také zavedme t_1, t_2 a t_3 jako počet vrcholů, ve kterých využijeme možnosti 1., 2. a 3.

Chceme určit počet kombinací, kterým lze graf G rozložit na cesty (resp. kolik možných cest lze na grafu sestavit). Se zavedeným značením víme, že cest bude celkem 3^{N_4} (v každém uzlu stupně 4

máme 3 možnosti, kam jít). Také platí, že $N_4 = t_1 + t_2 + t_3$. Podívejme se nyní, jak jednotlivé typy křížení budou přispívat ke změně znaménka grafu G .

Křížení typu 1. znamená, že cesta v tomto uzlu provede rotaci o plný úhel, tj. změna znaménka bude krát (-1) . Když tedy máme t_1 uzlů, ve kterých dochází ke křížení typu 1., výsledné znaménko grafu G bude násobeno faktorem $(-1)^{t_1}$. Naopak, pokud dochází ke křížení typu 2. a 3., ke změně znaménka nedochází. Můžeme tedy psát, že výsledné znaménko bude násobeno faktory $(+1)^{t_2}$ a $(+1)^{t_3}$.

Určeme, kolika možnými způsoby lze vybrat trojici (t_1, t_2, t_3) za podmínky $t_1 + t_2 + t_3 = N_4$. Tento počet označme P_4 . Jednoduše lze vypočítat, že výsledek bude

$$P_4 = \binom{N_4}{t_1} \cdot \binom{N_4 - t_1}{t_2} \cdot 1 = \frac{N_4!}{(N_4 - t_1)! t_1!} \cdot \frac{(N_4 - t_1)!}{t_2! (N_4 - t_1 - t_2)!}.$$

Tento výraz je po úpravě roven

$$P_4 = \frac{N_4!}{t_1! t_2! t_3!}. \quad (1.32)$$

Pro všechny kombinace cest a graf G platí, že součet všech vazeb v konkrétní kombinaci je vždy $m(G)$. Každá kombinace tedy obsahuje faktor (± 1) a člen $u^{m(G)}$. Podívejme se nyní, co se stane, když tedy budeme chtít sečíst všechny možné kombinace cest pro konkrétní graf G , který stále uvažujeme s neopakujícími se vazbami a který je uzavřený. Pro tuto sumu dostáváme

$$\sum_{\{p(G)\}} W(p_1) W(p_2) \dots W(p_k) = \sum_{(t_1, t_2, t_3)} \frac{N_4!}{t_1! t_2! t_3!} (-1)^{t_1} (+1)^{t_2} (+1)^{t_3} u^{m(G)}. \quad (1.33)$$

Výraz navíc můžeme dle multinomické věty zjednodušit do tvaru

$$\sum_{(t_1, t_2, t_3)} \frac{N_4!}{t_1! t_2! t_3!} (-1)^{t_1} (+1)^{t_2} (+1)^{t_3} u^{m(G)} = (-1 + 1 + 1)^{N_4} u^{m(G)} = u^{m(G)}. \quad (1.34)$$

Tento výsledek je platný pro uzavřený graf, u kterého se žádná vazba neopakuje více než jednou. Pro graf G' , který je tvořený uzavřenými podgrafy G_1, G_2, \dots, G_n , však není těžké ukázat, že výsledek bude stejný. Každý podgraf G_i totiž dle předchozí argumentace přispívá do partiční sumy hodnotou $u^{m(G_i)}$. Podgrafy G_1, G_2, \dots, G_n tak celkově přispívají

$$\prod_{i=1}^n u^{m(G_i)} = u^{\sum_{i=1}^n m(G_i)} = u^{m(G)}, \quad (1.35)$$

jelikož $\sum_{i=1}^n m(G_i) = m(G)$.

Celkově tedy dostáváme výsledek, že pro každý graf G , ve kterém se vyskytující vazby neopakují, je produkt přes cesty tvořící graf G roven hodnotě $u^{m(G)}$.

Pro grafy s opakujícími se vazbami nemusíme znovu dokazovat, že jejich příspěvek do partiční sumy je nulový, jelikož jsme to již ukázali. Takovéto grafy jsme vyloučili, když jsme zavedli označení *přípustné grafy*.

Závěrem tedy zopakujeme, že jsme dokázali následující stěžejní vztah

$$1 + \sum_{G \in \mathcal{A}} u^{m(G)} = \prod_{[p]} (1 + W(p)).$$

Za pomoci této identity tedy přepíšeme vztah (1.26) do následujícího tvaru

$$Z_N = \frac{2^N}{(1 - u^2)^N} \prod_{[p]} (1 + W(p)). \quad (1.36)$$

Posledním, a to nejdůležitějším krokem, je vyjádřit analyticky partiční sumu. K tomu budeme potřebovat spočítat všechny cesty.

1.4.4 Počítání všech cest

V souladu se zavedeným znaménkem spolu s pozitivním a negativním směrem definujeme každé otočení doprava či doleva jako změnu znaménka o $\pm \frac{1}{4}$. K tomu využijeme vlastností komplexní exponenciely, a proto otočení doprava (proti směru hodinových ručiček) bude znamenat násobení výrazu znaménka faktorem $\bar{\alpha} = e^{-\frac{\pi i}{4}}$, zatímco otočení doleva bude znamenat násobení faktorem $\alpha = e^{\frac{\pi i}{4}}$. Počet provedených rotací je vždy celé číslo, a proto výsledné znaménko bude vždy $e^{\pm n\pi i}$, kdy $n \in \mathbb{N}$. Tento výraz je však díky vlastnostem komplexní exponenciely vždy roven ± 1 . Pokud cesta bude v daném vrcholu pokračovat rovně, nedochází tudíž k rotaci a budeme tedy výraz násobit faktorem 1 (nedochází ke změně).

Amplituda $W(p)$ cesty p se skládá ze znaménka a výrazu u^m , kde m je délka cesty p . Znaménko vyjádříme za pomoci definovaných faktorů α a $\bar{\alpha}$ a celá amplituda cesty p je proto rovna

$$W(p) = \bar{\alpha}^a \alpha^b 1^c \cdot u^{a+b+c}, \quad (1.37)$$

kde a je počet otočení doprava, b počet otočení doleva a c počet pokračování rovně na cestě p . Takto bychom mohli počítat amplitudy pro jednotlivé cesty. My však postup trochu změňme a budeme se snažit vypočítat amplitudy pro soubor cest, které budeme sdružovat do skupin podle jistých vlastností.

Pro další práci také budeme na základě poznatků z kvantové mechaniky či vlnové mechaniky předpokládat, že amplitudy cest podléhají linearitě, tedy že amplituda cesty složené z více podcest je rovna součtu amplitud jednotlivých podcest.

Označme nyní symboly $U_n(x, y)$, $D_n(x, y)$, $L_n(x, y)$, $R_n(x, y)$ amplitudu pro součet všech cest, které v n krocích dojdou na pozici (x, y) ve směru nahoru (U), dolů (D), doleva (L) nebo doprava (R). Symbolem $U_{10}(35, 24)$ tedy myslíme amplitudu všech cest, které po 10-ti krocích skončí na pozici $(35, 24)$ s tou podmínkou, že do pozice $(35, 24)$ dojdou zespodu (směr nahoru), tedy předposlední pozice cest je $(34, 24)$. Důležité je také zmínit, že uvažujeme běžně užívaný směr os, tedy osa x probíhá od nuly doprava a osa y od nuly nahoru.

Výrazy $U_n(x, y)$, $D_n(x, y)$, $L_n(x, y)$, $R_n(x, y)$ lze díky jejich vlastnostem počítat rekurzivně. To si detailněji vysvětlíme pro amplitudu $U_n(x, y)$. Když tedy známe příslušné amplitudy pro krok $(n-1)$ a všechny směry, do stavu (x, y) se můžeme směrem nahoru dostat pouze z pozice $(x, y-1)$. Současně, pokud jsme do stavu $(x, y-1)$ přišli zleva ($L_{n-1}(x, y-1)$), násobíme tuto hodnotu faktorem α , jelikož do stavu (x, y) musíme provést odbočku doleva. Obdobně takto postupujeme pro $R_{n-1}(x, y-1)$ a $U_{n-1}(x-1)$. Amplituda $D_{n-1}(x-1)$ ve výrazu pro $U_n(x, y)$ vystupovat nebude, protože v jednom kroce se nelze vrátit zpět do výchozí pozice. Celý tento součet tří amplitud v kroce $(n-1)$ násobený příslušnými faktory $1, \alpha, \bar{\alpha}$ násobíme hodnotou u , jelikož přibyl jeden krok (cesta se prodloužila o jednu vazbu). Celkem se tedy $U_n(x, y)$ vypočítá jako

$$U_n(x, y) = u \cdot (U_{n-1}(x, y-1) + \alpha L_{n-1}(x, y-1) + \bar{\alpha} R_{n-1}(x, y-1)). \quad (1.38)$$

Podle stejných pravidel napíšeme nyní předpisy pro ostatní amplitudy $D_n(x, y)$, $L_n(x, y)$, $R_n(x, y)$

$$D_n(x, y) = u \cdot (D_{n-1}(x, y+1) + \alpha R_{n-1}(x, y+1) + \bar{\alpha} L_{n-1}(x, y+1)),$$

$$L_n(x, y) = u \cdot (L_{n-1}(x-1, y) + \alpha D_{n-1}(x-1, y) + \bar{\alpha} U_{n-1}(x-1, y)),$$

$$R_n(x, y) = u \cdot (R_{n-1}(x+1, y) + \alpha U_{n-1}(x+1, y) + \bar{\alpha} D_{n-1}(x+1, y)).$$

Uvažujeme také, že pokud je nějaká pozice (x, y) dosažitelná pouze v $m > n$ krocích, pak $U_n(x, y) = D_n(x, y) = L_n(x, y) = R_n(x, y) = 0$, neboť nemůžeme v n krocích dojít do bodu, který je od výchozího vzdálen alespoň o $n+1$ hran.

Problémem v těchto výrazech je to, že rekurze nezávisí pouze na stavech $(n-1)$, ale také vystupují hodnoty amplitud pro různé pozice $(U_n(x, y))$ závisí také na $U_{n-1}(x, y-1)$. Tento problém nám však pomůže vyřešit velmi silný nástroj matematiky, a to Fourierova transformace (zde Fourierova transformace s diskretním časem). Od $U_n(x, y)$ tedy přejdeme k $\hat{U}_n(\xi, \eta)$

$$\hat{U}_n(\xi, \eta) = \sum_{x=-\infty}^{+\infty} \sum_{y=-\infty}^{+\infty} U_n(x, y) e^{-i\xi x - i\eta y}. \quad (1.39)$$

Obdobně bychom vypočítali $\hat{D}_n(\xi, \eta)$, $\hat{L}_n(\xi, \eta)$, $\hat{R}_n(\xi, \eta)$. Důvod, proč používáme Fourierovu transformaci je ten, že jednou z jejích vlastností je fakt, že lineární posunutí v argumentu převádí na fázový posun. To tedy vyřeší náš problém v závislosti (x, y) na různých pozicích $(x, y-1)$ atd.

Uveďme také, jak se vypočítá v našem případě inverzní Fourierova transformace, jelikož ji budeme později potřebovat

$$U_n(x, y) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \hat{U}_n(\xi, \eta) e^{i\xi x + i\eta y} d\xi d\eta. \quad (1.40)$$

Fourierovu transformaci aplikujeme na vztah (1.38). Dostáváme tak

$$\begin{aligned} \hat{U}_n(\xi, \eta) &= \sum_{x=-\infty}^{+\infty} \sum_{y=-\infty}^{+\infty} e^{-i\xi x - i\eta y} [u \cdot (U_{n-1}(x, y-1) + \alpha L_{n-1}(x, y-1) + \bar{\alpha} R_{n-1}(x, y-1))] \\ &= \sum_{x=-\infty}^{+\infty} \sum_{y=-\infty}^{+\infty} e^{-i\xi x - i\eta(y+1)} [u \cdot (U_{n-1}(x, y) + \alpha L_{n-1}(x, y) + \bar{\alpha} R_{n-1}(x, y))] \\ &= u \cdot e^{-i\eta} [\hat{U}_{n-1}(\xi, \eta) + \alpha \hat{L}_{n-1}(\xi, \eta) + \bar{\alpha} \hat{R}_{n-1}(\xi, \eta)]. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Tento výpočet provedeme také pro $\hat{D}_n(\xi, \eta)$, $\hat{L}_n(\xi, \eta)$, $\hat{R}_n(\xi, \eta)$. Pokud označíme $s = e^{-i\xi}$ a $t = e^{-i\eta}$, dostáváme následující čtyři rovnice (pro přehlednost neuvádíme argumenty (ξ, η))

$$\hat{U}_n = u(t \cdot \hat{U}_{n-1} + t\alpha \cdot \hat{L}_{n-1} + t\bar{\alpha} \cdot \hat{R}_{n-1}),$$

$$\hat{D}_n = u(\bar{t} \cdot \hat{D}_{n-1} + \bar{t}\alpha \cdot \hat{R}_{n-1} + \bar{t}\bar{\alpha} \cdot \hat{L}_{n-1}),$$

$$\hat{L}_n = u(s \cdot \hat{L}_{n-1} + s\alpha \cdot \hat{D}_{n-1} + s\bar{\alpha} \cdot \hat{U}_{n-1}),$$

$$\hat{R}_n = u(\bar{s} \cdot \hat{R}_{n-1} + \bar{s}\alpha \cdot \hat{U}_{n-1} + \bar{s}\bar{\alpha} \cdot \hat{D}_{n-1}).$$

Tuto soustavu čtyř rovnic můžeme se zavedením vektoru

$$\psi_n = \begin{pmatrix} \hat{U}_n \\ \hat{D}_n \\ \hat{L}_n \\ \hat{R}_n \end{pmatrix} \quad (1.42)$$

a maticí

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} t & 0 & t\alpha & t\bar{\alpha} \\ 0 & \bar{t} & \bar{t}\alpha & \bar{t}\bar{\alpha} \\ s\bar{\alpha} & s\alpha & s & 0 \\ \bar{s}\alpha & \bar{s}\bar{\alpha} & 0 & \bar{s} \end{pmatrix} \quad (1.43)$$

přepsat jako rekurzivní vztah

$$\psi_n = u\mathbb{M}\psi_{n-1}. \quad (1.44)$$

Dokonce můžeme provést iteraci n -krát, přičemž výsledkem bude

$$\psi_n = u^n \mathbb{M}^n \psi_0. \quad (1.45)$$

V tomto výrazu je ψ_0 amplituda smyčky „délky“ nula, kterou bychom došli do počátku cesty před tím, než bychom udělali první krok. Jenže obecně tento směr znát nemůžeme. Ovšem v našem případě uvažujeme, že uzavřené smyčky (cesty), čili směr, ve kterém vycházíme, je totožný se směrem, v jakém do počátečního bodu dojdeme (pro uzavřenou smyčku je počáteční a koncový bod totožný). Pro uzavřené smyčky (cesty) tedy platí $\psi_0 = \psi_n$. Proto amplituda $U_n(x, y)$ bude mít „nultý“ krok vždy nahoru. Obdobně všechny ostatní směry. Označme ε_i , kdy $i \in \{1, 2, 3, 4\}$, jako jednotkové vektory ve směrech nahoru, dolů, doprava a doleva. Když tedy chceme například vypočítat amplitudu $\hat{U}_n(x, y)$, ψ_0 pro tuto amplitudu bude ε_1 . Celkem tedy $\hat{U}_n(x, y)$ bude rovna

$$\hat{U}_n(x, y) = (u^n \mathbb{M}^n \varepsilon_1)_1, \quad (1.46)$$

což lze díky vlastnostem jednotkových směrových vektorů přepsat do tvaru

$$\hat{U}_n(x, y) = \varepsilon_1^T u^n \mathbb{M}^n \varepsilon_1. \quad (1.47)$$

Stejným postupem bychom vyjádřili ostatní amplitudy $\hat{D}_n(x, y)$, $\hat{L}_n(x, y)$ i $\hat{R}_n(x, y)$.

Celková amplituda uzavřených cest začínajících v bodě (x, y) (označíme $A_n(x, y)$) je rovna součtu amplitud ve všech směrech, tj.

$$A_n(x, y) = U_n(x, y) + D_n(x, y) + L_n(x, y) + R_n(x, y).$$

Fourierova transformace je lineární, proto tedy i

$$\hat{A}_n(\xi, \eta) = \hat{U}_n(\xi, \eta) + \hat{D}_n(\xi, \eta) + \hat{L}_n(\xi, \eta) + \hat{R}_n(\xi, \eta). \quad (1.48)$$

Díky zavedení vektorů ε_i můžeme poslední výraz přepsat do tvaru sumy

$$\hat{A}_n(x, y) = \sum_{i=1}^4 \varepsilon_i^T u^n \mathbb{M}^n \varepsilon_i = \sum_{i=1}^4 \varepsilon_i^T (u\mathbb{M})^n \varepsilon_i. \quad (1.49)$$

Tato suma představuje součet diagonálních prvků matice $(u\mathbb{M})^n$, což je z hlediska lineární algebry stopa matice $(u\mathbb{M})^n$, kterou budeme označovat klasicky

$$\text{Tr}(u\mathbb{M})^n.$$

Máme tedy výsledek, že

$$\hat{A}_n(x, y) = \text{Tr}(u\mathbb{M})^n. \quad (1.50)$$

Když chceme vypočítat $A_n(x, y)$, musíme provést inverzní Fourierovu transformaci $\hat{A}_n(\xi, \eta)$. Tu jsme si již uvedli, proto rovnou píšeme, že

$$A_n(0, 0) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr}(u\mathbb{M})^n d\xi d\eta, \quad (1.51)$$

přičemž vyčíslujeme v bodě $(0,0)$ proto, že chceme získat amplitudu v původním bodě. Výraz (1.51) téměř představuje sumu amplitud cest délky n . Oproti původnímu zavedení znaménka v (1.28), které se využívá v definici amplitudy cesty v (1.29), se výraz liší ve znaménku. Dále také ve výrazu (1.51) uvažujeme všechny amplitudy dvakrát, jelikož cesty počítáme v obou směrech procházení (po směru hodinových ručiček i proti). Zároveň máme mřížku o velikosti N atomů, čili máme N výchozích pozic pro cesty. Proto, když budeme chtít vyjádřit výraz

$$\sum_{p(n)} W(p),$$

kde sčítáme přes cesty délky n , budeme muset $A_n(0, 0)$ vynásobit dle výše zmíněných korekcí výrazem $-\frac{N}{2}$. Celkem tedy dostáváme

$$\sum_{p(n)} W(p) = -\frac{N}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr}(u\mathbb{M})^n d\xi d\eta. \quad (1.52)$$

Než vyjádříme sumu amplitud, uvedeme zde jako vsuvku několik definicí, vět a poznámek z teorie lineární algebry.

1.4.5 Teoretická vsuvka

Definice 1.4. Necht' $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Pak exponenciálu matice \mathbb{A} definujeme

$$e^{\mathbb{A}} = \mathbb{1} + \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{\mathbb{A}^k}{k!}. \quad (1.53)$$

POZNÁMKA 1.5. Takto definovaná exponenciála matice \mathbb{A} je dobře definovaná pro všechny čtvercové matice, neboť řada v rovnici (1.53) konverguje vždy, viz [19].

Rovněž můžeme definovat logaritmus matice následujícím způsobem.

