

# This is a Very Important Title!

Person McSomething  
(Dated: November 22, 2021)

Vi finner bruker Monte Carlo metoden og metropolis algoritmen for å finne egenskaper ved Ising modellen. Vi finner at våre numeriske beregninger har god overenstemmelse med de analytiske verdiene for  $\langle \epsilon \rangle$  og  $\langle |m| \rangle$ , men avviker litt for de utledede verdiene  $C_v$  og  $X$ . Vi finner også at for  $T = 1 J/k_B$  så faller systemet ned til grunntilstanden, men ekvivalenstilstanden endrer seg ved høyere temperaturer. For temperaturer mellom  $T = 2,1 J/k_B$  og  $T = 2,4 J/k_B$  så finner vi varmekapasiteten for forskjellige gitterstørrelse og bruker reultatet til å komme fram til at  $T_c (L = \infty) \approx 2,28 J/k_B$ .

## I. INTRODUKSON

Store systemer er ofte styrt av en kaotisk sammling med tilfeldige hendelser. Det blir da fort umulig å kartlegge alle mulige tilstander og sannsynligheten for hver enkelt av dem. Derimot, ved å kun se på et utvalg av tilstander så kan man finne egenskaper ved systemet uten å ha hele bildet. For eksempel ved simuleringer av smittespredning så bruker man slike metoder for store systemer med mange mulige hendelser. I denne artikkelen så skal vi finne forskjellige egenskaper ved et system ved hjelp av Monte Carlo metoden. Lenz-Ising modellen er oppkalt etter de tyske fysikerene Ersnt Ising og Willhelm Lenz, som ble oppfunnet av Willhelm Lenz i 1920. Modellen går ut på at man har et gitte rmed spinn som kan tilfeldig flippe opp eller ned. Vi skal se på hvordan forskjellige egenskaper til et materiale modellert av Ising modellen endrer seg med tempeartur og størrelse. I teori delen så intorduserer vi det nødvendige bakgrunnsstoffet, i metod-edelen så ser vi mer konkret på hva vi skal gjør og i resultat og diskusjonsdelen så presenterer og diskuterer vi hva vi fant.

## II. TEORI

Vi skal regne for tilstander  $\mathbf{s}$  gitt som et 2D  $L \times L$  gitter med partikler  $s_i$  som enten kan ha tilstanden spinn opp eller spinn ned. Vi setter at dersom  $s_i$  har tilstanden spinn opp så er  $s_i = +1$  og hvis  $s_i$  har spinn ned er  $s_i = -1$ . Vi vil bruke periodiske grensebetingelser slik at naboen til  $s_1$  som er lengst til venstre vil ha  $s_L$  som er lengst til høyre som sin venstre nabo. Det samme gjelder da lodrett, så den øverste spinnet vil ha den nederste parikkelen som sin nabo. I dette forsøket antar vi at ved å bruke Hamiltonianeren på en slik state gir energien

$$E(\mathbf{s}) = -J \sum_{\langle kl \rangle} s_k s_l$$

hvor  $\langle kl \rangle$  betyr at den går gjennom det energien mellom hvert spinn og deres naboer én gang og teller ikke dette to ganger.  $J$  vil være koblingskonstant.  $N = L^2$  altså størrelsen av  $\mathbf{s}$  slik at vi går gjennom hele matrisen.

Vi har også energien per spin  $\epsilon$  gitt ved

$$\epsilon(\mathbf{s}) = \frac{E(\mathbf{s})}{N}$$

som vi må bruke når vi skal sammenligne matriser av ulike størrelser.

Vi trenger også magnetisaseringen gitt ved

$$M(\mathbf{s}) = \sum_i s_i$$

så vi da får en magnetisasjon per spin som

$$m(\mathbf{s}) = \frac{\mathbf{s}}{N}$$

Vi skal også finne forventingsverdiene  $\langle \epsilon \rangle$  og  $\langle |m| \rangle$ . Forventingsverdien i dette systemet er gitt ved

$$\langle a \rangle = \sum_i^N a(\mathbf{s}_i) p(\mathbf{s}_i)$$

hvor vi her går gjennom alle mulige tilstander  $\mathbf{s}_i$  som systemet av denne størrelsen kan være i.  $Z$  er her partisjonsfunksjonen gitt som

$$Z = \sum_i^N e^{\beta \mathbf{s}_i}$$

hvor  $\beta = \frac{1}{k_B T}$ .

Vi skal også finne den spesifikke varmekapasiteten

$$C_V = \frac{1}{k_B T^2} (\langle \epsilon \rangle^2 - \langle \epsilon^2 \rangle)$$

og den susceptibiliteten

$$\chi = \frac{1}{k_B T} (\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2 - \langle |m| \rangle^2)$$

så vi må også finne  $\langle \epsilon^2 \rangle$  og  $\langle m^2 \rangle$ .

Når vi flipper et spinn så skal vi også kunne få en energiendring gitt ved

$$\Delta E = E(\mathbf{s}_{etter}) - E(\mathbf{s}_{før}) = E(\mathbf{s}_a) - E(\mathbf{s}_b)$$

Utvider vi det får vi

$$\Delta E = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_{ak} s_{la} - (-J) \sum_{\langle kl \rangle}^N s_{kb} s_{lb}$$

$$\Delta E = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_{ka} s_{la} - s_{kb} s_{lb}$$

La oss si at vi flipper spinnet  $s_{i,j}$  hvor  $i$  representerer den vannrette posisjonen og  $j$  den lodrette. Da kun  $s_{kb} s_{lb}$  kun endre seg hvor  $s_{i,j}$  er en av faktorene. Ellers vil  $s_{kb} s_{lb} = s_{ka} s_{la}$  og her vil  $s_{ka} s_{la} - s_{kb} s_{lb} = 0$ . Vi står da kun igjen med

$$\Delta E = -J \left( \begin{array}{l} s_{i,j-1} s_{i,j_a} - s_{i,j-1} s_{i,j_b} + s_{i+1,j} s_{i,j_a} - s_{i+1,j} s_{i,j_b} \\ + s_{i,j+1} s_{i,j_a} - s_{i,j+1} s_{i,j_b} + s_{i-1,j} s_{i,j_a} - s_{i-1,j} s_{i,j_b} \end{array} \right)$$

Vi kan så ta ut  $(s_{i,j_a} - s_{i,j_b})$  og få

$$\Delta E = -J(s_{i,j_a} - s_{i,j_b})(s_{i,j-1} + s_{i+1,j} + s_{i,j+1} + s_{i-1,j})$$

Vi ser at  $s_{i,j_a} - s_{i,j_b}$  er enten  $+1 - (-1) = 2$  når den skifter fra spin ned til opp og  $-1 - (+1) = -2$  når den skifter fra spin opp til ned. Ellers må vi også naboledene som har fem muligheter

$$1 + 1 + 1 + 1 = 4$$

$$1 + 1 + 1 - 1 = 2$$

$$1 + 1 - 1 - 1 = 0$$

$$1 - 1 - 1 - 1 = -2$$

$$-1 - 1 - 1 - 1 = -4$$

Så vi får altså 5 mulige forskjeller i energi

**Finne  $T_c(L = \infty)$  med finite datasett**

Lars Onsager sien analytiske resultater gir oss relasjonen:

$$T_c(L) - T_c(L = \infty) = aL^{-1}$$

Om vi ganger med  $L$  på begge side så får kan vi skrive at

$$T_c(L) L = T_c(L = \infty) + a. \quad (1)$$

Som vil si at  $T_c(L = \infty)$  er gitt ved stigningstallet til linjen gitt ved  $T_c(L) L$ .

### III. METODE

#### Analytisk mot numeriske resultater

Vi sammenlikner de numeriske resultatene vi får for  $T = 1, 0$   $J/k_B$  og  $L = 2$  med de analytiske resultatene vi har for de samme verdiene. Ved å se på hvor godt det stemmer overnes kan vi se om de numeriske bergningene vi gjør er akseptable.

#### Forventingsverdier for forskjellige $L$

Først så parallelliserer vi koden vår over temperaturene med OpenMP, og tester den med å sette opp en liten tegning hvor den kjører over 10 temperaturer og går gjennom 5000 Monte Carlo sykluser med  $L = 10$ . Vi tar så videre å kjører for  $L = 40$ ,  $L = 60$  og  $L = 100$  over 500 000 Monte Carlo sykluser med 100 temperatursteg for  $L = 40$  og  $L = 60$ , men 50 steg for  $L = 100$ . For de to første størrelsene så ser vi på  $T = [2.1, 2.4]$   $J/k_B$  og for  $L = 100$  så setter vi  $T = [2.2, 2.4]$   $J/k_B$ .