Definice 1.6. Pro matici $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ definujeme logaritmus jako

$$\ln \mathbb{A} = \sum_{k=1}^{+\infty} (-1)^{k+1} \frac{(\mathbb{A} - \mathbb{1})^k}{k}, \quad (1.54)$$

přičemž tato rovnost platí pro takové matice \mathbb{A} , které splňují

$$\|\mathbb{A} - \mathbb{1}\|_M < 1. \quad (1.55)$$

POZNÁMKA 1.7. Norma $\|\cdot\|_M$ v definici 1.6 značí vyhovující maticovou normu – tj. normu, která splňuje podmínku $\|(\mathbb{A} - \mathbb{1})^n\| \leq \|\mathbb{A} - \mathbb{1}\|^n$. Příkladem takové normy může být pro matici $\mathbb{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ tzv. spektrální norma

$$\|\mathbb{B}\|_2 = \max_{\|x\|_2 \leq 1} \|\mathbb{B}x\|_2. \quad (1.56)$$

Věta 1.8. *Nechť je matice $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Pak platí*

$$\det \exp\{\mathbb{A}\} = \exp\{\text{Tr} \mathbb{A}\}. \quad (1.57)$$

Důkaz. Důkaz této věty lze najít například v [20]. □

1.4.6 Pokračování výpočtu

Nyní se tedy vraťme k výpočtu. Chceme vyjádřit sumu amplitud cest všech délek. Výraz (1.52) tedy budeme sčítat přes všechna n . K tomuto výrazu však přibude ještě faktor $\frac{1}{n}$, jelikož každá cesta délky n má právě n počátečních bodů, které vedou na stejnou cestu. Dostáváme

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n} \sum_{p(n)} W(p) &= \sum_{n=1}^{+\infty} -\frac{N}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr} (u\mathbb{M})^n d\xi d\eta \\ &= \frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr} \sum_{n=1}^{+\infty} -\frac{(u\mathbb{M})^n}{n} d\xi d\eta \\ &\stackrel{(1)}{=} \frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr} \ln(\mathbb{1} - u\mathbb{M}) d\xi d\eta, \end{aligned} \quad (1.58)$$

kde jsme v kroku (1) využili definice 1.6. Zároveň musíme okomentovat záměny sumy a integrálu. V integrálu vystupuje výraz $\text{Tr} (u\mathbb{M})^n$. Matice \mathbb{M} má prvky menší nebo rovny (v absolutní hodnotě) jedné. Každý prvek matice násobíme proměnnou u , kterou jsme definovali jako

$$u = \tanh k = \tanh \beta J = \tanh \frac{J}{k_B T}.$$

Z této matice počítáme stopu. Celkem tedy stopa této matice může nabýt maximální hodnoty $4 \tanh \frac{J}{k_B T}$. Z tohoto vztahu dostáváme podmínku na absolutní konvergenci integrálu pro ty teploty T , které splňují

$$\tanh \frac{J}{k_B T} < \frac{1}{4}. \quad (1.59)$$

Pro takové teploty můžeme zaměnit sumu a integrál. Převod řady matic na logaritmus dle věty 1.6 je možný, neboť již bylo řečeno, že žádný prvek matice $(u\mathbb{M})^n$ není větší nebo roven jedné. Například pro normu z poznámky 1.7 je tato podmínka jistě splněna.

Dospěli jsme k výrazu pro součet amplitud všech neperiodických cest. Ve výrazu (1.58) sčítáme přes všechny cesty délky n (sčítání $\sum_{p(n)}$) a pak následně přes všechna přirozená n (sčítání $\sum_{n=1}^{+\infty}$). Chtěli bychom však opět přejít k sumě přes ekvivalentní cesty (sčítání $\sum_{[p]}$). Musíme si uvědomit, že v souladu s definicí znaménka pro periodické cesty, které jsme definovali vztahem (1.28), platí následující. Znaménko periodické cesty s lichou periodou je stejné jako znaménko její neperiodické podcesty, naopak znaménko periodické cesty se sudou periodou je opačné než znaménko její neperiodické podcesty.

Celková amplituda periodické cesty p' je tedy pro lichou periodu rovna $W(p') = W(p)^{2n+1}$, zatímco pro sudou periodu je to $W(p') = -W(p)^{2n}$, přičemž $n \in \mathbb{N}$ a $W(p)$ značí amplitudu neperiodické podcesty p cesty p' .

Finálně tedy můžeme přepsat levou stranu vztahu (1.58) pro součet amplitud všech cest, které sčítáme přes všechny délky n jako součet přes ekvivalentní neperiodické cesty následovně

$$\sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n} \sum_{p(n)} W(p) = \sum_{[p]} \left(W(p) - \frac{W(p)^2}{2} + \frac{W(p)^3}{3} - \dots \right). \quad (1.60)$$

Pro následující úpravu uveďme také tuto větu.

Věta 1.9. Pro každé $x \in (-1, 1)$ platí

$$\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{+\infty} (-1)^{n+1} \frac{x^n}{n}.$$

Pravá strana rovnice (1.60) vyjadřuje dle předchozí věty 1.9 Taylorův rozvoj funkce $\ln(1+W(p))$, jelikož zcela jistě

$$|W(p)| < 1.$$

Vztah (1.60) tedy upravíme do tvaru obsahující člen $\ln(1+W(p))$

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{1}{n} \sum_{p(n)} W(p) &= \sum_{[p]} \left(W(p) - \frac{W(p)^2}{2} + \frac{W(p)^3}{3} - \dots \right) \\ &= \sum_{[p]} \ln(1+W(p)) \\ &= \ln \prod_{[p]} (1+W(p)). \end{aligned} \quad (1.61)$$

Porovnáním výsledků (1.58) a (1.61) dostáváme, že

$$\ln \prod_{[p]} (1+W(p)) = \frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr} \ln(\mathbb{1} - u\mathbb{M}) \, d\xi \, d\eta,$$

čili

$$\prod_{[p]} (1+W) = \exp \left[\frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr} \ln(\mathbb{1} - u\mathbb{M}) \, d\xi \, d\eta \right].$$

Tento výsledek dosadíme zpět do výrazu (1.36), čímž dostaneme

$$Z_N = \frac{2^N}{(1-u^2)^N} \prod_{[p]} (1+W(p)) = \frac{2^N}{(1-u^2)^N} \exp \left[\frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \text{Tr} \ln(\mathbb{1} - u\mathbb{M}) \, d\xi \, d\eta \right]. \quad (1.62)$$

Tento výraz budeme dále upravovat. K vypočítání stopy matice $\ln(\mathbb{1} - u\mathbb{M})$ z výrazu (1.62) lze buďto využít přímý výpočet, nebo využít identitu z věty 1.8.

Za pomoci této věty tedy přepisujeme následující výraz jako

$$\text{Tr} \ln(\mathbb{1} - u\mathbb{M}) = \ln \det(\mathbb{1} - u\mathbb{M}) = \ln \left[(u^2 + 1)^2 - 2u(u^2 - 1)(\cos \xi + \cos \eta) \right]. \quad (1.63)$$

V této rovnici vystupuje proměnná u , kterou jsme substituovali na začátku této části práce jako $u = \tanh k = \tanh(\beta J)$. Budeme tedy chtít tento výsledek převést zpět do proměnné β . K tomu využijeme vztahy a součtové vzorce pro hyperbolické funkce. Uvedeme pouze některé mezivýsledky.

$$(u^2 + 1)^2 = \frac{\cosh^2(2\beta J)}{\cosh^4(\beta J)}, \quad (1.64)$$

$$2u(u^2 - 1) = -\frac{\sinh(2\beta J)}{\cosh^4(\beta J)}. \quad (1.65)$$

Po dosazení těchto vztahů do rovnice (1.63) dostáváme

$$\begin{aligned} \text{Tr} \ln(1 - u\mathbb{M}) &= \ln \det(1 - u\mathbb{M}) = \ln \left[\frac{\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \xi + \cos \eta)}{\cosh^4(\beta J)} \right] \\ &= -4 \ln \cosh(\beta J) + \ln [\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \xi + \cos \eta)]. \end{aligned} \quad (1.66)$$

Celkový výsledek pro partiční sumu Z_N vyšel

$$Z_N = 2^N \cosh^{2N}(\beta J) \exp \left[\frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} (-4 \ln \cosh(\beta J) + \ln [\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \xi + \cos \eta)]) d\xi d\eta \right]. \quad (1.67)$$

V první části práce jsme zmínili vztah (1.3) pro výpočet volné energie f na jednu částici. Dle tohoto vztahu nyní vypočítáme volnou energii na jednu částici pro dvourozměrný Isingův model

$$\begin{aligned} f(T) &= \lim_{N \rightarrow +\infty} f_N(T) = -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\ln Z_N}{N} \\ &= -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{1}{N} \left[N \ln 2 + 2N \ln \cosh(\beta J) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{N}{2(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} (-4 \ln \cosh(\beta J) + \ln [\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \xi + \cos \eta)]) d\xi d\eta \right] \\ &= -k_B T \left[\ln 2 + 2 \ln \cosh(\beta J) + \underbrace{\frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} -4 \ln \cosh(\beta J) d\xi d\eta}_{-16\pi^2 \ln \cosh(\beta J)} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} (\ln [\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \xi + \cos \eta)]) d\xi d\eta \right] \\ &= -k_B T \left[\ln 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} (\ln [\cosh^2(2\beta J) - \sinh(2\beta J)(\cos \xi + \cos \eta)]) d\xi d\eta \right]. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Po poslední úpravě tedy dostáváme finální výsledek, že

$$f(T) = -k_B T \left[\ln(2 \cosh(2\beta J)) + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \ln \left[1 - \frac{\sinh(2\beta J)}{\cosh^2(2\beta J)} (\cos \xi + \cos \eta) \right] d\xi d\eta \right]. \quad (1.69)$$

Když bychom však nyní chtěli získat, stejně jako v jednorozměrném Isingově modelu, kritickou teplotu, která by značila možnost fázového přechodu, nemáme k dispozici vztah (1.4), jelikož ve dvourozměrném modelu uvažujeme velikost magnetického pole $H = 0$. Kritickou teplotu značící fázový přechod však lze získat z tzv. Kramer–Wannierovy duality. Tento postup bude nastíněn později.

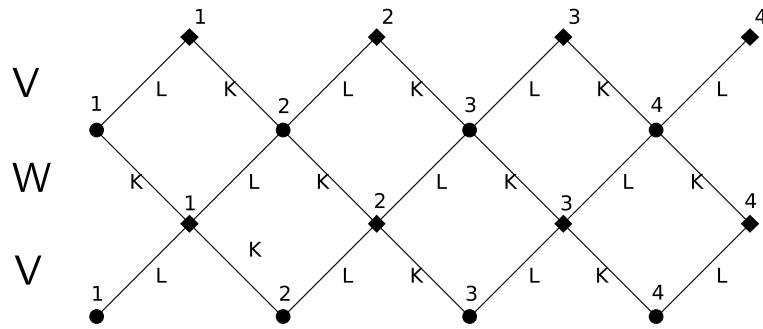
1.5 Isingův model ve 2D – alternativní řešení

V této části představíme postup řešení Isingova modelu druhým z možných způsobů – prezentovaný v [8]. V části 1.4 byl představen kombinatorický přístup řešení. Nyní však využijeme obdobných postupů jako v řešení jednorozměrné verze.

Pro následující postup však nyní zobecníme předpoklady pro zkoumaný model. Předpis pro energii konfigurace σ budeme uvažovat

$$E(\sigma) = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.70)$$

přičemž interakční člen J_{ij} bude nabývat dvou hodnot, a to \hat{K} a \hat{L} v závislosti na směru v mřížce. Poté můžeme označit $K = \hat{K} \cdot \beta$ a $L = \hat{L} \cdot \beta$. Mřížku si dále pro názornost natočíme. Uvažované konfigurace tedy můžeme vidět na následujícím obrázku 1.9.



Obrázek 1.9: Ukázka části uvažované zrotované mřížky s interakčními členy K a L .

Z obrázku lze vidět, že částice tvoří horizontální řady. Pokud označíme počet řádků konfigurace jako m , pak snadno nahlédneme, že m musí být sudé číslo (aby byla zachována periodická podmínka na okraje, kterou stále uvažujeme). Počet částic v každém řádku pak označíme n .

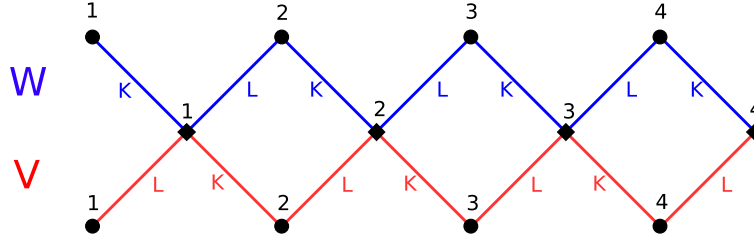
Nechť konfigurace $\sigma^1, \sigma^2, \dots, \sigma^{2^n}$ jsou všechny přípustné konfigurace částic $1, 2, \dots, n$. Pak tedy konfiguraci každého řádku můžeme popsat jistým vektorem $\sigma^i = (\sigma_1^i, \sigma_2^i, \dots, \sigma_n^i)$ pro nějaké konkrétní $i \in \{1, 2, \dots, 2^n\}$.

Zavedme nyní dvě nové funkce, a to V a W následujícím způsobem

$$V(\sigma^i, \sigma^j) = \exp \left[\sum_{k=1}^n \left(K \sigma_{k+1}^i \sigma_k^j + L \sigma_k^i \sigma_k^j \right) \right], \quad (1.71)$$

$$W(\sigma^i, \sigma^j) = \exp \left[\sum_{k=1}^n \left(K \sigma_k^i \sigma_k^j + L \sigma_k^i \sigma_{k+1}^j \right) \right]. \quad (1.72)$$

Pro názornost lze na obrázku 1.10 vidět, jakým způsobem se od sebe tyto dvě funkce liší.

Obrázek 1.10: Ukázka sčítání ve funkcích V a W .

V definici partiční sumy v (1.26) vystupuje součet přes všechny přípustné konfigurace $\sigma \in \Sigma$ z výrazu $\exp(-\beta E(\sigma))$, přičemž konkrétně v našem případě se tento výraz bude rovnat

$$Z_N = \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) = \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp\left(\sum_{\langle ij \rangle} \beta J_{ij} \sigma_i \sigma_j\right).$$

Pro tento dvourozměrný model však uvažujeme pouze dvě hodnoty interakčních členů, a to \hat{K} a \hat{L} v závislosti na směru. Současně jsme zavedli označení $K = \hat{K} \cdot \beta$ a $L = \hat{L} \cdot \beta$. Z vlastností exponenciely, která převádí součet v exponentu na součin exponenciely, definice funkcí V a W dle (1.71) a (1.72) a obrázku 1.10, který ukazuje, jakým způsobem pokrývá součet ve funkcích V a W mřížku, můžeme přepsat partiční sumu do následujícího výrazu

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{\sigma \in \Sigma} \exp(-\beta E(\sigma)) \\ &= \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \cdots \sum_{\sigma_m} V(\sigma_1, \sigma_2) W(\sigma_2, \sigma_3) V(\sigma_3, \sigma_4) W(\sigma_4, \sigma_5) \dots V(\sigma_{m-1}, \sigma_m) W(\sigma_m, \sigma_1), \end{aligned} \quad (1.73)$$

přičemž v tomto zápisu používáme označení σ_k pro konfiguraci k -tého řádku celkové konfigurace σ .

Na funkce V a W však můžeme taktéž nahlížet jako na prvky matic \mathbb{V} a \mathbb{W} , kdy

$$\mathbb{V} = (V_{ij})_{i,j=1}^{2^n} = \left(V(\sigma^i, \sigma^j) \right)_{i,j=1}^{2^n},$$

$$\mathbb{W} = (W_{ij})_{i,j=1}^{2^n} = \left(W(\sigma^i, \sigma^j) \right)_{i,j=1}^{2^n},$$

kdy nyní jako σ^i používámě opět pro i -tou možnou konfiguraci částic $1, 2, \dots, n$ ze všech možných konfigurací na těchto částicích. Rozměry obou matic jsou tedy $2^n \times 2^n$, neboť každý řádek konfigurace σ může mít 2^n možností, jelikož $\sigma^i = \{+1, -1\}^n$.

S využitím označení těchto matic \mathbb{V} a \mathbb{W} můžeme přepsat vztah (1.73) do tvaru

$$Z_N = \sum_{i_1=1}^{2^n} \sum_{i_2=1}^{2^n} \cdots \sum_{i_m=1}^{2^n} V_{i_1 i_2} W_{i_2 i_3} \cdots V_{i_{m-1} i_m} W_{i_m i_1}.$$

Tento výraz budeme dále upravovat.

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{i_1=1}^{2^n} \sum_{i_2=1}^{2^n} \cdots \sum_{i_m=1}^{2^n} V_{i_1 i_2} W_{i_2 i_3} \cdots V_{i_{m-1} i_m} W_{i_m i_1} \\ &= \sum_{i_1=1}^{2^n} \sum_{i_3=1}^{2^n} \cdots \sum_{i_m=1}^{2^n} \left(\sum_{i_2=1}^{2^n} V_{i_1 i_2} W_{i_2 i_3} \right) V_{i_3 i_4} \cdots W_{i_m i_1}. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Výraz uvnitř závorek je dle definice člen součinu matic, konkrétně

$$\sum_{i_2=1}^{2^n} V_{i_1 i_2} W_{i_2 i_3} = (\mathbb{V}\mathbb{W})_{i_1 i_3}.$$

Tento výraz dosadíme zpět do (1.74) a pokračujeme v úpravách

$$\begin{aligned} Z_N &= \sum_{i_1=1}^{2^n} \sum_{i_3=1}^{2^n} \cdots \sum_{i_m=1}^{2^n} (\mathbb{V}\mathbb{W})_{i_1 i_3} V_{i_3 i_4} \cdots W_{i_m i_1} \\ &= \sum_{i_1=1}^{2^n} \sum_{i_4=1}^{2^n} \cdots \sum_{i_m=1}^{2^n} \left(\sum_{i_3=1}^{2^n} (\mathbb{V}\mathbb{W})_{i_1 i_3} V_{i_3 i_4} \right) W_{i_4 i_5} \cdots W_{i_m i_1} \\ &= \sum_{i_1=1}^{2^n} \sum_{i_4=1}^{2^n} \cdots \sum_{i_m=1}^{2^n} (\mathbb{V}\mathbb{W}\mathbb{V})_{i_1 i_4} W_{i_4 i_5} \cdots W_{i_m i_1}. \end{aligned} \quad (1.75)$$

Takto vysčítáme všechny sumy, až dospějeme k výrazu

$$Z_N = \sum_{i_1=1}^{2^n} (\mathbb{V}\mathbb{W}\mathbb{V}\mathbb{W} \cdots \mathbb{V}\mathbb{W})_{i_1 i_1} = \text{Tr}(\mathbb{V}\mathbb{W})^{\frac{m}{2}}. \quad (1.76)$$

1.5.1 Vlastnosti matice $(\mathbb{V}\mathbb{W})^{\frac{m}{2}}$

Obecně o matici $(\mathbb{V}\mathbb{W})^{\frac{m}{2}}$ zatím nevíme nic konkrétního. V této části uvažujeme různé vlastnosti látky ve dvou směrech (parametry K a L). Podívejme se, jak vypadá matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$.

$$\begin{aligned} (\mathbb{V}\mathbb{W})_{ij} &= \sum_{k=1}^{2^n} \mathbb{V}_{ik} \mathbb{W}_{kj} = \sum_{k=1}^{2^n} V(\boldsymbol{\sigma}^i, \boldsymbol{\sigma}^k) W(\boldsymbol{\sigma}^k, \boldsymbol{\sigma}^j) \\ &= \sum_{k=1}^{2^n} \exp \left[\sum_{l=1}^n (K \sigma_{l+1}^i \sigma_l^k + L \sigma_l^i \sigma_l^k) \right] \exp \left[\sum_{l=1}^n (K \sigma_l^k \sigma_l^j + L \sigma_l^k \sigma_{l+1}^j) \right] \\ &= \sum_{k=1}^{2^n} \exp \left[\sum_{l=1}^n (K \sigma_{l+1}^i \sigma_l^k + L \sigma_l^i \sigma_l^k + K \sigma_l^k \sigma_l^j + L \sigma_l^k \sigma_{l+1}^j) \right] \\ &= \sum_{k=1}^{2^n} \prod_{l=1}^n \exp (K \sigma_{l+1}^i \sigma_l^k + L \sigma_l^i \sigma_l^k + K \sigma_l^k \sigma_l^j + L \sigma_l^k \sigma_{l+1}^j). \end{aligned} \quad (1.77)$$

Když si nyní napíšeme člen $(\mathbb{V}\mathbb{W})_{ji}$

$$(\mathbb{V}\mathbb{W})_{ji} = \sum_{k=1}^{2^n} \prod_{l=1}^n \exp (K \sigma_{l+1}^j \sigma_l^k + L \sigma_l^j \sigma_l^k + K \sigma_l^k \sigma_l^i + L \sigma_l^k \sigma_{l+1}^i), \quad (1.78)$$

zjistíme, že pro obecné K a L není matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$ symetrická. Pokud však zavedeme dodatečný předpoklad, že $K = L$, pak víme, že tato matice symetrická je, jelikož výrazy (1.77) a (1.78) se pro $K = L$ rovnají. Následující výpočet tedy rozdělíme do dvou případů.

1. Matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$ je symetrická, tj. $K = L$:

Pokud je matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$ symetrická, existuje dle poznatků z lineární algebry rozklad

$$\mathbb{V}\mathbb{W} = \mathbb{R}\mathbb{D}\mathbb{R}^{-1},$$

přičemž matice \mathbb{D} je diagonální a na diagonále této matice se nacházejí vlastní čísla matice \mathbb{VW} . Současně z toho rozkladu vyplývá, že pro matici $(\mathbb{VW})^{\frac{m}{2}}$ platí

$$(\mathbb{VW})^{\frac{m}{2}} = \mathbb{R}\mathbb{D}^{\frac{m}{2}}\mathbb{R}^{-1}.$$

Za využití lemmatu 1.3 tak můžeme tvrdit, že

$$Z_N = \Lambda_1^{\frac{m}{2}} + \Lambda_2^{\frac{m}{2}} + \dots + \Lambda_{2^n}^{\frac{m}{2}},$$

přičemž Λ_i jsou vlastní čísla matice \mathbb{VW} .

2. Matice \mathbb{VW} není symetrická, tj. $K \neq L$:

V případě, že matice \mathbb{VW} symetrická nebude, nelze použít stejnou argumentaci pro výpočet partiční sumy Z_N jako v případě symetrické matice. Avšak ke stejnému výsledku můžeme dojít jinou cestou.

Pro každou (i nesymetrickou) matici \mathbb{A} platí, že

$$\text{Tr}(\mathbb{A}) = \sum_i \lambda_i(\mathbb{A}),$$

kde $\lambda_i(\mathbb{A})$ jsou vlastní čísla matice \mathbb{A} . Současně také pro všechny \mathbb{A} platí (dle věty 1.1.6 z [21])

$$\sigma(p(\mathbb{A})) = p(\sigma(\mathbb{A})).$$

Označením $p(\cdot)$ myslíme polynom libovolného stupně a $\sigma(\cdot)$ značí spektrum matice. Díky těmto dvěma argumentům, tedy rovněž pro nesymetrický případ matice \mathbb{VW} , pro partiční sumu uvažovaného modelu platí, že

$$Z_N = \Lambda_1^{\frac{m}{2}} + \Lambda_2^{\frac{m}{2}} + \dots + \Lambda_{2^n}^{\frac{m}{2}}. \quad (1.79)$$

1.5.2 Úprava členu $(\mathbb{VW})_{ij}$

Podívejme se více na členy matice \mathbb{VW} . Vezměme výraz (1.77) a rozepišme si první sumu

$$\begin{aligned} (\mathbb{VW})_{ij} &= \sum_{k=1}^{2^n} \prod_{l=1}^n \exp\left(\sigma_l^k \left[K\sigma_{l+1}^i + L\sigma_l^i + K\sigma_l^j + L\sigma_{l+1}^j \right]\right) \\ &= \sum_{\sigma_1^k=\pm 1} \sum_{\sigma_2^k=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_n^k=\pm 1} \prod_{l=1}^n \exp\left(\sigma_l^k \left[K\sigma_{l+1}^i + L\sigma_l^i + K\sigma_l^j + L\sigma_{l+1}^j \right]\right). \end{aligned} \quad (1.80)$$

Jelikož hodnota $\sigma_l^k = \pm 1$, bude člen $(\mathbb{VW})_{ij}$ v (1.80) obsahovat 2^n členů typu

$$\prod_{l=1}^n \exp(\pm [\dots]_l) \exp(\pm [\dots]_l) \dots \exp(\pm [\dots]_l).$$

Těmito hranatými závorkami myslíme hranaté závorky z rovnice (1.80). Dále můžeme v tomto případě (1.80) přepsat pomocí jedné sumy jako

$$(\mathbb{VW})_{ij} = \prod_{l=1}^n \sum_{\sigma=\pm 1} \exp\left(\sigma \left[K\sigma_{l+1}^i + L\sigma_l^i + K\sigma_l^j + L\sigma_{l+1}^j \right]\right).$$

Nakonec pomocí definice hyperbolického kosinu můžeme vyjádřit $(\mathbb{VW})_{ij}$ jako

$$(\mathbb{VW})_{ij} = \prod_{l=1}^n 2 \cosh \left[K\sigma_{l+1}^i + L\sigma_l^i + K\sigma_l^j + L\sigma_{l+1}^j \right].$$

1.5.3 Další vlastnosti matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$

Na matice \mathbb{V} a \mathbb{W} budeme nyní pohlížet jako na funkce parametrů K a L , tedy

$$\mathbb{V} = \mathbb{V}(K, L),$$

$$\mathbb{W} = \mathbb{W}(K, L).$$

Pak tedy i součin těchto matic bude funkcí parametrů K a L , proto budeme psát $\mathbb{V}(K, L)\mathbb{W}(K, L)$. Dále tento součin zobecníme, takže uvažujme součin matic s rozdílnými parametry

$$\mathbb{V}(K, L)\mathbb{W}(K', L'). \quad (1.81)$$

Pro tento zobecněný součin matic lze ukázat několik vlastností. V [8] je například ukázáno, že pokud je splněna podmínka

$$\sinh(2K) \sinh(2L) = \sinh(2K') \sinh(2L'), \quad (1.82)$$

pak platí, že

$$\mathbb{V}(K, L)\mathbb{W}(K', L') = \mathbb{V}(K', L')\mathbb{W}(K, L). \quad (1.83)$$

Tato vlastnost se bude hodit v dalším postupu.

1.5.4 Inverzní matice k $\mathbb{V}\mathbb{W}$

K výpočtu stopy matice $(\mathbb{V}\mathbb{W})^{\frac{m}{2}}$ se bude hodit, pokud budeme umět vypočítat inverzní matici k $(\mathbb{V}\mathbb{W})$. Stále budeme uvažovat matice, kdy \mathbb{V} a \mathbb{W} budou mít rozdílné parametry, tedy uvažujeme součin matic a jejich členů tvaru

$$(\mathbb{V}(K, L)\mathbb{W}(K', L'))_{ij} = \prod_{l=1}^n 2 \cosh \left[K\sigma_{l+1}^i + L\sigma_l^i + K'\sigma_l^j + L'\sigma_{l+1}^j \right]. \quad (1.84)$$

Zavedeme pomocné označení, kdy pokud $a, b, c, d = \pm 1$, definujeme

$$X(a, b, c, d) = 2 \cosh [La + Kb + K'c + L'd]. \quad (1.85)$$

Pomocí tohoto označení pak tedy budeme psát

$$(\mathbb{V}(K, L)\mathbb{W}(K', L'))_{ij} = \prod_{l=1}^n X(\sigma_l^i, \sigma_{l+1}^i, \sigma_l^j, \sigma_{l+1}^j). \quad (1.86)$$

Abychom zajistili možnost nalezení inverze k tomuto součinu matic, budeme chtít volit takové parametry K, L, K', L' , aby tento součin matic byl diagonální maticí. Chceme tudíž, aby

$$(\mathbb{V}\mathbb{W})_{ij} \neq 0 \iff i = j,$$

nebo-li

$$(\mathbb{V}\mathbb{W})_{ij} = 0 \iff i \neq j. \quad (1.87)$$

Tuto podmínku však nelze zařídit. Chceme najít tedy nějakou matici, která je „skoro“-diagonální a řídká.

Členy matice $(\mathbb{V}\mathbb{W})_{ij}$ můžeme rozdělit do tří případů:

1. konfigurace $\sigma^i = \sigma^j$, nebo-li pro všechny indexy k platí

$$\sigma_k^i = \sigma_k^j \wedge \sigma_{k+1}^i = \sigma_{k+1}^j \quad (1.88)$$

2. konfigurace $\sigma^i = -\sigma^j$, nebo-li pro všechny indexy k platí

$$\sigma_k^i = -\sigma_k^j \wedge \sigma_{k+1}^i = -\sigma_{k+1}^j \quad (1.89)$$

3. existuje index k takový, že

$$\sigma_k^i \neq \sigma_k^j \wedge \sigma_{k+1}^i = \sigma_{k+1}^j \quad \text{nebo} \quad \sigma_k^i = \sigma_k^j \wedge \sigma_{k+1}^i \neq \sigma_{k+1}^j. \quad (1.90)$$

Pokud tedy vynulujeme všechny členy, které spadají do třetího případu, výsledná matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$ bude mít nenulové členy na diagonále a na jisté vedlejší diagonále. Ze všech členů bude mít tedy pouze 2×2^n nenulových.

Pokud tedy chceme vynulovat všechny členy, které spadají pod případ (1.90), musíme zajistit, aby byl součin v (1.86) nulový. To znamená, že alespoň jeden člen tohoto součinu bude nulový. Na parametry K, L, K', L' proto budeme klást podmínky

$$\cosh(K + L - K' + L') = 0 \quad \wedge \quad \cosh(K - L + K' + L') = 0.$$

Pokud budou parametry splňovat tyto podmínky současně, členy splňující (1.90) budou nulové. Tyto dvě rovnice mají řešení pouze v oboru komplexních čísel, a to

$$\begin{aligned} K' &= L + \frac{1}{2}\pi i, \\ L' &= -K. \end{aligned} \quad (1.91)$$

Pro první případ obsažený v (1.88) označíme členy součinu v (1.86) jako $X_{\text{stejně}}$. Pro každý člen tohoto součinu pak platí

$$\begin{aligned} X_{\text{stejně}} &= X(\sigma_k, \sigma_{k+1}, \sigma_k, \sigma_{k+1}) = 2 \cosh(K\sigma_{k+1} + L\sigma_k + K'\sigma_k + L'\sigma_{k+1}) \\ &= 2 \cosh\left(K\sigma_{k+1} + L\sigma_k + \left(L + \frac{1}{2}\pi i\right)\sigma_k + (-K)\sigma_{k+1}\right) \\ &= 2 \cosh\left(\sigma_k\left(2L + \frac{1}{2}\pi i\right)\right) = 2 \cosh\left(2L + \frac{1}{2}\pi i\right) \\ &= 2 \left[\cosh(2L) \cosh\left(\frac{1}{2}\pi i\right) + \sinh(2L) \sinh\left(\frac{1}{2}\pi i\right) \right] \\ &= 2i \sinh(2L). \end{aligned}$$

V tomto výpočtu jsme postupně využili, že pro K' a L' uvažujeme vztah (1.91), sudost funkce \cosh , součtové vzorce a také vztahy pro hodnoty funkcí

$$\begin{aligned} \cosh\left(\frac{1}{2}\pi i\right) &= 0, \\ \sinh\left(\frac{1}{2}\pi i\right) &= i. \end{aligned} \quad (1.92)$$

Pro druhý případ obsažený v (1.89) označíme členy součinu v (1.86) jako $X_{\text{rozdílné}}$. Pro každý člen tohoto součinu pak platí

$$\begin{aligned} X_{\text{rozdílné}} &= X(\sigma_k, \sigma_{k+1}, -\sigma_k, -\sigma_{k+1}) = 2 \cosh(K\sigma_{k+1} + L\sigma_k - K'\sigma_k - L'\sigma_{k+1}) \\ &= 2 \cosh\left(K\sigma_{k+1} + L\sigma_k - \left(L + \frac{1}{2}\pi i\right)\sigma_k - (-K)\sigma_{k+1}\right) \\ &= 2 \cosh\left(2K\sigma_{k+1} + \frac{1}{2}\pi i\sigma_k\right) \\ &= 2 \left[\cosh(2K\sigma_{k+1}) \cosh\left(\frac{1}{2}\pi i\sigma_k\right) - \sinh(2K\sigma_{k+1}) \sinh\left(\frac{1}{2}\pi i\sigma_k\right) \right] \\ &= -2i\sigma_k\sigma_{k+1} \sinh(2K). \end{aligned}$$

V tomto výpočtu jsme opět postupně využili vztahu (1.91), sudost funkce \cosh , lichost funkce \sinh , součtové vzorce a opět vztahy (1.92).

Pomocí těchto výše prováděných výpočtů můžeme vztah (1.86) přepsat do následující podoby

$$\mathbb{V}(K, L)\mathbb{W}\left(L + \frac{1}{2}\pi i, -K\right) = (2i \sinh(2L))^n \mathbb{I} + (-2i \sinh(2K))^n \mathbb{R}. \quad (1.93)$$

Matice \mathbb{I} vystupující ve vztahu (1.93) je identická matice a matici \mathbb{R} definujeme vztahem

$$(\mathbb{R})_{ij} = \delta(\sigma_1^i, -\sigma_1^j) \delta(\sigma_2^i, -\sigma_2^j) \dots \delta(\sigma_n^i, -\sigma_n^j),$$

přičemž symbolem $\delta(.,.)$ myslíme Kronekerovo delta, neboli

$$\delta(\sigma, \sigma') = \begin{cases} 1 & \sigma = \sigma', \\ 0 & \sigma \neq \sigma'. \end{cases}$$

Obě matice \mathbb{I} i \mathbb{R} jsou tudíž matice rozměrů $2^n \times 2^n$.

Pro matici \mathbb{R} platí následující vztah

$$\mathbb{R}^2 = \mathbb{I},$$

o čemž se můžeme jednoduše přesvědčit.

$$(\mathbb{R}^2)_{ij} = \sum_{k=1}^n (\mathbb{R})_{ik} (\mathbb{R})_{kj} = \left| \left((\mathbb{R})_{ik} \neq 0 \iff \sigma^i = -\sigma^k \right) \implies -\sigma^k = \sigma^j = \sigma^i \right| = \begin{cases} 1 & i = j, \\ 0 & i \neq j. \end{cases}$$

Díky tomuto faktu je pravá strana rovnice (1.93) invertibilní. Proto je tento vztah důležitým mezivýsledkem.

1.5.5 Komutační vztahy pro matice \mathbb{V} a \mathbb{W}

Naším cílem v této části bude dokázat, že všechny matice $\mathbb{V}(K, L)$, $\mathbb{W}(K, L)$, $\mathbb{V}(K', L')$, $\mathbb{W}(K', L')$ komutují, pokud je splněna podmínka (1.82).

K tomu zavedeme další matici \mathbb{C} , která je definovaná jako

$$(\mathbb{C})_{ij} = \delta(\sigma_1^i, \sigma_2^j) \delta(\sigma_2^i, \sigma_3^j) \dots \delta(\sigma_n^i, \sigma_1^j).$$

Matice \mathbb{C} je opět matice rozměrů $2^n \times 2^n$. Dále pro tuto matici platí následující identita

$$\mathbb{C}^n = \mathbb{I}.$$

$$(\mathbb{C}^2)_{ij} = \sum_{k=1}^{2^n} (\mathbb{C})_{ik} (\mathbb{C})_{kj} = \sum_{k=1}^{2^n} \delta(\sigma_1^i, \sigma_2^k) \delta(\sigma_2^i, \sigma_3^k) \dots \delta(\sigma_n^i, \sigma_1^k) \cdot \delta(\sigma_1^k, \sigma_2^j) \delta(\sigma_2^k, \sigma_3^j) \dots \delta(\sigma_n^k, \sigma_1^j). \quad (1.94)$$

Prvek $(\mathbb{C}^2)_{ij}$ je tedy nenulový, pokud pro každé k platí

$$\sigma_k^i = \sigma_{k+2}^j.$$

Pokud budeme provádět opětovné násobení výrazu (1.94) maticí \mathbb{C} , dospějeme k podmínce, že prvek matice $(\mathbb{C}^n)_{ij}$ je nenulový (konkrétně nabývá hodnoty 1), pokud pro každé k platí díky periodickým podmínkám

$$\sigma_k^i = \sigma_{k+n}^j = \sigma_k^j.$$

Celkem tedy dostáváme, že

$$(\mathbb{C}^n)_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases},$$

nebo-li

$$\mathbb{C}^n = \mathbb{I}.$$

Cílem této části je však ukázat, že matice $\mathbb{V}, \mathbb{W}, \mathbb{C}$ komutují, neboli že

$$\mathbb{V}(K, L) = \mathbb{C}^{-1} \mathbb{V}(K, L) \mathbb{C}, \quad (1.95)$$

$$\mathbb{W}(K, L) = \mathbb{C}^{-1} \mathbb{W}(K, L) \mathbb{C}. \quad (1.96)$$

Dokážeme zde pouze první vztah (1.95), druhý vztah (1.96) by se dokázal obdobným způsobem.