### IV. RESULTATER

#### Analytiske mot numeriske resultater

For  $L = 2$  og  $T = 1, 0$   $J/k_B$  så fikk vi at analytisk så er

$$\langle \epsilon \rangle = -1,996$$

$$\langle m \rangle = 1$$

$$C_v \approx 0,032$$

$$X = 0,007$$

For de numeriske bergningene for samme  $L$  og  $T$  så fikk vi at:

$$\langle \epsilon \rangle \approx -1,995$$

$$\langle m \rangle \approx 1$$

$$C_v \approx 0.04$$

$$X \approx 0.005$$

### Forventningsverdie for energi og magnetisme per sinn

Vi fikk grafene **Figure 1** og **Figure 2** for  $T = 1 \text{ J/}$  hvor vi ser hvordan forventingsverdiene utvikler seg m hensyn på antall Monte Carlo sykluser. For  $T = 2, 4 \text{ J/k}_B$  så fikk vi plottene **Figure 3** og **Figure 4**.

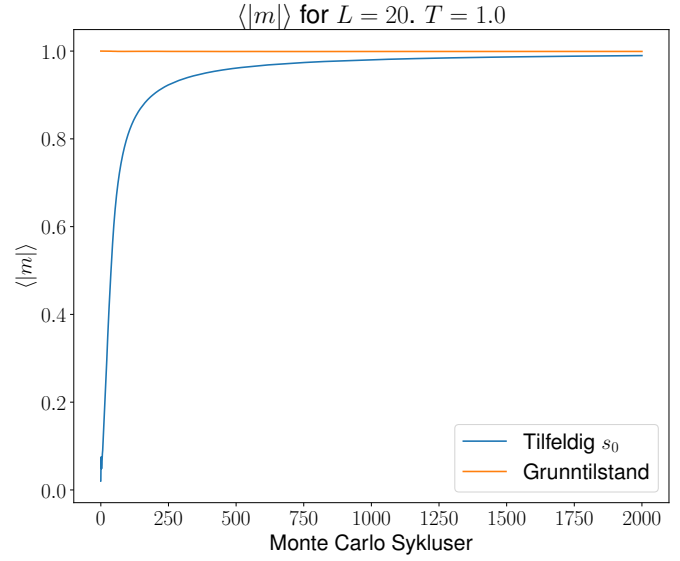


Figure 2. Forventningsverdien til magnetisering per spinn for  $T = 2.4 \text{ J/k}_B$  og  $L = 20$ . Den tilfeldige  $s_0$  starter på en høy energi imens grunntilstanden starter med alle spinn opp for å ha den laveste energien.

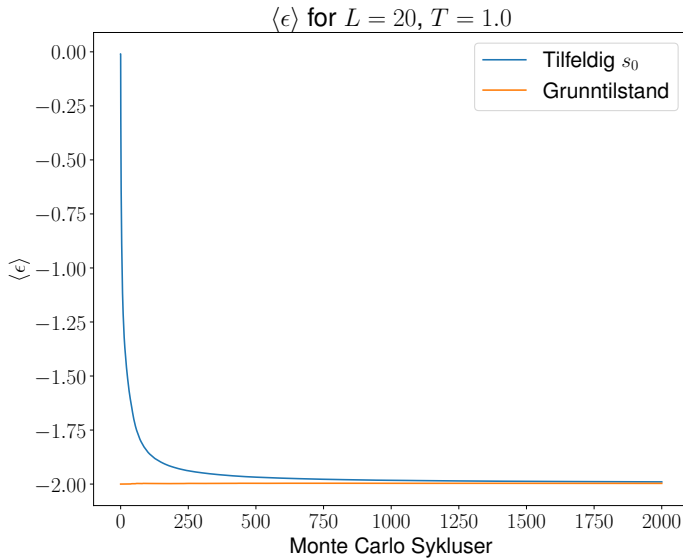


Figure 1. Forventningsverdien av energien per spinn etter et antall Monte Carlo sykluser. Ser at den som starter fra tilfeldig spinnmatrikse ender opp på samme steds som grunntilstandsmatrisen. Vi bruker det til å estimere burn-in tiden til systemet.