Vztah (1.95) platí právě tehdy, když

$$\mathbb{C}\mathbb{V} = \mathbb{V}\mathbb{C}.$$

Rozepíšeme si za pomoci definic matic \mathbb{V} a \mathbb{C} a maticového násobení levou a pravou stranu této rovnice.

$$(\mathbb{C}\mathbb{V})_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma=1}^{2^n} (\mathbb{C})_{\alpha\gamma} (\mathbb{V})_{\gamma\beta} = \sum_{\gamma=1}^{2^n} \delta(\sigma_1^\alpha, \sigma_2^\gamma) \delta(\sigma_2^\alpha, \sigma_3^\gamma) \dots \delta(\sigma_n^\alpha, \sigma_1^\gamma) (\mathbb{V})_{\gamma\beta}.$$

Tento výraz obsahuje pouze jediný člen součtu a nerovná se nule právě tehdy, když

$$\sigma_1^\alpha = \sigma_2^\gamma \wedge \sigma_2^\alpha = \sigma_3^\gamma \wedge \dots \wedge \sigma_n^\alpha = \sigma_1^\gamma.$$

Označme tedy $\gamma = \tau(\alpha)$ permutaci takovou, že $\tau(\sigma^\alpha) = \sigma^{\tau(\alpha)}$. Pak tedy pokračujeme v úpravě

$$\begin{aligned} (\mathbb{C}\mathbb{V})_{\alpha\beta} &= (\mathbb{V})_{\tau(\alpha)\beta} = \exp \left[\sum_{j=1}^n \left(K \sigma_{j+1}^{\tau(\alpha)} \sigma_j^\beta + L \sigma_j^{\tau(\alpha)} \sigma_j^\beta \right) \right] \\ &= \exp \left[\sum_{j=1}^n \left(K \sigma_j^\alpha \sigma_j^\beta + L \sigma_{j-1}^\alpha \sigma_j^\beta \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.97)$$

Stejným způsobem si rozepíšeme i člen $(\mathbb{V}\mathbb{C})_{\alpha\beta}$:

$$(\mathbb{V}\mathbb{C})_{\alpha\beta} = \sum_{\gamma=1}^{2^n} (\mathbb{V})_{\alpha\gamma} (\mathbb{C})_{\gamma\beta} = \sum_{\gamma=1}^{2^n} (\mathbb{V})_{\alpha\gamma} \delta(\sigma_1^\gamma, \sigma_2^\beta) \delta(\sigma_2^\gamma, \sigma_3^\beta) \dots \delta(\sigma_n^\gamma, \sigma_1^\beta).$$

Obdobně označme $\gamma = \hat{\tau}(\beta)$ permutací takovou, že $\hat{\tau}(\sigma^\beta) = \sigma^{\hat{\tau}(\beta)}$.

$$\begin{aligned} (\mathbb{V}\mathbb{C})_{\alpha\beta} &= (\mathbb{V})_{\alpha\hat{\tau}(\beta)} = \exp \left[\sum_{j=1}^n \left(K\sigma_{j+1}^\alpha \sigma_j^{\hat{\tau}(\beta)} + L\sigma_j^\alpha \sigma_j^{\hat{\tau}(\beta)} \right) \right] \\ &= \exp \left[\sum_{j=1}^n \left(K\sigma_{j+1}^\alpha \sigma_{j+1}^\beta + L\sigma_j^\alpha \sigma_{j+1}^\beta \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.98)$$

Jelikož stále uvažujeme periodickou podmínku na okraje, tak hned vidíme, že výrazy (1.97) a (1.98) se rovnají. Tím jsme tedy dokázali platnost vztahu

$$\mathbb{V}(K, L) = \mathbb{C}^{-1} \mathbb{V}(K, L) \mathbb{C}.$$

Vztah (1.96) by se dokázal obdobným způsobem.

Velmi podobným způsobem lze ukázat platnost vztahů

$$\begin{aligned} \mathbb{V}(K, L) &= \mathbb{R}^{-1} \mathbb{V}(K, L) \mathbb{R}, \\ \mathbb{W}(K, L) &= \mathbb{R}^{-1} \mathbb{W}(K, L) \mathbb{R}. \end{aligned}$$

Dále také z rozpisu (1.98) a definice \mathbb{W} snadno vidíme, že platí

$$\mathbb{W}(K, L) = \mathbb{V}(K, L) \mathbb{C}. \quad (1.99)$$

Když následně dosadíme vztah (1.99) do vztahu (1.83), dostaneme tvrzení, že za podmínky

$$\sinh(2K) \sinh(2L) = \sinh(2K') \sinh(2L')$$

platí

$$\mathbb{V}(K, L) \mathbb{V}(K', L') = \mathbb{V}(K', L') \mathbb{V}(K, L).$$

Rovněž můžeme pomocí (1.99) upravit vztah (1.93) do podoby

$$\mathbb{V}(K, L) \mathbb{V}(L + \frac{1}{2}\pi i, -K) \mathbb{C} = (2i \sinh(2L))^n \mathbb{1} + (-2i \sinh(2K))^n \mathbb{R}, \quad (1.100)$$

což tvoří první důležitý výsledek této části. Druhým výsledkem je pak fakt, že všechny matice $\mathbb{V}, \mathbb{W}, \mathbb{C}, \mathbb{R}$ komutují.

1.5.6 Vlastní čísla matic \mathbb{V} a \mathbb{W}

Na začátek této části uvedeme důležitou větu, kterou budeme využívat. Ta vychází z věty 1.3.12, lemmatu 1.3.19 a poznatků části 1.3 z [21].

Věta 1.10. *Nechť matice A, B rozměrů $n \times n$ komutují, tj.*

$$AB = BA.$$

Pak tyto matice mají společný podprostor vlastních vektorů.

Označme dále k jako

$$k = (\sinh(2K) \sinh(2L))^{-1}. \quad (1.101)$$

V předchozí části jsme ukázali, že všechny matice $\mathbb{V}, \mathbb{W}, \mathbb{R}, \mathbb{C}$ komutují. Dle věty 1.10 mají tedy tyto matice společný podprostor vlastních vektorů. Označme tedy vektor z toho podprostoru $x(k)$, kde

tedy parametrem k v závorce dáváme najevo závislost na parametru k , který uvádí vzájemný vztah K a L .

Dále necht' $v(K, L)$, c , r jsou příslušná vlastní čísla matice $\mathbb{V}(K, L)$, \mathbb{C} , \mathbb{R} . Pak jistě pro K a L splňující podmínku (1.101) platí

$$\begin{aligned}\mathbb{V}(K, L)x(k) &= v(K, L)x(k), \\ \mathbb{C}x(k) &= cx(k), \\ \mathbb{R}x(k) &= rx(k).\end{aligned}\tag{1.102}$$

Současně pokud parametry K a L splňují (1.101), dle (1.82) tuto podmínku splňují i K' a L' .

Jelikož $\mathbb{C}^n = \mathbb{R}^2 = \mathbb{I}$, pro vlastní čísla c a r platí

$$c^n = r^2 = 1.$$

Se všemi zmíněnými poznatky této části nyní vynásobíme rovnici (1.100)

$$\mathbb{V}(K, L)\mathbb{V}(L + \frac{1}{2}\pi i, -K)\mathbb{C}x(k) = (2i \sinh(2L))^n x(k) + (-2i \sinh(2K))^n \mathbb{R}x(k),$$

z které postupnými úpravami za využití (1.102) získáme vztah

$$v(K, L)v(L + \frac{1}{2}\pi i, -K)c = (2i \sinh(2L))^n + (-2i \sinh(2K))^n r.\tag{1.103}$$

Když jsme tedy symbolem Λ_i označovali vlastní čísla matice $\mathbb{V}(K, L)\mathbb{W}(K, L)$, můžeme za využití vztahu (1.99) vyjádřit

$$\Lambda^2(K, L) = v^2(K, L)c.$$

Poté tento výsledek dosadíme do (1.103) a získáme rovnici pro Λ jako

$$\Lambda(K, L)\Lambda(L + \frac{1}{2}\pi i, -K) = (2i \sinh(2L))^n + (-2i \sinh(2K))^n r,\tag{1.104}$$

což tvoří stěžejní funkcionální rovnici pro $\Lambda(K, L)$. Řešením této rovnice bychom dostali konkrétní vlastní čísla matice $\mathbb{V}\mathbb{W}$ a následně partiční sumu celého systému.

1.5.7 Výsledek a shrnutí

Řešením této funkcionální rovnice (1.104) se v této práci zabývat nebudeme. V jejím řešení se využívají nejrůznější poznatky z komplexní analýzy. Detailní postup lze nalézt v kapitole 7 z [8].

Jelikož nás zajímá, stejně jako v části 1.4, termodynamická limita pro počet částic jdoucí do $+\infty$, můžeme vidět, že partiční suma se v limitě bude chovat jako

$$Z_N \sim (\Lambda_{\max})^m$$

pro $m \rightarrow +\infty$. Proto chceme tedy nalézt takové největší Λ , které je řešením rovnice (1.104).

Řešení této rovnice lze získat různými způsoby v závislosti na tom, jaká je hodnota teploty T – zdali je $T < T_K$, $T = T_K$ nebo $T > T_K$, kde T_K je kritická teplota systému.

Výsledkem je zjištění, že volná energie $f(T)$ Isingova modelu pro čtvercovou mřížku se v termodynamické limitě rovná

$$f(T) = -\frac{k_B T}{2\pi} \int_0^\pi F(\theta) d\theta,\tag{1.105}$$

kde funkce $F(\theta)$ je

$$F(\theta) = \ln \left[2 \left[\cosh(2K) \cosh(2L) + k^{-1} (1 + k^2 - 2k \cos(2\theta))^{\frac{1}{2}} \right] \right].$$

Parametr k užíváme v souladu s definicí (1.101), tedy

$$k = \frac{1}{\sinh(2K) \sinh(2L)}.$$

Nezapomeňme také, že ve funkci $F(\theta)$ je implicitně zahrnuta závislost na teplotě T , neboť

$$K = K' \beta = \frac{K'}{k_B T},$$

$$L = L' \beta = \frac{L'}{k_B T}.$$

Dosaďme ještě do rovnice (1.105) hodnoty pro funkci $F(\theta)$, kdy $K' = L' = J$, tedy $K = L = \beta J$, abychom dostali porovnání s výsledkem z části 1.4.

$$\begin{aligned} f(T) &= -\frac{k_B T}{2\pi} \int_0^\pi F(\theta) d\theta \\ &= -\frac{k_B T}{2\pi} \int_0^\pi \left(\ln [2 \cosh^2(2\beta J)] + \ln \left[1 + \tanh^2(2\beta J) \left(1 + \frac{1}{\sinh^4(2\beta J)} - \frac{2 \cos(2\theta)}{\sinh^2(2\beta J)} \right)^{\frac{1}{2}} \right] \right) d\theta \\ &= -k_B T \ln [2 \cosh(2\beta J)] - \frac{k_B T}{2\pi} \int_0^\pi \ln \left[1 + \tanh^2(2\beta J) \left(1 + \frac{1}{\sinh^4(2\beta J)} - \frac{2 \cos(2\theta)}{\sinh^2(2\beta J)} \right)^{\frac{1}{2}} \right] d\theta. \end{aligned}$$

1.6 Kritická teplota pro čtvercovou mřížku

Na čtvercové dvourozměrné mřížce lze teoreticky vypočítat kritickou teplotu tohoto systému. Tento výpočet je založený na Kramer–Wannierově dualitě. Více o tomto problému se lze dozvědět v [22] nebo v [23]. V této práci nebudeme provádět celý výpočet. Uvedeme pouze několik poznatků a závěrečný vztah.

Kramer–Wannierova dualita vychází z faktu, že na základě poznatků statistické fyziky lze partiční sumu upravit do jiných tvarů pro nízké a vysoké teploty, přesněji pro teploty menší a větší než kritická teplota.

Nechť $Z_N(\hat{K}, \hat{L})$ je partiční suma pro systém s hodnotou teploty menší než T_C , $Z_N(K, L)$ pak partiční suma pro systém s teplotou vyšší než T_C . Pak z Kramer–Wannierovy duality vyplývá, že mezi těmito partičními sumami platí následující vztah

$$Z_N(\hat{K}, \hat{L}) = 2(\sinh(2K) \sinh(2L))^{-\frac{N}{2}} Z_N(K, L).$$

Nyní, když tento vztah dosadíme do (1.3) (pouze s upravenými závislostmi – místo $f(T)$ budeme zapisovat $f(\hat{K}, \hat{L})$, neboť v \hat{K} a \hat{L} je závislost na T obsažena), abychom vypočítali voluminózní energii na částici pro systém ve stavu s teplotou menší než kritickou, dostaneme

$$\begin{aligned} f(\hat{K}, \hat{L}) &= -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\ln Z_N(\hat{K}, \hat{L})}{N} = -k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{\ln Z_N(K, L)}{N} - k_B T \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{-\frac{N}{2} \ln(\sinh(2K) \sinh(2L))}{N} \\ &= f(K, L) + \frac{1}{2\beta} \ln(\sinh(2K) \sinh(2L)). \end{aligned} \tag{1.106}$$

Kritická teplota značí fázový přechod v látce. Tento přechod značí změnu chování látky. Pro tento stav se tedy musí rovnat $f(\hat{K}, \hat{L}) = f(K, L)$. Z rovnice (1.106) vidíme, že tato rovnost nastává právě tehdy, když výraz

$$\frac{1}{2\beta} \ln(\sinh(2K) \sinh(2L)) = 0.$$

Jelikož zlomek $\frac{1}{2\beta}$ je jistě větší než 0, vyplývá z této úvahy, že kritická teplota systému se vypočítá z podmínky

$$\ln(\sinh(2K) \sinh(2L)) = 0.$$

Pokud budeme uvažovat symetrický případ mřížky, tj. $K = L = \frac{J}{k_B T}$, dostáváme pro kritickou teplotu T_C rovnici

$$\sinh\left(\frac{J}{k_B T_C}\right) = 1,$$

jejímž řešením je výsledek

$$T_C = \frac{J}{k_B} \cdot \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})}. \quad (1.107)$$

Kapitola 2

Markov Chain Monte Carlo

V druhé části práce se seznámíme s některými teoretickými aspekty simulací Markov Chain Monte Carlo. Představeny budou pouze základy těchto metod. Více o těchto metodách se lze dozvědět například v [24, 25, 26, 27], ze kterých budou čerpány podklady pro tuto část práce.

Metody Markov Chain Monte Carlo jsou hojně využívané pro získávání náhodných vzorků ze zadaných pravděpodobnostních distribucí, nejčastěji spojitých náhodných veličin.

Obecné metody Monte Carlo mají širokou paletu uplatnění. Příkladem jsou výpočty integrálů metodami Monte Carlo. Markov Chain, přeloženo jako markovský řetězec, reprezentuje metody, u kterých jsou po sobě jdoucí vzorky závislé na těch předchozích – tvoří tedy určitý řetězec. Dohromady tedy Markov Chain Monte Carlo vytváří náhodné vzorky z vzorkovací distribuce, a to pomocí algoritmů aktualizace předchozích stavů. Definujme si však metodu Markov Chain Monte Carlo exaktněji.

2.1 Základní definice

Definujme pouze některé základní pojmy potřebné pro metodu Markov Chain Monte Carlo. Detailnější vzhled do metod Markov Chain Monte Carlo je možné nalézt například v [24] nebo v [25].

Definice 2.1. Markovským řetězcem \mathcal{X} nazveme posloupnost náhodných veličin $(X_n)_{n=1}^{+\infty}$, pokud pro všechna x_1, x_2, \dots, x_n platí

$$\mathbf{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n \wedge X_{n-1} = x_{n-1} \wedge \dots \wedge X_1 = x_1) = \mathbf{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n). \quad (2.1)$$

POZNÁMKA 2.2. Podmínku (2.1) v definici 2.1 nazýváme *Markovova vlastnost*, obor hodnot náhodných veličin $(X_n)_{n=1}^{+\infty}$ nazýváme *stavový prostor* markovského řetězce \mathcal{X} a značíme \mathcal{S} .

Definice 2.3. Markovský řetězec \mathcal{X} nazveme *stacionární*, pokud pravděpodobnost

$$\mathbf{P}(X_{n+1} = x_{n+1} | X_n = x_n) \quad (2.2)$$

nezávisí na n .

Definice 2.4. Necht' je stavový prostor markovského řetězce \mathcal{X} konečný a $|\mathcal{S}| = k$. Pak definujeme matici přechodu $\mathbb{P} = (p_{ij})_{i,j=1}^k$, přičemž

$$p_{ij} = \mathbf{P}(X_{n+1} = x_j | X_n = x_i) \stackrel{\text{ozn.}}{=} P(x_i, x_j).$$

Definice 2.5. Necht' \mathcal{X} je markovský řetězec s konečným stavovým prostorem a \mathbb{P} je jeho matice přechodu. Pak vektor $\boldsymbol{\pi}$ nazveme stacionární distribucí, pokud tento vektor splňuje následující rovnost

$$\boldsymbol{\pi} = \boldsymbol{\pi}\mathbb{P}. \quad (2.3)$$

POZNÁMKA 2.6. Podmínku (2.3) lze přepsat do tvaru

$$\pi(y) = \sum_{x \in \mathcal{X}} \pi(x)P(x, y). \quad (2.4)$$

Cílem metody Markov Chain Monte Carlo je následující: vzorkovat ze zadané pravděpodobnostní distribuce. K tomu dospějeme následujícím způsobem. Sestavíme takový markovský řetězec, který necháme v čase vyvíjet. Tento markovský řetěz bude sestavený tak, že jeho limitní distribuce a stacionární distribuce (uvažovaná distribuce, ze které chceme vzorkovat) tohoto řetězce se budou rovnat. Když proto máme Isingův model, máme také zadanou distribuci na konfiguracích $\boldsymbol{\sigma}$. Metoda Markov Chain Monte Carlo nám tedy bude poskytovat posloupnost vzorků, které budou konvergovat ke stacionární distribuci Isingova modelu.

Matematicky tedy hledáme matici přechodu \mathbb{P} , která bude vyhovovat rovnici (2.3), přičemž $\boldsymbol{\pi}$ je v našem případě distribuce, která odpovídá pravděpodobnosti (1.2).

2.2 Metropolisův algoritmus

Metropolisův algoritmus slouží k tomu, abychom řetězec s maticí přechodu Ψ modifikovali takovým způsobem, aby modifikovaný řetězec měl stacionární distribuci rovnou $\boldsymbol{\pi}$. Nejprve si ukážeme Metropolisův algoritmus, který upravuje symetrický řetězec.

2.2.1 Symetrický řetězec

Uvažujeme vstupní řetězec jako symetrický. Jinými slovy matice přechodu Ψ tohoto řetězce je symetrická matice. Odvození výsledku zde provádět nebudeme. Jak již bylo zmíněno, postup odvození lze nalézt například v [24].

Cílem je nalezení matice přechodu \mathbb{P} . Postup je následující. Máme zadanou distribuci π (v našem případě je to distribuce definovaná vztahem (1.2)). Vybereme rovnoměrně konkrétní stav x (v našem případě by to byla konkrétní částice). Náhodně bychom přiřadili dané částici nový stav y . Modifikovaná matice přechodu má pak následující tvar

$$P(x, y) = \begin{cases} \Psi(x, y) \min \left[1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \right], & \text{pokud } y \neq x, \\ 1 - \sum_{z: z \neq x} \Psi(x, z) \min \left[1, \frac{\pi(z)}{\pi(x)} \right], & \text{pokud } y = x. \end{cases} \quad (2.5)$$

Pokud by tedy nový stav y byl odlišný od stavu x , s pravděpodobností $\min \left[1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \right]$ bychom stav x nahradili stavem y .

Povšimněme si, že algoritmus pracuje pouze s poměrem pravděpodobností $\frac{\pi(y)}{\pi(x)}$. To i v našem případě představuje zásadní skutečnost. Máme sice předpis (1.2), díky kterému můžeme vyjádřit pravděpodobnost konkrétní konfigurace $\boldsymbol{\sigma}$, nicméně neznáme předpis pro partiční sumu Z z tohoto předpisu. Díky poměru $\frac{\pi(y)}{\pi(x)}$ však hodnotu této partiční sumy znát nemusíme, protože metoda vystačí pouze s poměrem pravděpodobností a v tomto poměru se hodnota partiční sumy zkrátí.

2.2.2 Nesymetrický řetězec

Pro nesymetrický vstupní řetězec je postup obdobný jako pro řetězec symetrický, výsledná matice přechodu má však tvar

$$P(x, y) = \begin{cases} \Psi(x, y) \min \left[1, \frac{\pi(y)\Psi(y, x)}{\pi(x)\Psi(x, y)} \right], & \text{pokud } y \neq x, \\ 1 - \sum_{z: z \neq x} \Psi(x, z) \min \left[1, \frac{\pi(z)\Psi(z, x)}{\pi(x)\Psi(x, z)} \right], & \text{pokud } y = x. \end{cases} \quad (2.6)$$

Je to z toho důvodu, že když je řetězec nesymetrický, neplatí pro všechna x a y

$$\Psi(x, y) = \Psi(y, x).$$

V této práci je však pro simulace použit algoritmus Glauberovy dynamiky, kterou si stručně představíme nyní.