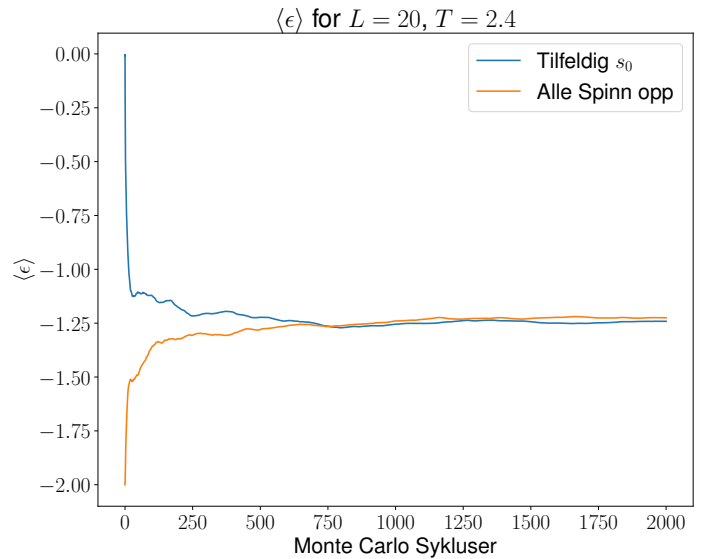


Figure 3. Forventningsverdien av energien per spinn etter et antall Monte Carlo sykluser. Her er temperatur  $T = 2.4 \text{ J/k}_B$  og  $L = 20$ . Selv om for høyere temperaturer så vil ikke alle spinn opp være den laveste energitilstanden så bruker vi den som en referansetilstand.

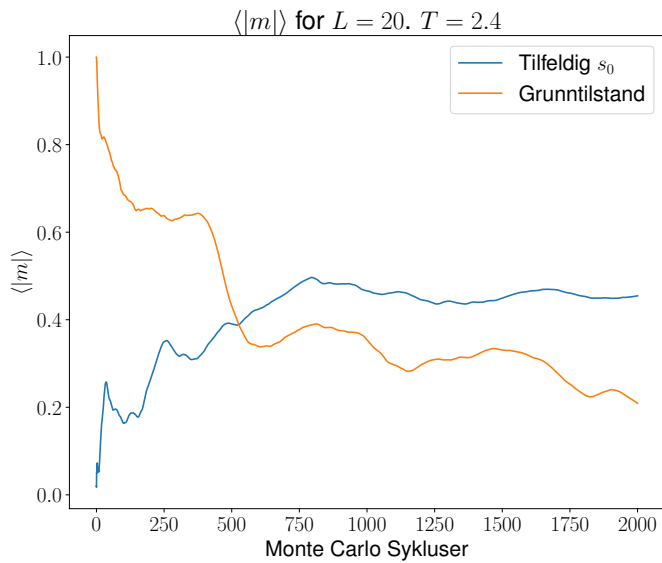


Figure 4. Forventningsverdien til magnetisering per spinn. Her er  $T = 2,4 J/k_B$  og  $L = 20$ . Vi har brukt 500 000 Monte Carlo sykluser for hver instans av Ising modellen med forskjellige temperaturer.

For  $T = 1,0 J/k_B$  og  $L = 20$ , så fikk vi gjenkonstruert sannsynlighetsfordelingen som vist i ??.

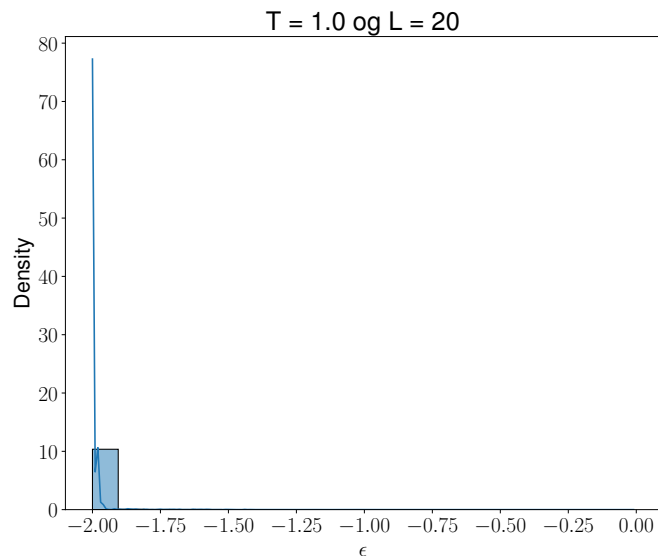


Figure 5. Histogram og følgende sannsynlighetsfordeling for  $T = 1,0 J/k_B$  og  $L = 20$ .