2.3 Glauberova dynamika

Druhým algoritmem, který zde zmíníme, je Glauberova dynamika. Tento algoritmus je více důležitý pro tuto práci, jelikož je využívána v praktických simulacích v sekci 3.

Glauberova dynamika se příliš neliší od Metropolisova algoritmu. Na rozdíl od něho je přímo konstruovaná například pro grafy obsahující vrcholy na mřížce. Její základní definice je následující.

Definice 2.7. Necht' V je množina vrcholů, S množina možných stavů těchto vrcholů a $\Omega \subset V^S$. Necht' je dále π distribuce s definičním oborem Ω . Pak Glauberova dynamika pro distribuci π je reverzibilní markovský řetězec se stavovým prostorem Ω , stacionární distribucí π a pravděpodobnostmi přechodu definovanými rovnicí (2.7)

$$\pi^{x, v}(y) = \pi(y | \Omega(x, v)) = \begin{cases} \frac{\pi(y)}{\pi(\Omega(x, v))}, & \text{pokud } y \in \Omega(x, v), \\ 0, & \text{pokud } y \notin \Omega(x, v). \end{cases} \quad (2.7)$$

V této definici se objevil výraz $\Omega(x, v)$, který je definovaný jako

$$\Omega(x, v) = \{y \in \Omega : y(w) = x(w) \quad \forall w \neq v\}. \quad (2.8)$$

$\Omega(x, v)$ tedy značí množinu stavů, které jsou shodné s x všude s jedinou možnou výjimkou ve vrcholu v .

Postup algoritmu Glauberovy dynamiky je tedy následující:

- máme původní stav x a z něho vybereme náhodně vrchol v rovnoměrně rozděleně na množině V ,
- zvolíme nový stav y vzhledem k míře π , a to za podmínky, že všechny vrcholy y jsou kromě vrcholu v jistě shodné s x .

Na rozdíl od Metropolisova algoritmu Glauberova dynamika vrcholu v přiřazuje nové hodnoty z množiny S pouze z přípustných hodnot pro tento vrchol. Konvergence Glauberovy dynamiky ke stacionární distribuci je tedy rychlejší než u Metropolisova algoritmu.

2.3.1 Aplikace Glauberovy dynamiky na Isingův model

Popišme si nyní stručně aplikaci výše zmíněné Glauberovy dynamiky na Isingův model.

Připomeňme, že distribuce pro Isingův model je dána předpisem (1.2). Glauberova dynamika tedy postupuje v případě Isingova modelu následovně:

- vybereme vrchol σ_i náhodně (rovnoměrně rozděleně) ze všech vrcholů původní konfigurace σ_x ,
- pro vrchol σ_i z nové konfigurace σ_y zvolíme náhodně hodnotu spinu (+1 nebo -1),
- aktualizujeme konfiguraci σ_y na základě pravidla daného v (2.7), neboli vypočítáme poměr pravděpodobností $\frac{\pi(y)}{\pi(\Omega(x, v))}$, který se pro Isingův model vypočítá jako

$$\frac{\pi(y)}{\pi(\Omega(x, v))} = \frac{\exp\left(\sum_{j:\langle ij \rangle} (\sigma_y)_i (\sigma_y)_j\right)}{\exp\left(\sum_{j:\langle ij \rangle} (\sigma_x)_i (\sigma_x)_j\right)}, \quad (2.9)$$

- s takovouto pravděpodobností přiřazujeme konfiguraci σ_y novou hodnotu spinu ve vrcholu σ_i .

Kapitola 3

Simulace

Součástí třetí kapitoly je rovněž důležitá část této práce, a to řešení problému Isingova modelu pomocí simulací Markov Chain Monte Carlo, které byly představeny v předchozí části práce. Bude provedena simulace v jedné dimenzi a poté se zaměříme na simulace ve dvou a ve třech dimenzích. Ve všech simulacích této části jsou uvažované konstanty k_B a J rovny hodnotě 1. Všechny simulace budou prováděny v programovacím jazyce Matlab.

3.1 Simulace Isingova modelu v 1D

V této části provedeme simulace Isingova modelu v 1D. Simulace v jedné dimenzi jsou hůře zobrazitelné, proto jsou provedeny pouze pro 100 částic na přímce.

Cílem simulací jednorozměrného Isingova modelu je doložení toho, že pro jednorozměrný model neexistuje kritická teplota. To je simulačně obtížně proveditelné. My se tedy budeme snažit ukázat, že i pro velmi nízké teploty nebude systém konvergovat ke stavu, ve kterém by se v látce vytvořily dva shluky částic, přičemž jeden by byl s hodnotami spinu +1 a druhý s hodnotami -1.

3.1.1 Kód simulací v 1D

Než však přistoupíme k provedení simulací, zobrazíme kód, který byl k simulacím této části práce využit.

```
1 clear variables; close all; clc;
2
3 velikost = 100;
4
5 cast = 0.5;
6 dolni_hranice = @(x, n) (1 + mod(x-1, n));
7 k_b = 1.38064852e-23;
8
9 vzorek = ones(1, velikost);
10 x = randperm(numel(vzorek));
11 x = x(1:cast*velikost);
12 vzorek(x) = -1;
13
14 teplota = 2;
15 beta = 1/(teplota);
```

```

16
17 kroky = [1 100 1000 10000 100000 1000000];
18
19 colormap([1 1 1; 0 0 0]) % cerna barva = 1, bila barva = -1
20 subplot(6,1,1)
21 imagesc(vzorek)
22 title("Po\v{c}\ 'ate\v{c}n\ 'i n\ 'ahodn\ 'a konfigurace")
23 axis image
24 axis([0.5 (velikost + 0.5) 0.5 1.5])
25 set(gca, 'YTickLabel', []);
26
27 for l = 2:6
28     for k = kroky(l-1):kroky(l)
29         i = randi([1 velikost],1);
30
31         xx = [-1 1];
32
33         vzorek(i) = randsample(xx, 1);
34         a = dolni_hranice(i-1, velikost);
35         b = horni_hranice(i+1, velikost);
36
37         suma = -(vzorek(i)*vzorek(a) + vzorek(i)*vzorek(b));
38         pi_old = exp(- beta * suma);
39         pi_new = exp( beta * suma);
40         p = pi_new/pi_old;
41         p = min(1, p);
42
43         if rand < p
44             vzorek(i) = -vzorek(i);
45         end
46     end
47     colormap([1 1 1; 0 0 0]) % cerna barva = 1, bila barva = -1
48     subplot(6,1,1)
49     imagesc(vzorek)
50     title(["Po\v{c}et aktualizac\ 'i: ", num2str(kroky(l))])
51     axis image
52     axis([0.5 (velikost + 0.5) 0.5 1.5])
53     set(gca, 'YTickLabel', []);
54 end
55
56 function y = horni_hranice(x,n)
57 if rem(x,n) == 0
58     y = mod(x, n) + n;
59 else
60     y = mod(x, n);
61 end
62 end

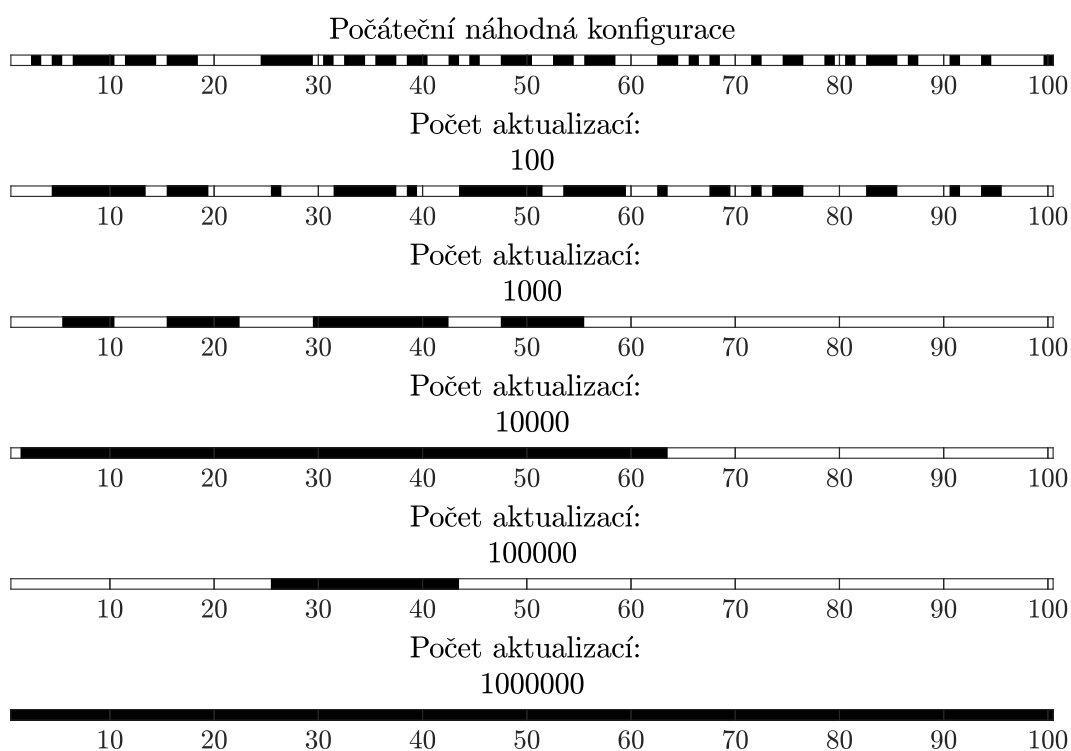
```

Samotné počítání pravděpodobnosti, kterou jsme uváděli v rovnici (2.9) probíhá na řádkách 37-41. Na řádkách 43-45 pak probíhá aktualizace nového stavu na základě rozhodovacího pravidla.

3.1.2 Výsledky simulací v 1D

Simulace provádíme pro 100 částic (z důvodu lepší přehlednosti) na přímce, přičemž bereme v potaz periodickou podmínku na okraje.

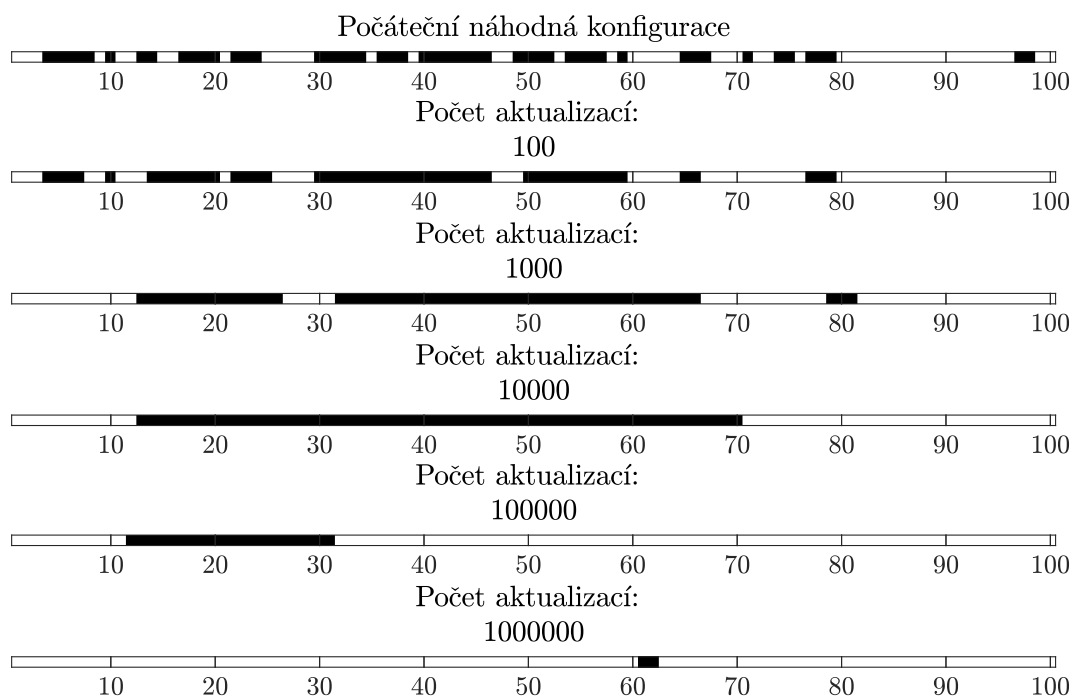
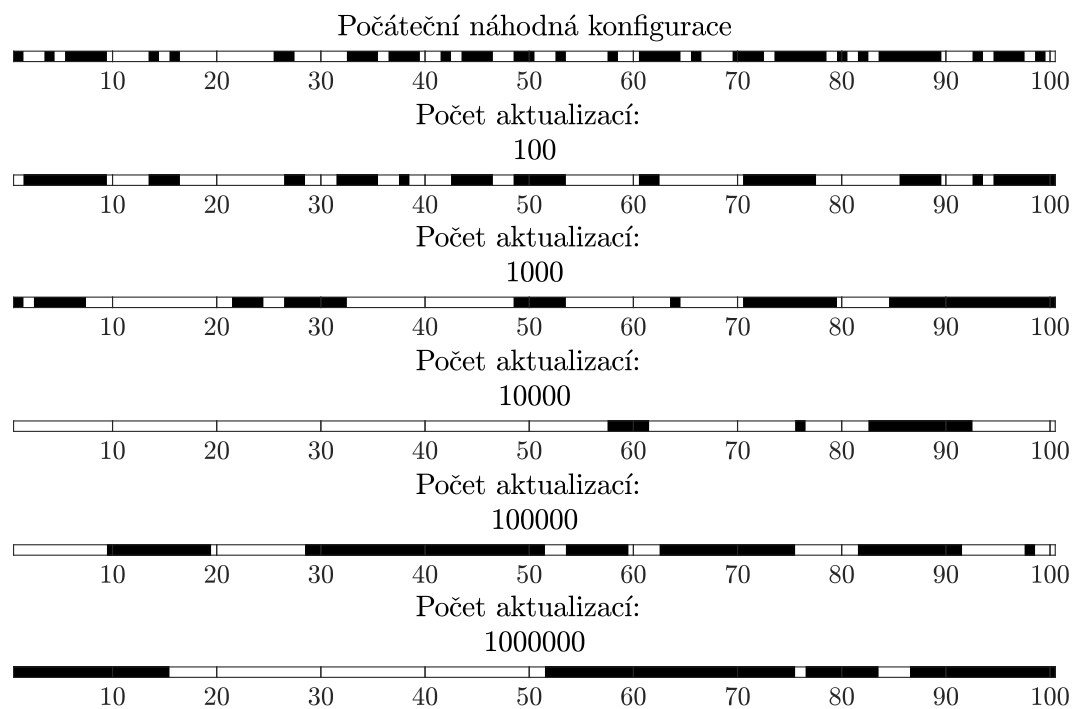
Jak již bylo zmíněno v první části této práce, pro jednorozměrný Isingův model neexistuje dosažitelná kritická teplota. Simulace tedy provedeme neprve pro teplotu 0.1 (obrázek 3.1), neboť tato velmi nízká teplota se blíží hodnotě 0, kterou lze jako jedinou považovat za kritickou teplotu (není však dosažitelná). V každé simulaci zobrazíme počáteční stav, který je náhodný (náhodně vygenerovaných 100 částic s hodnotami spinů +1 a -1). Následně budou zobrazeny stavy po 100, 1000, 10000, 100000 a 1000000 aktualizacích.

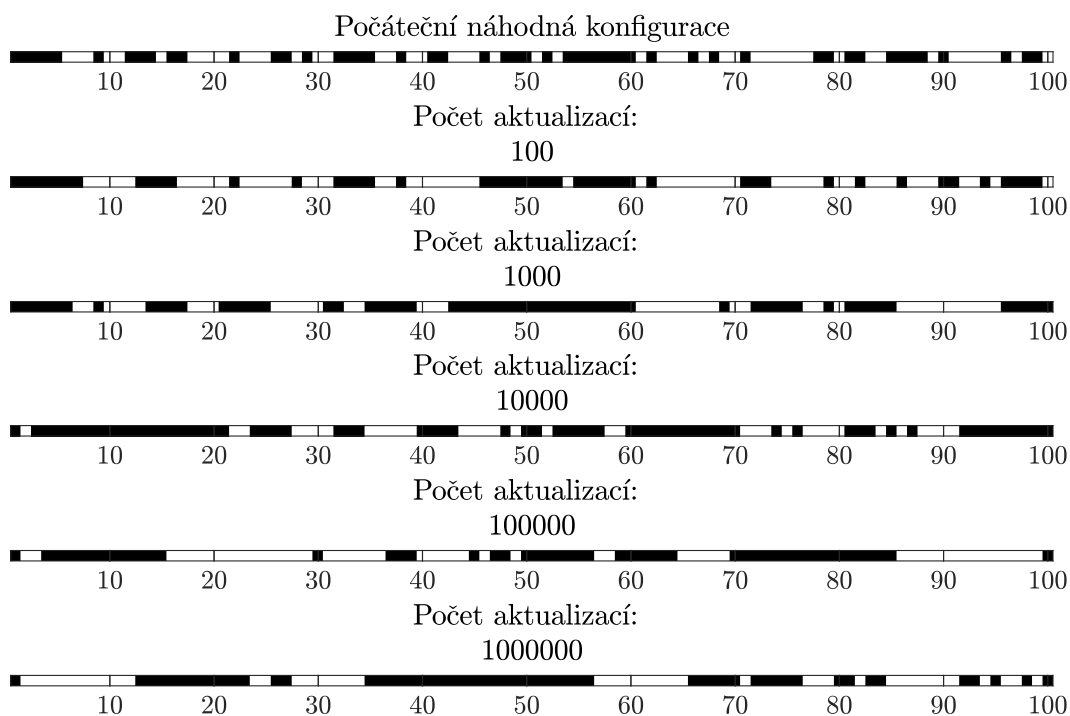


Obrázek 3.1: Simulace Isingova modelu v 1D pro teplotu $T = 0.1$.

Z obrázku 3.1 lze vidět, že ačkoliv po 100000 aktualizacích počátečního stavu převažovaly částice se spinem +1 (černá barva), po 1000000 aktualizacích se situace kompletně změnila a všechny částice se přeorientovaly na spin -1. Z toho nemůžeme příliš vyvodit.

Proto dále provedeme simulace pro teploty 0.5K (obrázek 3.2), teplotu 1K (obrázek 3.3) a teplotu 2K (obrázek 3.4).

Obrázek 3.2: Simulace Isingova modelu v 1D pro teplotu $T = 0.5$.Obrázek 3.3: Simulace Isingova modelu v 1D pro teplotu $T = 1$.

Obrázek 3.4: Simulace Isingova modelu v 1D pro teplotu $T = 2$.

Jak můžeme opět vidět, na žádném ze tří obrázků 3.2, 3.3 nebo 3.4 nedošlo k ustálení systému do stavu s dvěma částmi opačných spinů. Naopak, čím teplota roste, tím méně systém konverguje do ustáleného stavu. Z toho pouze vidíme, že čím je teplota vyšší, tím méně je systém uspořádaný.

Názornější výsledky však poskytnou simulace ve dvou dimenzích, které budou následovat v další části.

3.2 Simulace Isingova modelu ve 2D

Velikost mřížky jsme pro simulace dvourozměrného modelu stanovili na 250×250 s periodickou podmínkou na okraje, tedy v obou směrech platí to, že částice s indexy x_{250} sousedí s částicí x_1 a totéž pro první index. Takovýto systém budeme uvažovat v celé této části.

Než však přistoupíme k samotné prezentaci výsledků, uveďme rovněž na začátek této části kód k simulacím Isingova modelu ve dvou dimenzích.