For  $T = 2,4 J/k_B$  og  $L = 20$  så fikk vi grafen i ??:

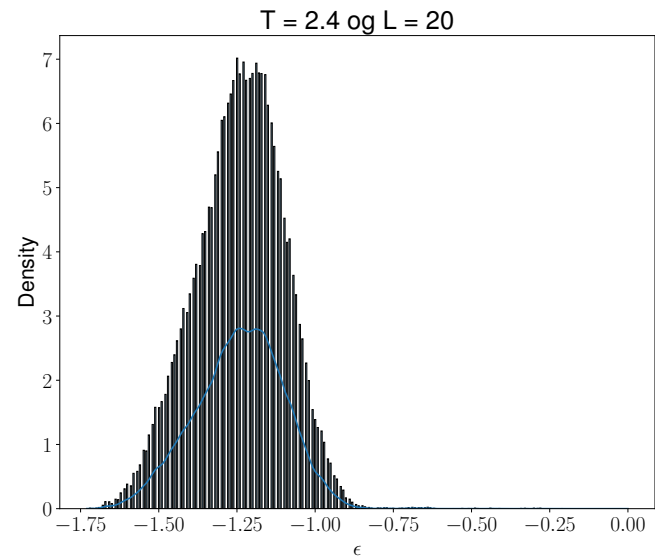


Figure 6. Histogram og følgende sannsynlighetsfordeling for  $T = 2,4 J/k_B$  og  $L = 20$ .

### Forventningsverdier for forskjellige $L$

Ved parallelliseringen av koden så finner vi at for en kort utregning at parallelliseringen er 2,6 ganger raskere enn ikke parallellisert. Vi kjørte for  $L = 40$ ,  $L = 60$  og  $L = 100$  og fikk følgende plot for forventningsverdien av energi per spinn:

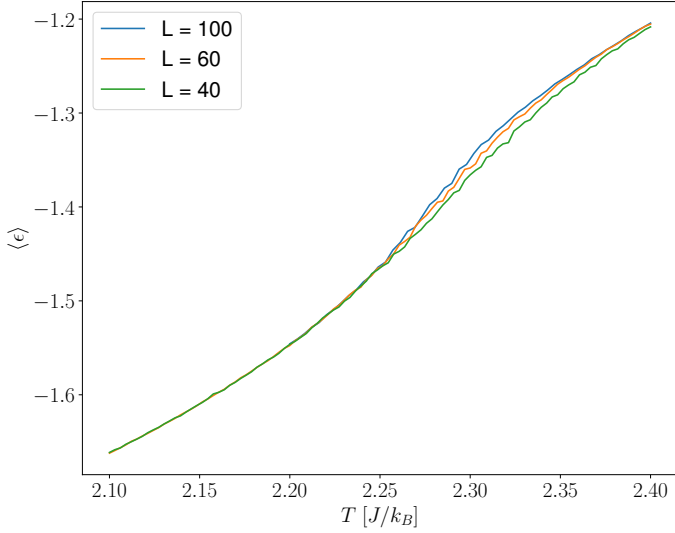


Figure 7. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventingsverdien for energi per spinn blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  kun har 50. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$ .

For  $\langle |m| \rangle$  så fikk vi:

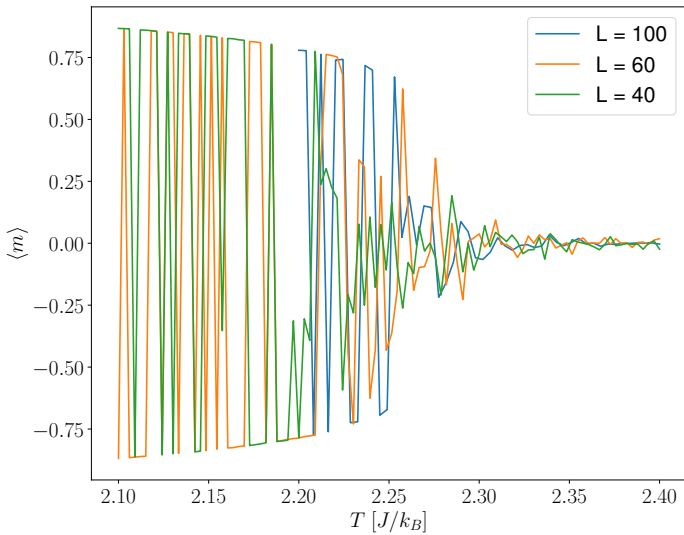


Figure 8. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventingsverdien for absoluttverdien av magnetisering per spinn blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  kun har 50. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$ .