3.2.1 Kód simulací ve 2D

```

1 clear variables; close all; clc;
2
3 dims = [250,250];
4
5 cast = 0.5*dims(1)*dims(2);
6 matice = ones(dims);
7 x = randperm(numel(matice));
8 x = x(1:cast);

```

```

9 matice(x) = -1;
10
11 dolni = @(x, n) (1 + mod(x-1, n));
12
13 teplota = 10;
14 beta = 1/teplota;
15
16 for l = 1:6
17     for k=1:2000000
18         i = randi([1 250],1);
19         j = randi([1 250],1);
20
21         xx = [-1 1];
22
23         matice(i, j) = randsample(xx, 1);
24
25         i_left=mod(i-2,dims(1))+1; i_right=mod(i, dims(1))+1;
26         j_left=mod(j-2,dims(2))+1; j_right=mod(j, dims(2))+1;
27
28         suma = -matice(i, j)*(matice(i_left, j) + matice(i, j_left) + matice(
                i_right, j) + matice(i, j_right));
29         pi_old = exp(- beta * suma);
30         pi_new = exp( beta * suma);
31         p = pi_new/pi_old;
32         p = min(1, p);
33
34         if rand < p
35             matice(i, j) = -matice(i, j);
36         end
37
38     end
39     subplot(2,3,1)
40     colormap([1 1 1; 0 0 0]) % cerna barva = 1, bila barva = -1
41     imagesc(matice)
42     title(["Po\v{c}et aktualizac\ 'i: " num2str(2000000*1)])
43     axis equal
44     set(gca, 'XTick', [], 'YTick', [])
45     axis([0.5 250.5 0.5 250.5])
46     pause(0.05)
47 end
48 sgtitle(["Teplota: ", num2str(teplota)])

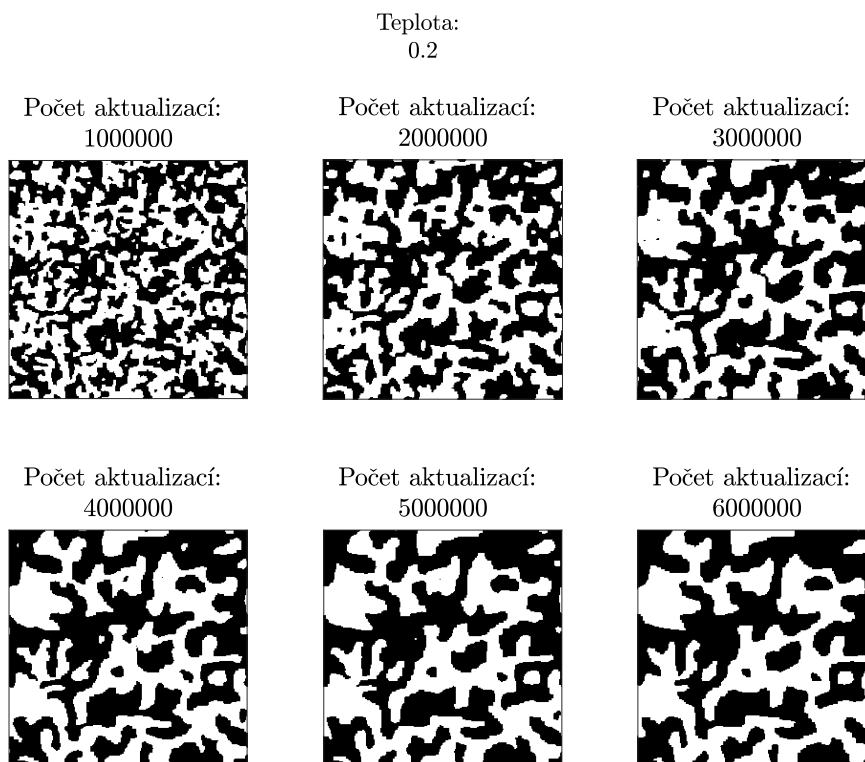
```

Opět uved'me, že samotné počítání pravděpodobnosti z rovnice (2.9) probíhá na řádkách 28-32. Aktualizace nového stavu na základě rozhodovacího pravidla pak probíhá na řádkách 34-36.

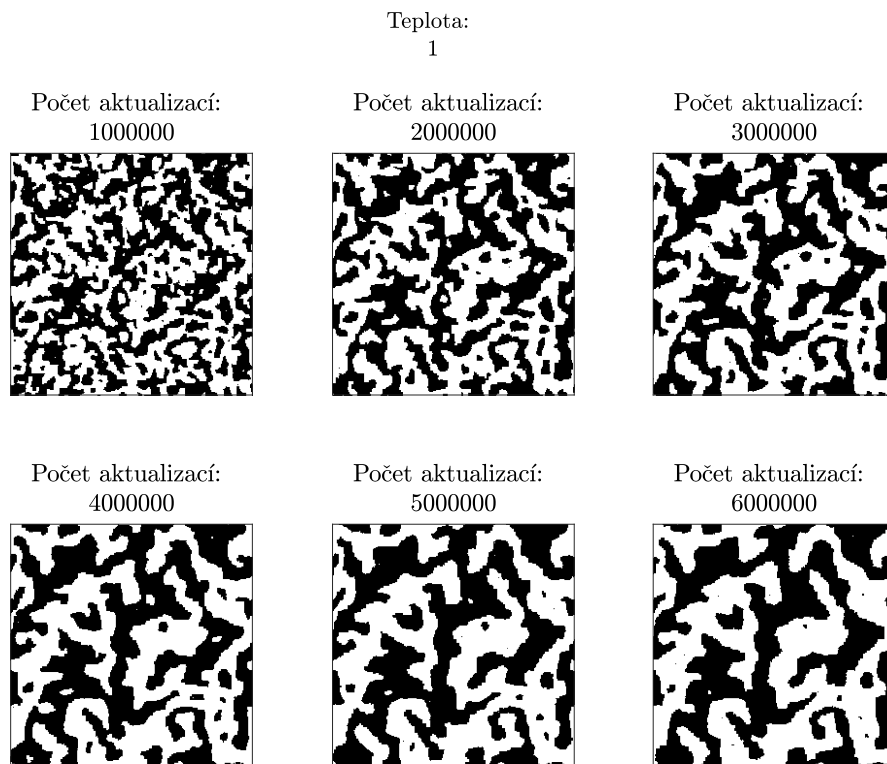
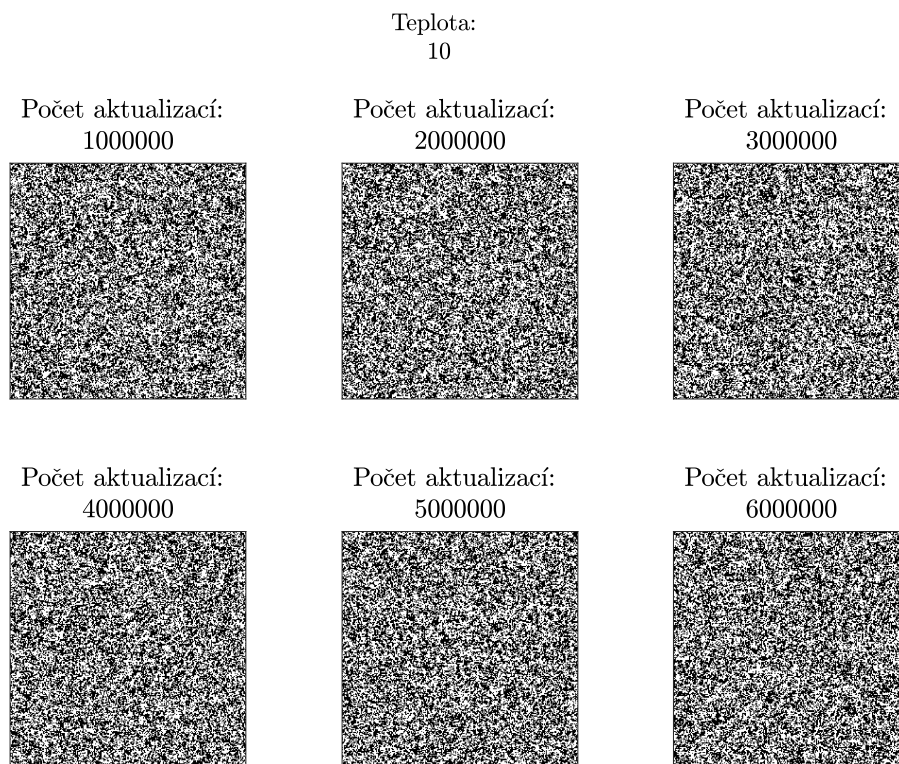
3.2.2 Výsledky simulací ve 2D

Zobrazme výsledky pro simulaci dvourozměrného Isingova modelu. Simulace provedeme nejprve pro 3 teploty, a to pro hodnoty 0,2, 1 a 10. Ke každé teplotě zobrazíme 6 grafů, které budeme vykreslovat po 1000000 aktualizací. Takto nízké číslo volíme z toho důvodu, abychom viděli, s jakou rychlostí a jak se konfigurace vyvíjí.

Vykreslíme tedy oněch 6 zmíněných grafů.

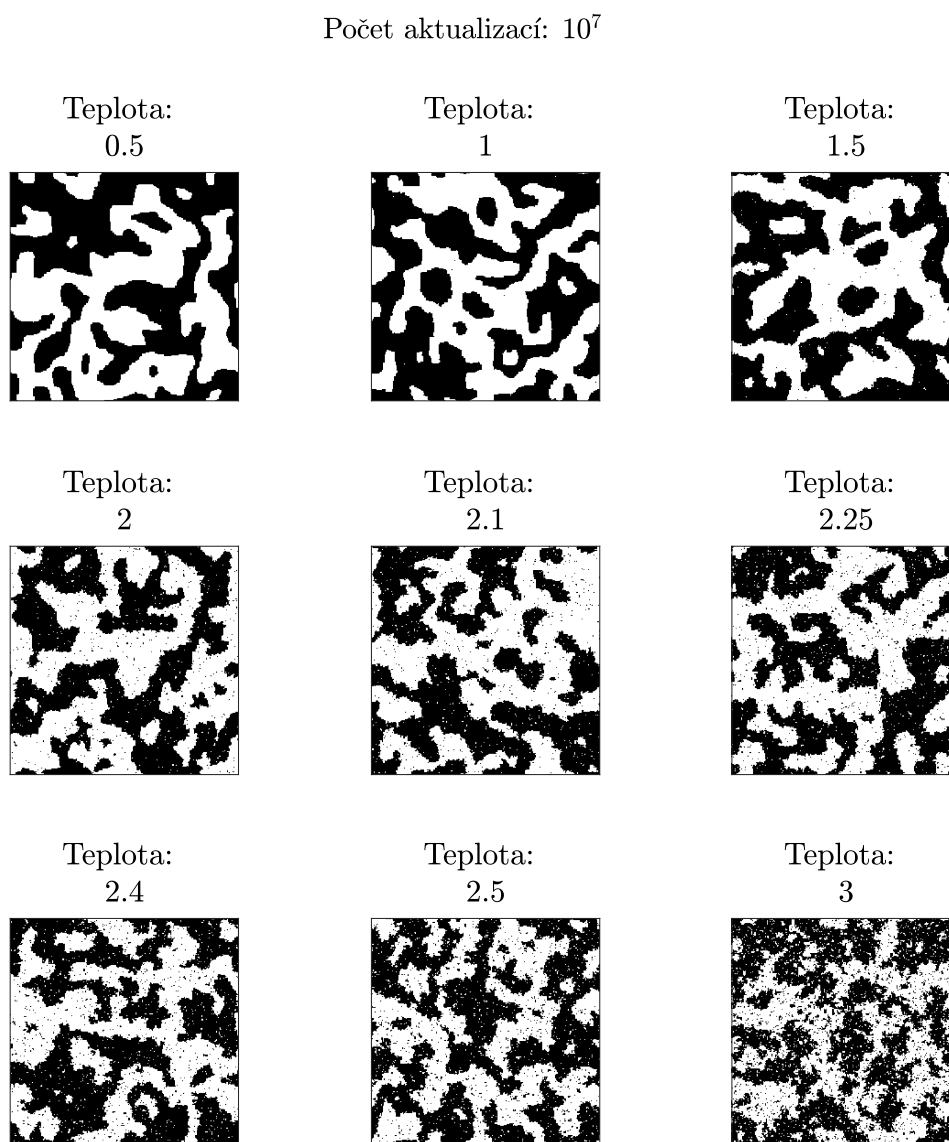


Obrázek 3.5: Simulace Isingova modelu ve 2D pro $T = 0,2$.

Obrázek 3.6: Simulace Isingova modelu ve 2D pro $T = 1$.Obrázek 3.7: Simulace Isingova modelu ve 2D pro $T = 10$.

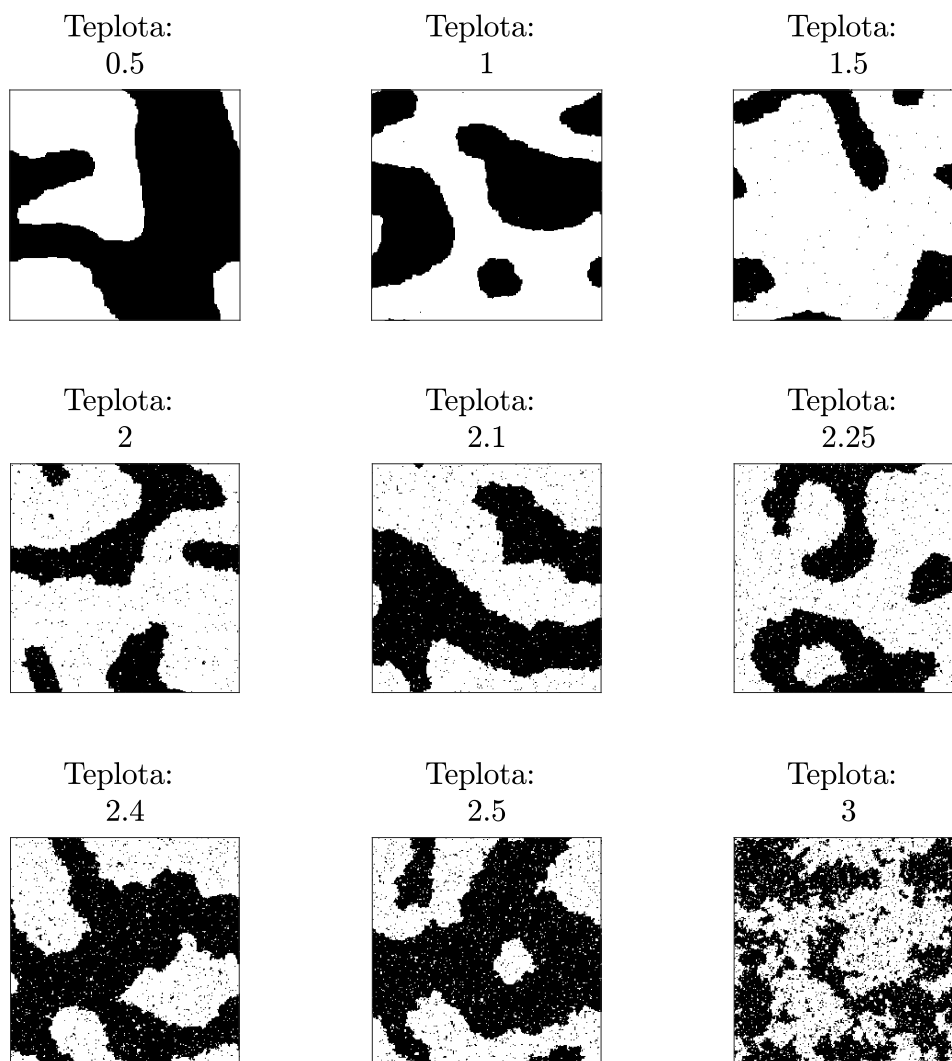
Vidíme, že pro velmi nízké teploty (např. 0,5) dochází k rychlému ustalování konfigurace. Naopak pro teploty vyšší (např. 10) nedochází k ustálení, a to ani pro velké množství aktualizací stavů.

Nyní bychom chtěli experimentálně zjistit kritickou teplotu. Vykreslíme tedy grafy po 10000000 aktualizací a toto provedeme pro různé teploty od 0,5 do 3.



Obrázek 3.8: Simulace Isingova modelu ve 2D – teplota (0,5 – 3), 10^7 aktualizací.

Po vykreslení simulací o 10^7 aktualizacích nejsou vidět značné rozdíly. Například simulace pro teploty 0,5, 1 a 1,5 vypadají velmi podobně. Pro lepší nároznost zkusíme zvýšit počet aktualizací na 10^8 .

Počet aktualizací: 10^8 Obrázek 3.9: Simulace Isingova modelu ve 2D – teplota (0,5 – 3), 10^8 aktualizací.

Z obrázku 3.9 vidíme, že se zvyšujícím se počtem aktualizací pro hodnoty od $T = 2.5$ již systém nejeví známky vytvoření pěkně oddělených shluků s opačným spinem. Naopak pro hodnoty do $T = 2$ je zřetelně viditelný rozdíl. Mezi hodnotami $T = 2$ a $T = 2.5$ je interpretace nejistá. Shluky jsou sice oddělené, nicméně zašumění (částice s jedním spinem jsou často zastoupeny uvnitř shluku se spinem opačným) je již značné. Z toho usuzujeme, že kritická teplota bude ležet uvnitř intervalu (2, 2.5). Pro přesnější určení kritické teploty budeme provádět experimenty, které popíšeme v části 3.4.

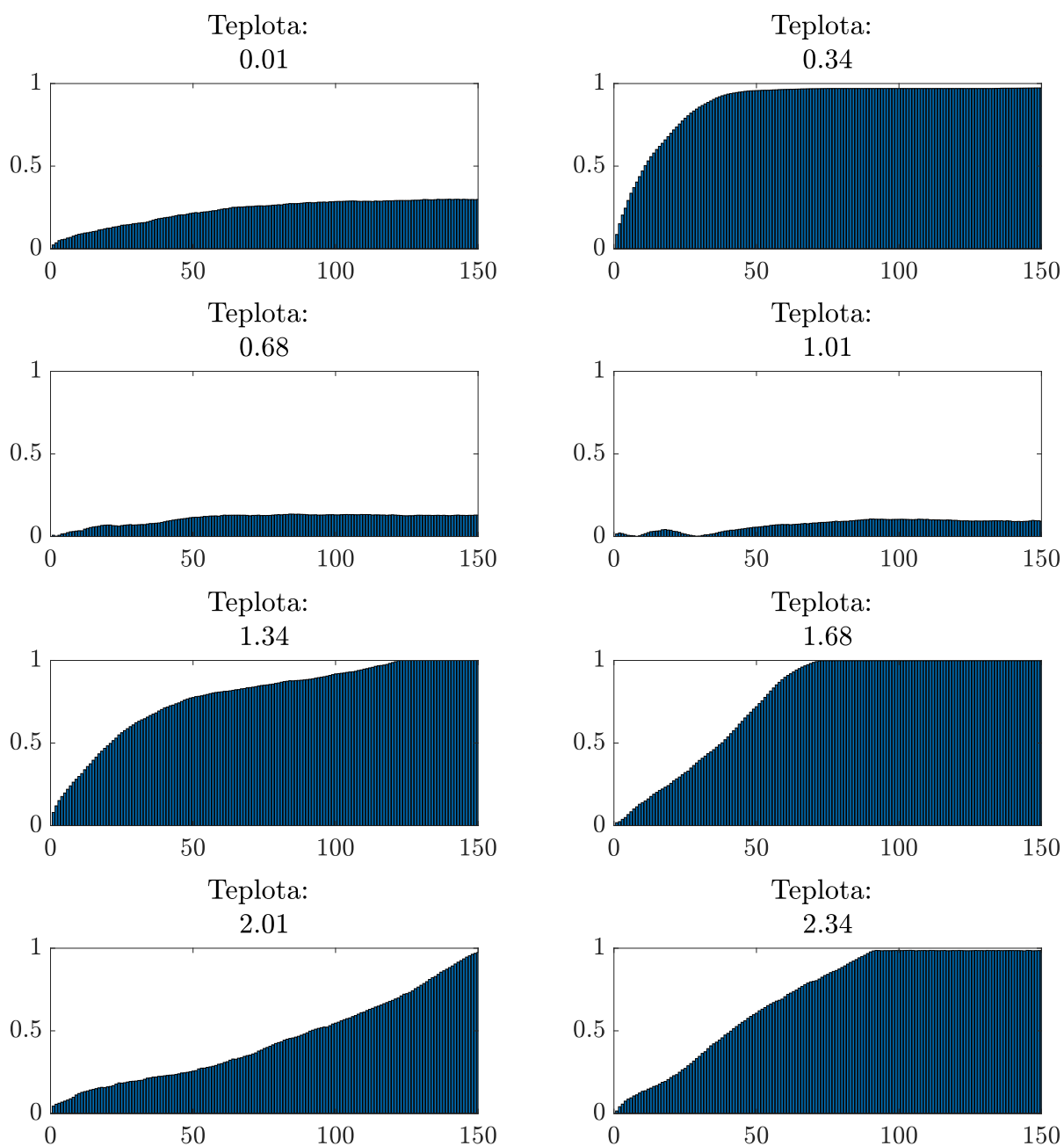
3.3 Simulace Isingova modelu ve 3D

V této části zobrazíme některé výsledky ze simulací Isingova modelu ve 3D. Velikost mřížky uvažujeme $50 \times 50 \times 50$. Zobrazení výsledků simulací však ve 3D není snadné. Zobrazit celý trojrozměrný stav uvažované krychle by nebylo přehledné. Proto v této části budeme zobrazovat barplot, kdy v průběhu počtu aktualizací stavu budeme vynášet absolutní velikost magnetizace, tj. na ose y budeme vynášet

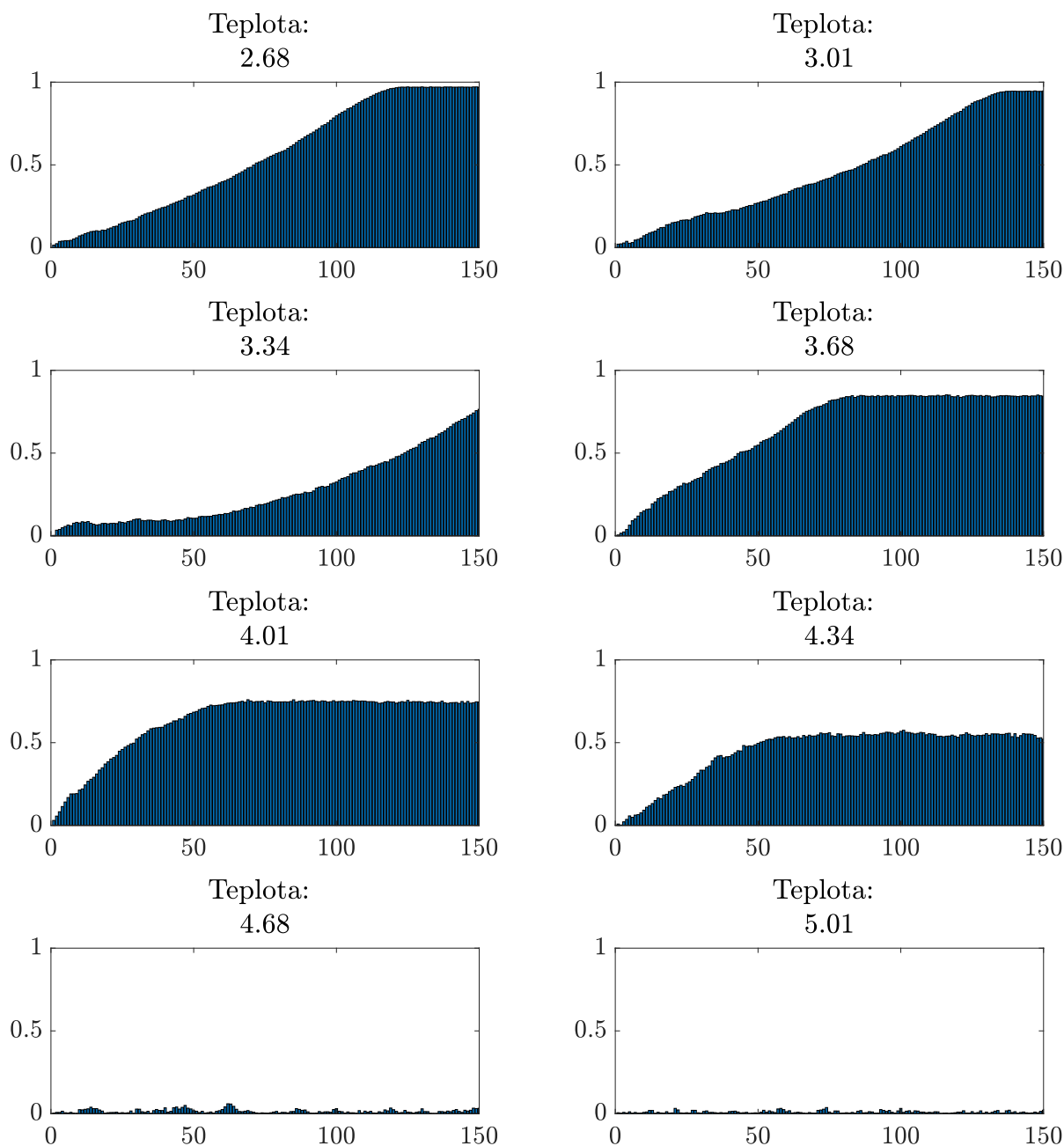
veličinu

$$m = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \sigma_i \right|. \quad (3.1)$$

Takto definovaná magnetizace je v souladu s definicí z [28]. Zobrazíme tedy následující výsledky.



Obrázek 3.10: Simulace Isingova modelu ve 3D (teploty 0.01 –2.34).



Obrázek 3.11: Simulace Isingova modelu ve 3D (teploty 2.68–5.01).

Z těchto výsledků nevidíme žádný přesvědčivý závěr. Hodnota magnetizace pro různé teploty ne naznačuje, že by existovala jasná hranice (hodnota kritické teploty), která by značila změnu chování látky. V těchto konkrétních simulacích sice pro teploty 0,34, 1,34 nebo 1,68 systém dospěl do stavu s magnetizací rovnou 1, avšak pro teploty 0,01, 0,68 nebo 1,01 se systém ustálil s magnetizací podstatně nižší. Při detailnějším zkoumání výsledné prostorové konfigurace jsme zjistili, že systém utvoří části, které mají shodný spin. V závislosti na poměru mezi zastoupením kladných a záporných spinů poté vyjde konkrétní hodnota magnetizace.

Výsledky těchto simulací názorně korespondují s obrázkem 3.14, ze kterého již půjde kritická teplota vyčíst. Současně v části 3.5 bude prezentován jiný způsob zobrazení simulací ve 3D.

3.4 Kritická teplota pomocí simulací

V této části zkusíme pomocí simulací nalézt přibližný průběh kritické teploty pro Isingův model v 1D a také ve 2D.

Magnetizaci m pomocí numerických simulací můžeme vypočítat dle (3.1) jako

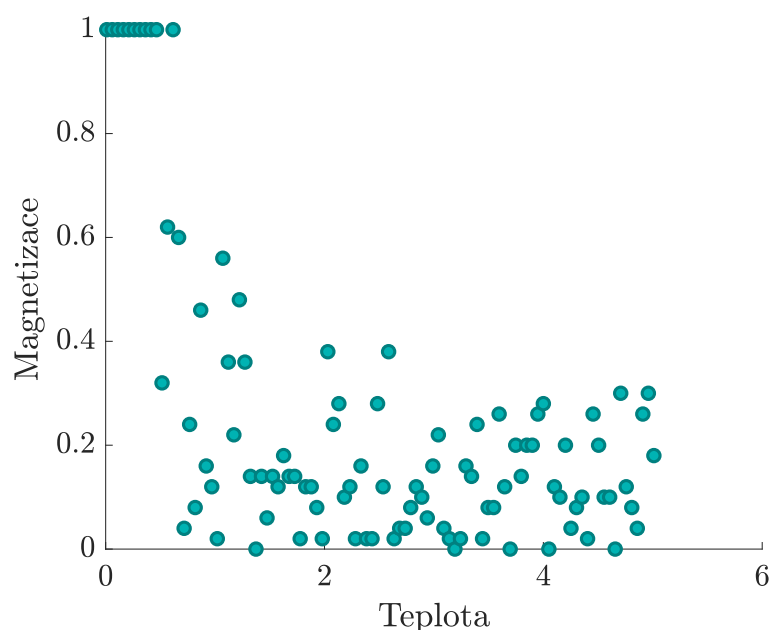
$$m = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \sigma_i \right|,$$

kde σ_i je hodnota spinu i -té částice a N je celkový počet částic. Magnetizaci m lze tedy chápat jako průměrnou absolutní hodnotu spinu na jednu částici.

Provedeme tedy simulace Isingova modelu v příslušných dimenzích.

3.4.1 Kritická teplota v 1D

Simulace v jedné dimenzi provedeme ve shodě s předchozími simulacemi pro 100 částic na přímce. Tyto simulace současně provedeme pro 100 teplot ekvidistančně rozdělující interval $[0.01, 5.01]$. Pro tyto teploty vypočítáme příslušné hodnoty magnetizace dle definičního vztahu (3.4). Simulaci provedeme s počtem aktualizací 500000, neboť pro zvyšující se počet aktualizací nedocházelo ke zlepšení. Výsledky lze nalézt na následujícím obrázku 3.12.



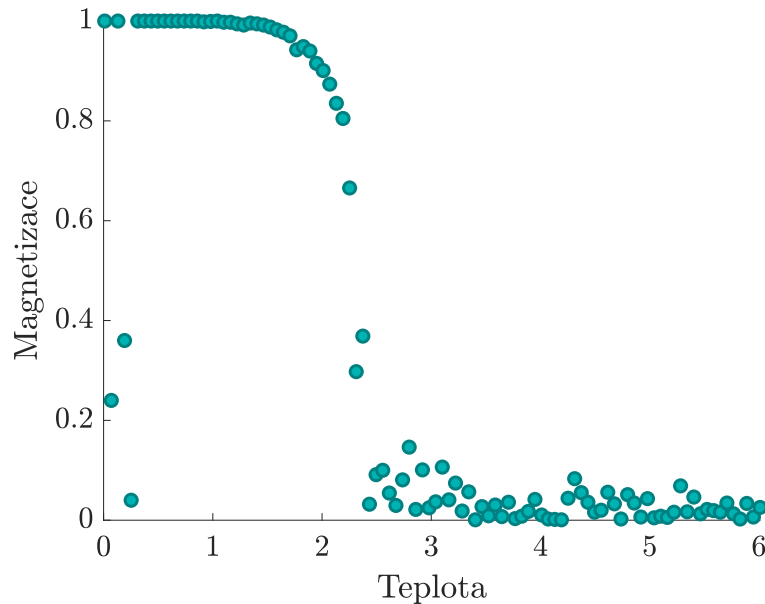
Obrázek 3.12: Simulace kritické teploty pro model v 1D.

Vidíme, že dle zmíněné teorie v části 1.3 nelze nalézt pro hodnoty $T > 0$ kritickou teplotu (srovnání s obrázkem 1.4).

3.4.2 Kritická teplota ve 2D

Simulace pro dvourozměrný Isingův model provedeme pro velikost mřížky 50×50 , a to kvůli lepším výsledkům. Počet aktualizací na rozdíl od předchozího jednorozměrného případu budeme uvažovat 100000000. Teploty, pro které budeme simulovat a počítat magnetizaci, vybereme opět jako 100

ekvidistantně rozdělených hodnot v intervalu $[0.01, 6.01]$. Výsledky těchto simulací lze nalézt na následujícím obrázku 3.13.



Obrázek 3.13: Simulace kritické teploty pro model ve 2D.

Z tohoto obrázku lze vidět, že zatímco pro teplotu nižší než 2 K je hodnota magnetizace m téměř konstantně rovna 1. V intervalu mezi hodnotami 2 a 3 se však chování systému změní a od teploty 3 se hodnota magnetizace blíží nule. Kritická teplota tedy dle simulací vychází přibližně okolo hodnoty 2,5, respektive o trochu nižší.

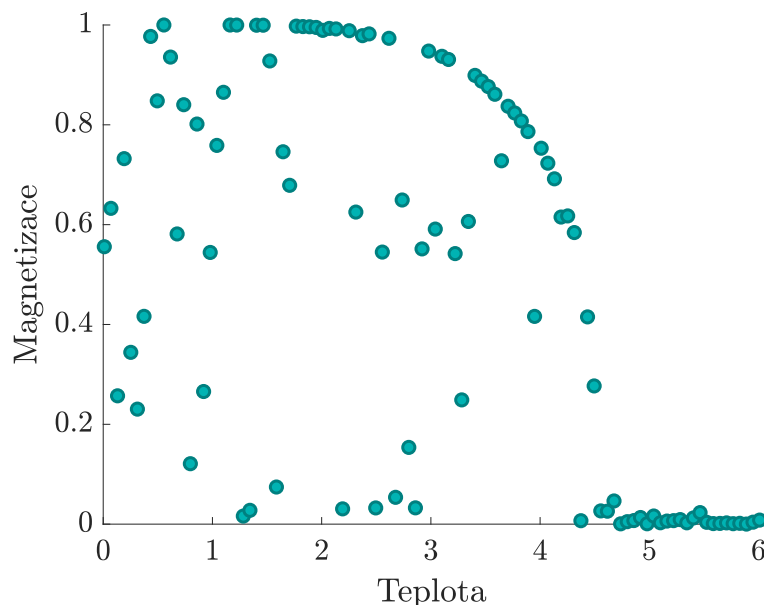
Tento výsledek nyní porovnáme s teoretickou kritickou teplotou T_C prezentovanou v části 1.6. Víme tedy, že teoretická hodnota této kritické teploty je pro $k_B = J = 1$ rovna

$$T_C = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \doteq 2.27. \quad (3.2)$$

Závěr ze simulací tedy velmi pěkně odpovídá přibližné hodnotě teoretické kritické teploty. Současně také výsledky odpovídají výsledkům v [29] nebo [30, 31].

3.4.3 Kritická teplota ve 3D

Simulace pro Isingův model ve 3D provedeme pro velikost mřížky $50 \times 50 \times 50$ a teploty v intervalu $[0.01, 6.01]$, který rozdělíme ekvidistantně na 100 teplot. Všechny simulace provedeme pro počet aktualizací 120000000. Výsledky těchto simulací lze nalézt na obrázku 3.14.



Obrázek 3.14: Simulace kritické teploty pro model ve 3D.

Z obrázku vidíme, že simulačně jsme schopni nalézt přibližnou hodnotu kritické teploty, kterou v našem případě můžeme určit přibližně jako 4,5. Opět výsledky odpovídají [29, 32].

Avšak značný rozdíl oproti modelu ve 2D zde je. Zatímco ve dvourozměrných simulacích dochází ke konvergenci ke stacionárnímu stavu téměř vždy (pro hodnoty velmi blízké teplotě $T = 0$ – výrazně menší než kritická teplota), pro model ve 3D dochází často u stálení systému do stavu s nenulovou magnetizací, ovšem hodnota magnetizace se neblíží hodnotě 1. Na druhou stranu, magnetizace pro teplotu větší než odhadovanou kritickou teplotu se přesvědčivě blíží hodnotě $m = 0$. Z tohoto tedy vyvozujeme, že kritickou teplotu pro třírozměrný model lze nalézt simulačně, i když exaktní řešení ve 3D se nalézt nepodařilo.

3.5 Simulace modelu ve 3D pomocí obdoby totální variace

V této části stručně ukážeme a okomentujeme druhý možný způsob zobrazení výsledku simulací. V předchozí části 3.3 jsme se snažili zkoumat, pro jaké hodnoty teplot se systém ustálí ve stavu s hodnotou magnetizace rovno jedné. Ukázalo se však, že veličina magnetizace definovaná v (3.1) na základě těchto simulací neumožňuje nalezení kritické teploty, která charakterizuje změnu chování látky. Proto se v této části pokusíme simulace pro příslušné teploty popsat veličinou pojmenovanou jako *magnetizace pomocí obdoby totální variace*. Tuto veličinu budeme označovat jako m_{TV} a definujeme ji jako

$$m_{TV} = \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} \max(\sigma_i \sigma_j ; 0), \quad (3.3)$$

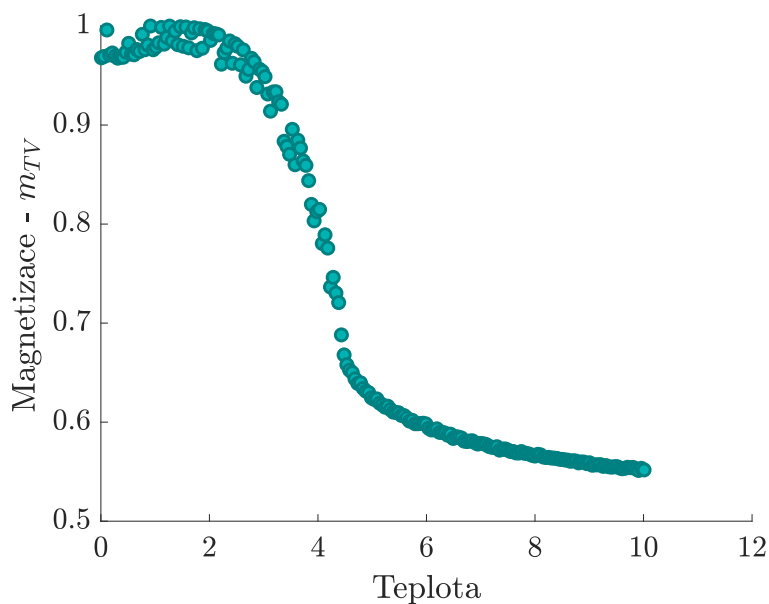
kde N značí počet částic v systému. Jinými slovy – budeme se zaměřovat na to, kolik se v systému nalézá přechodů mezi částicemi s opačným spinem. Pokud totiž mají dvě sousední i -tá a j -tá částice shodný spin, přispívají do součtu v (3.3) hodnotou +1. Pokud však mají spin rozdílný, jejich příspěvek je nulový. Pokud by se tedy výsledná hodnota $m_{TV} = 1$, značilo by to, že spiny všech N uvažovaných částic jsou shodné. Pokud by naopak $m_{TV} = 0$, znamenalo by to, že systém se nachází v konfiguraci

„prostorové šachovnice“ – u částic by se pravidelně střídaly hodnoty +1 a -1. Teoretická hodnota m_{TV} proto leží v intervalu $[0, 1]$. Proved' me ovšem ještě následující úvahu.

Pokud bychom uvažovali náhodnou konfiguraci N částic, předpokládáme, že dvě částice mají shodnou hodnotu spinu s pravděpodobností $\frac{1}{2}$; se stejnou pravděpodobností pak mají opačný spin. Na základě toho očekáváme, že náhodná konfigurace bude mít hodnotu $m_{TV} = \frac{1}{2}$. Pokud se tedy systém bude blížit s m_{TV} k hodnotě 0,5, pak budeme tuto konfiguraci považovat za neuspořádanou, tj. náhodnou. Pro naše experimenty tedy očekáváme, že hodnota m_{TV} bude ležet uvnitř intervalu $[0, 0.5]$.