Og for  $C_v$  (Figure 9) og  $X$  (Figure 10):

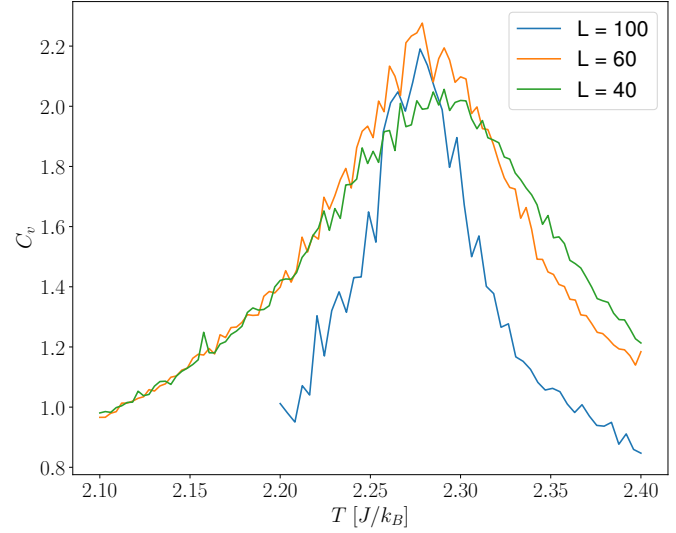


Figure 9. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventingsverdien for varmekapasiteten blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  har 50 steg. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$ .

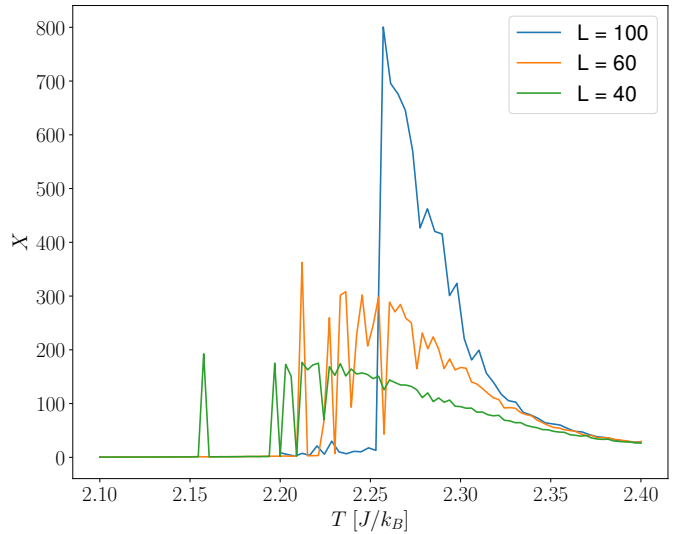


Figure 10. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventingsverdien for susceptibiliteten blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  har 50 steg. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$ .

Vi finner maksimumene til  $C_v$  for de forskjellige  $L$  og bruker likningen til  $T(L)$ , (1), for å finne  $T(L = \infty)$ , og får at:

$$T(L = \infty) \approx 2,28 J/k_B \pm 0,06 J/k_B$$

## V. DISKUSJON

De numeriske verdiene vi fikk for  $T = 1,0 J/k_B$  og  $L = 2$  stemmer godt overens med de analytiske verdiene for  $\langle \epsilon \rangle$  og  $\langle |m| \rangle$ , men avviker litt for varmekapasiteten og susceptibiliteten.