3.5.1 Výsledky simulací ve 3D pomocí obdoby totální variace

Simulace v této části budeme provádět se stejným nastavením jako v části 3.4.3, tedy s velikostí mřížky $50 \times 50 \times 50$ a teplotami v intervalu $[0.01, 6.01]$, který rozdělíme opět ekvidistantně na 100 teplot. Všechny simulace provedeme pro počet aktualizací 120000000. Rozdílem ovšem bude, že místo magnetizace definované podle (3.1) budeme vynášet veličinu m_{TV} definovanou dle (3.3). Výsledky těchto simulací je možné vidět na následujícím obrázku 3.15.



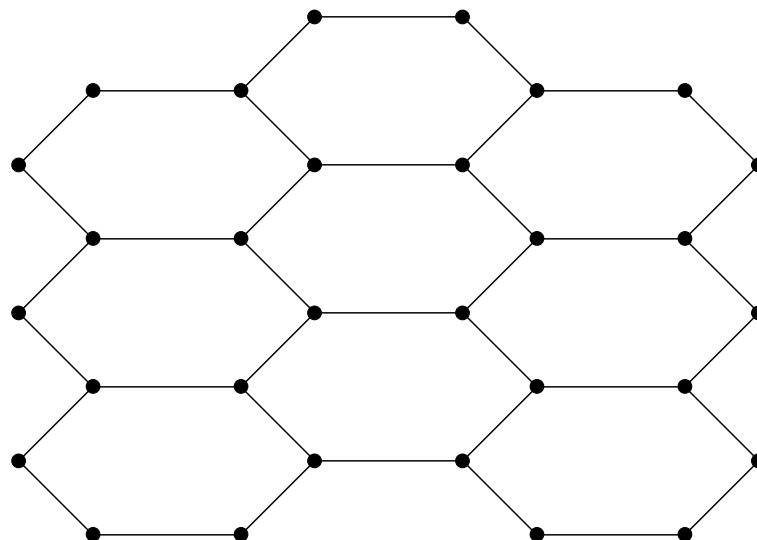
Obrázek 3.15: Simulace Isingova modelu ve 3D pomocí totální variace.

Z těchto výsledků vidíme, že již nedochází k problému popsanému v části 3.3. Pro teploty nižší než cca 3 se hodnota m_{TV} blíží hodnotě 1. Poté až do teploty cca 5 značně klesá až k $m_{TV} = 0.6$ a dále již klesá jen velmi pozvolna. Tento závěr dobře odpovídá závěru z části 3.4.3, kdy jsme určili kritickou teplotu přibližně okolo hodnoty 4,5. Současně to také odpovídá úvaze provedené na začátku této části 3.5.

3.6 Simulace ve 2D – hexagonální mřížka

V této části se pokusíme provést simulace Isingova modelu ve 2D na jiné mřížce než čtvercové, a to na hexagonální mřížce. V této konfiguraci má každá částice právě 3 hrany s ostatními vrcholy grafu.

Uvažujeme také periodickou podmínku na okraje. Část takové konfigurace lze vidět na následujícím obrázku.

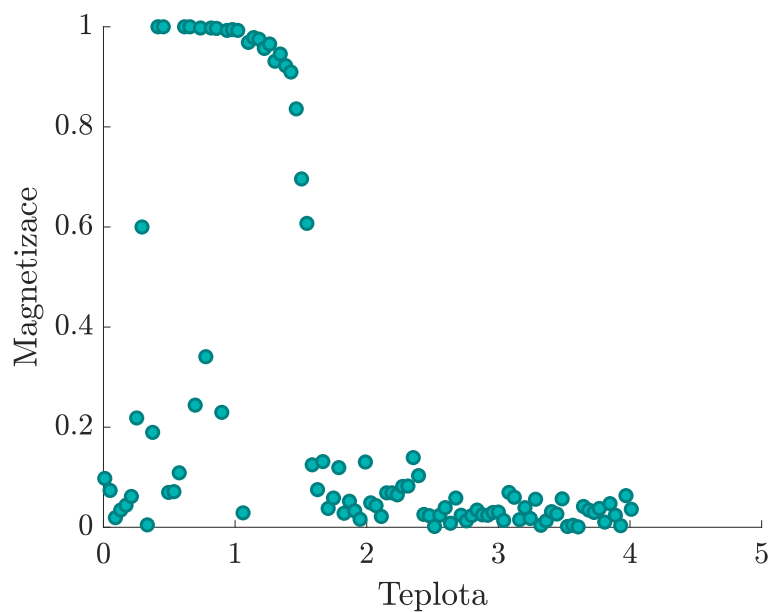


Obrázek 3.16: Ukázka hexagonální mřížky.

Na takovéto mřížce tedy budeme provádět simulace Isingova modelu. Jelikož se vizualizace takovéto mřížky nebude snadno provádět, vykreslíme pouze graf, na kterém vyneseme magnetizaci konkrétní konfigurace, která se opět vypočítá jako

$$m = \frac{1}{N} \left| \sum_{i=1}^N \sigma_i \right|.$$

Simulace provedeme pro 100 hodnot teploty v intervalu $[0.01, 6.01]$, který opět rozdělíme ekvidistantně. Pro každou teplotu provádíme 10^8 aktualizací. Výsledky je možné vidět na následujícím obrázku 3.17.

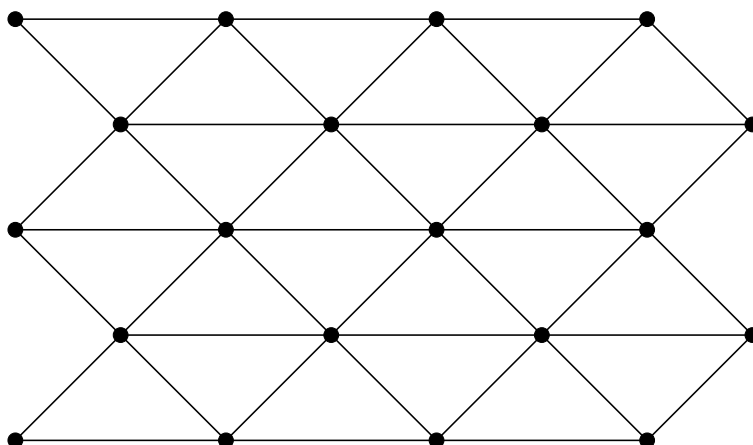


Obrázek 3.17: Kritická teplota Isingova modelu ve 2D s hexagonální mřížkou.

Stejně jako v případě dvourozměrné verze na čtvercové mřížce lze z obrázku 3.17 vyčíst přibližnou hodnotu kritické teploty, a to $T_C \doteq 1.5$, což odpovídá [29]. Pro některé hodnoty teploty menší než T_C obdobně jako v předchozích případech dochází k neustálení ve stavu s hodnotou magnetizace rovno jedné, nýbrž na hodnotě výrazně menší. V hexagonální mřížce má každá částice 3 vazby, což je o jednu méně než v mřížce čtvercové. Současně nám také kritická teplota poklesla na hodnotu cca 1.5 oproti původní kritické teplotě pro čtvercovou mřížku, která měla hodnotu 2.26.

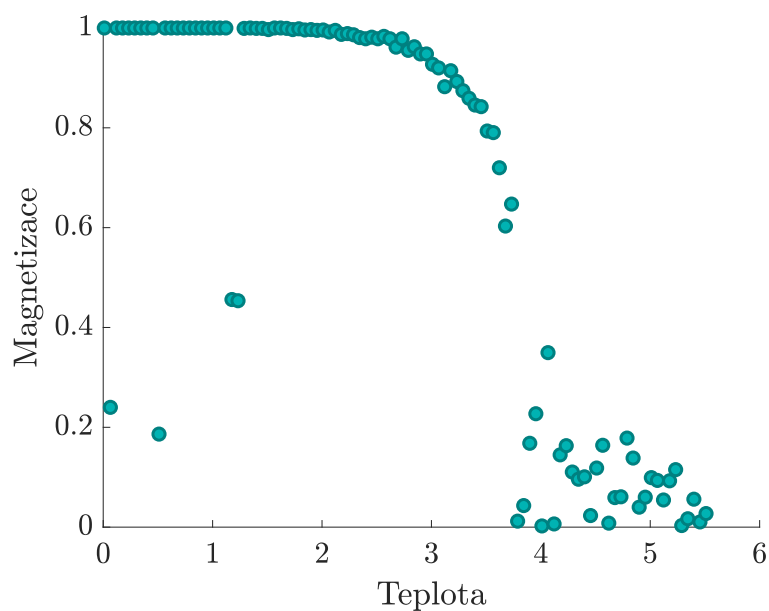
3.7 Simulace ve 2D – triangulární mřížka

Druhou mřížkou jinou než čtvercovou ve dvourozměrné verzi bude mřížka triangulární. Každá částice v této konfiguraci má s ostatními vrcholy právě 6 hran. Opět uvaužujeme periodickou podmínku na okraje mřížky. Náhled části triangulární konfigurace lze nalézt na následujícím obrázku 3.18.



Obrázek 3.18: Ukázka triangulární mřížky.

Simulace na této mřížce provedeme se stejnými parametry jako pro mřížku hexagonální – výpočet bude proveden pro 100 teplot v intervalu $[0.01, 6.01]$, který opět rozdělíme ekvidistantně. Pro každou teplotu provádíme 10^8 aktualizací. Vynášet budeme znovu magnetizaci počítanou dle předpisu (3.6). Dosažené výsledky je možné zhlédnout na obrázku 3.19.



Obrázek 3.19: Kritická teplota Isingova modelu ve 2D s triangulární mřížkou.

Opět z výsledků simulací můžeme určit přibližnou hodnotu kritické teploty. Pro triangulární mřížku vychází tedy přibližně $T_C \doteq 3.8$, což opět ve srovnání s [29] velmi odpovídá. Opět se v simulacích vyskytly teploty, pro které systém neskončil v ustáleném stavu s hodnotou magnetizace rovno jedné. Současně také pro teploty větší než T_C nedochází v případě magnetizace k tak pěknému přiblížení se nule, jak tomu bylo v případě čtvercové nebo hexagonální mřížky.

Závěr

Tato diplomová práce na téma Isingova modelu feromagnetizace látek pojednává o několika úkolech vyplývajících ze zadání této práce. Prvním z těchto úkolů bylo nastudovat řešení Isingova modelu v závislosti na dimenzi této úlohy. V jedné dimenzi byl představen přímočarý postup, který je známý již mnoho desítek let. V případě dvourozměrné verze byla prvním představeným řešením ne příliš známá kombinatorická metoda, která spočívá v rozkladu mřížky na přípustné grafy a následné sčítání přes tyto grafy. Tento postup byl detailně vysvětlen a diskutován. Druhým řešením byla známá metoda představená již v první polovině 20. století. Tento postup byl doveden do stavu, kdy by po vyřešení funkcionální rovnice byl rovněž obdržen výsledek Isingova modelu na čtvercové mřížce. Tato práce se však již řešením této rovnice nezabývala. Dále také existuje domněnka, že exaktní řešení ve 3D neexistuje, proto jsme se tímto řešením nezabývali. Tuto domněnku se však nepodařilo doposud potvrdit ani vyvrátit. Všechna zmíněná řešení lze nalézt v kapitole 1. V těchto řešeních jsme využili široké spektrum matematických disciplín, jako je lineární algebra, funkcionální analýza, teorie grafů, markovské řetězce atd.

Dalším úkolem bylo seznámit se s metodami Markov Chain Monte Carlo. Stručné seznámení proběhlo v části 2. Tyto teoretické poznatky byly následně aplikovány v kapitole 3 v rámci simulací Isingova modelu.

Simulační část byla rozdělena do několika částí. Prvním z úkolů této části byla vizualizace simulací na čtvercové mřížce v závislosti na dimenzi. Pro modely v 1D i 2D byly zobrazeny získané konfigurace jak v závislosti na teplotě systému, tak v závislosti na počtu kroků v metodě Markov Chain Monte Carlo. Pro model ve 3D byl za účelem větší názornosti a přehlednosti vybrán způsob zobrazování magnetizace pomocí totální variace v tomto systému. Ta charakterizuje uspořádanost systému – hodnota 1 znamená, že všechny částice v systému mají stejnou hodnotu spinu. Hodnota 0 by naopak znamenala, že žádné dvě sousední částice nemají shodný spin – částice mají hodnotu spinu „střídavě prostorové šachovnice“. Z logických úvah pak můžeme odvodit, že pro náhodnou konfiguraci by se měla tato totální variace rovnat hodnotě 0,5, neboť v tomto systému budou mít dvě sousední částice stejný spin s pravděpodobností 0,5.

Druhým úkolem pro simulace bylo numerickými experimenty získat přibližnou hodnotu kritické teploty systému a porovnat ji se získanou teoretickou hodnotou. Jelikož v jedné dimenzi neexistuje nenulová kritická teplota, zaměřili jsme se na dvourozměrnou verzi. Provedené experimenty potvrdily, že teoretická hodnota kritické teploty Isingova modelu ve 2D $T_C \doteq 2,26$ pěkně odpovídá výsledkům získaným pomocí simulací. V případě třírozměrné verze Isingova modelu poté bylo na základě klasické magnetizace i magnetizace definované pomocí totální variace zjištěno a potvrzeno, že kritická teplota ve 3D je přibližně rovna hodnotě 4,5.

Posledním úkolem simulační části bylo otestovat Isingův model na jiné než čtvercové mřížce ve 2D. Pro tento úkol byly vybrány hexagonální a triangulární konfigurace. Z důvodu obtížné vizualizace byly pro takovéto systémy zobrazeny grafy, které vynášejí hodnotu magnetizace pro příslušné teploty. Z těchto simulací vyšel zajímavý výsledek. V hexagonální mřížce má každá částice právě 3 sousedy,

ve čtvercové jsou to čtyři sousedé a v triangulární mřížce je to sousedů šest. Stejným způsobem vyšla i kritická teplota pro tyto konfigurace – nejmenší kritická teplota, přibližně 1,5, vyšla pro hexagonální mřížku, naopak vyšší hodnotu než pro čtvercovou mřížku má mřížka triangulární, tj. přibližně 3,8. Dalším zajímavým úkolem by tedy mohlo být provedení simulací pro vícevázné konfigurace a následné testování hypotézy, zda kritická teplota závisí lineárně (či jinou závislostí) na vaznosti částic.

Závěrem této práce tedy můžeme prohlásit, že dosažené výsledky spolehlivě naplnily vytyčené cíle. Hlavním cílem této práce bylo zabývat se Isingovým modelem na teoretické úrovni, tj. provést teoretické řešení tohoto modelu. Tímto teoretickým řešením jsme mysleli nalézt předpis pro magnetizaci, případně pro volnou energii na částici. Toto řešení jsme poté podpořili numerickými simulacemi. Těmito simulacemi jsme našli příslušné kritické teploty, které odpovídaly teoretickým zjištěním. Práce se tedy stala komplexní a nezaměřila se pouze na určitou část matematiky.

Literatura

- [1] S. G. Brush, *History of the Lenz-Ising model*. Reviews of Modern Physics 39, 1967, 883-893.
- [2] W. Lenz, *Beitrag zum Verständnis der magnetischen Erscheinungen in festen Körpern*. Phys. Zeitschrift 21, 1920, 613-615.
- [3] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*. Z. Physik 31, 1925, 253–258.
- [4] H. A. Kramers, G. H. Wannier, *Statistics of the two-dimensional ferromagnet. Part I + II*. Physical Review 60(3), 1941, 252-276.
- [5] E. Montroll, *Statistical Mechanics of Nearest Neighbor Systems*. J. Chem. Phys. 9, 1941, 706.
- [6] J. Ashkin, W. E. Lamb, Jr., *The Propagation of Order in Crystal Lattices*. Physical Review 64, 1943, 159.
- [7] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*. Physical Review, Series II 65 (3–4), 1944, 117–149.
- [8] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*. Elsevier, 2016.
- [9] C. Thompson, *Mathematical Statistical Mechanics*. Princeton University Press, 1972.
- [10] K. Huang, *Statistical Mechanics (2nd edition)*. John Wiley & Sons, 1987.
- [11] G. M. Viswanathan, *Onsager's solution of the 2-D Ising model: The combinatorial method*. [online]. [cit. 25.4.2022]. Dostupné z: <https://gandhiviswanathan.wordpress.com/2015/01/09/onsagers-solution-of-the-2-d-ising-model-the-combinatorial-method/>.
- [12] M. Kac, J. C. Ward, *A combinatorial solution of the two-dimensional Ising model*. Physical Review 88(6), 1952, 1332-1337.
- [13] S. Sherman, *Combinatorial Aspects of the Ising Model for Ferromagnetism. I.* J. Math. Phys. 1, 1960, 202.
- [14] G. A. T. F. da Costa, A. L. Maciel, *Combinatorial formulation of Ising model revisited*. Revista Brasileira Ensino de Física 25, 2003, 49-61.
- [15] B. M. McCoy and T.T. Wu, *Two-Dimensional Ising Model*. Harvard University Press, 1973.
- [16] G. F. Newell, E. W. Montroll, *On the Theory of the Ising Model of Ferromagnetism*. Reviews of Modern Physics 25(2), 1953, 353-389.
- [17] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics, vol. II*. Basic Books, 2011.

- [18] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*. Elsevier Books, 1980.
- [19] R. Bellman, *Introduction to Matrix Analysis (2nd edition)*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
- [20] Howard E. Haber, *Notes on the Matrix Exponential and Logarithm*. [on-line]. [cit. 25.4.2022]. Dostupné z: <http://scipp.ucsc.edu/~haber/webpage/MatrixExpLog.pdf>.
- [21] R. Horn, C. Johnson, *Matrix Analysis (2nd ed.)*. Cambridge University Press, 2012.
- [22] S. Voleti, *Krammers-Wannier Duality in Lattice Systems*. Department of Physics, University of Toronto, 2018.
- [23] R. Savit, *Duality in field theory and statistical systems*. Reviews of Modern Physics 52, 1980, 453–487.
- [24] D. A. Levin, Y. Peres, E. L. Wilmer, *Markov chains and mixing times (Second Edition)*. Providence: American Mathematical Society, 2017.
- [25] S. Brooks et al., *Handbook of Markov Chain Monte Carlo*. CRC press, 2011.
- [26] I. Murray, *Advances in Markov chain Monte Carlo methods*. University of London, University College London (United Kingdom), 2007.
- [27] S. Brooks, *Markov chain Monte Carlo method and its application*. Journal of the royal statistical society: series D (the Statistician) 47.1, 1998, 69-100.
- [28] Carlo A. Gonano et. al., *Definition for Polarization P and Magnetization M Fully Consistent with Maxwell's Equations*. Progress in Electromagnetics Research B. 64, 2015, 83-101.
- [29] S. Eltinge, *Numerical Ising Model Simulations on Exactly Solvable and Randomized Lattices*. Massachusetts Institute of Technology, 2015. Dostupné z: <http://web.mit.edu/8.334/www/grades/projects/projects15/EltingeStephen.pdf>.
- [30] I. Agarwal, *Numerical Analysis od 2-D Ising Model*. University of Bonn, 2011. Dostupné z: https://www.hiskp.uni-bonn.de/uploads/media/ising_II.pdf.
- [31] B. Liu, M. Gitterman, *The critical temperature of two-dimensional and three-dimensional Ising models*. Am. J. Phys. 71(8), 2003, 806-808.
- [32] A. F. Sonsin et al., *Computational Analysis of 3D Ising Model Using Metropolis Algorithms*. Journal of Physics: Conference Series 630 012057, 2015.