### Forventningsverdi for energi og magnetisme per sinn

Vi vet at forventingsverdien for energien per spinn skal være  $\langle \epsilon \rangle = -2 J/k_B$  ved , som vi har funnet analytisk. Det stemmer godt overens med de numeriske resultatene som vi ser i [Figure 1](#) hvor vi den tilfeldige initialtilstanden møter tilstanden med alle spinn opp ved å flate ut ved  $\langle \epsilon \rangle \approx -2 J/k_B$ . For  $T = 2.4 J/k_B$  ([Figure 3](#)) så ser vi at den derimot ikke flater ut ved  $\epsilon = -2$ , men ved  $\epsilon \approx -1.2$ , noe som vil si at ved  $T = 2.4 J/k_B$  så er ikke tilstanden med lavest energi lenger den mest sannsynlige tilstanden. Tenker det gir mening ved at siden systemet har høyere temperatur, altså høyere gjennomsnittlig energi, så vil forventingsverdien av energi per spinn også løftes opp. I plottet for  $\langle \epsilon \rangle$  ved  $T = 2.4 J/k_B$  ([Figure 3](#)) så ser vi at det er større variasjon rundt ekvivalenslinjen enn ved grafen ved  $T = 1 J/k_B$ . Det ligner på oppførselen til temperaturen til to objekter i kontakt, hvor vil se den samme økningen av variasjon ved økning av temperaturen. Magnetiseringen per spinn ser også ut til å gå mot en felles grenseverdi, men det burde her vært gjort flere Monte Carlo sykluser for å være sikker. Kan derimot være rimelig sikker på at grenseverdien ligger mellom  $\langle |m| \rangle = 0,0$  til  $\langle |m| \rangle = 0,4$ , noe som ihvertfall sier oss at magnetiseringen synker med temperaturen. Det passer med at den mest sannsynlige mikrotilstanden ikke lenger er hvor alle spinn peker opp, der magnetiseringen er størst.

Vi ser at gjenkonstruksjonen av sannsynlighetsfordelingen av  $\epsilon$  gir mening ettersom for  $T = 1,0 J/k_B$  så er  $\epsilon = -2$  den mest sannsynlige tilstanden, som sett i [Figure 1](#). For  $T = 2,4 J/k_B$  så er det større spredning, noe som gjenspeiles i variasjonen rundt ekvivalenspunktet i [Figure 3](#).

### Forventningsverdier for forskjellige $L$

Om vi sammenlikner plottet for  $\langle \epsilon \rangle(T)$  ([Figure 7](#)) med entalpien til vann som funksjon av temperatur, så ser vi at grafen vi har fått ligner veldig på en faseovergang hvor et materiale smelter hvor vi har en svak økning ved  $T \approx 2,25 J/k_B$  og svak utflatning igjen ved  $T \approx 2,3 J/k_B$ . Tenker at faseovergangen i Ising modellen korrelerer med faseovergangen til materialer med at

flippingsfrekvensen gir samme effekt som vibrasjonen til partiklene i et materiale. Det gir da mening at vi har en overgang som ligner mest på overgangen fra solid til flytende materiale ettersom spinnene i Ising modellen ikke får en stor økning av mulige bevegelser som molekylene i et materiale gjør ved overgangen fra væske til gass. Kanskje man vil sette en slik faseovergang om man introduserte en grense hvor antall mulige spinnretninger øker, slik at spinnene får et større bevegelsesrom.

Magnetiseringen ([Figure 8](#) har stor variasjon ved temperaturer mellom  $T = 2,1 J/k_B$  til  $T = 2,25 J/k_B$ . Etter det så stabiliserer den gjennomsnittlige magnetiseringen seg rundt  $\langle \langle m \rangle \rangle = 0$ . Vi ser at magnetiseringen begynner å stabiliserer seg senere for større  $L$ , og den ser også ut til stabilisere seg raskere for større  $L$  også, men det er ikke helt tydelig med kun de tre grafene vi har. susceptibiliteten også tydelig endring ved økning av  $L$ , hvor grafen blir spissere og maksverdien ser ut til å øke eksponentielt. Det ville gitt mening siden ved påvirkning av et magnetfelt, så vil det være  $N = L^2$  spinn som bidrar til den totale magnetiseringen når alle spinnene retter seg etter det eksterne magnetfeltet. Vi ser at maksverdien til permabiliteten ser ut til å følge  $N = L^2$  for  $L = 40$  og  $L = 60$ , men ikke for  $L = 100$ , noe som ikke virker helt riktig. susceptibiliteten følger tydelig av hvor magnetiseringen begynner å stabilisere seg og hvor lang tid den bruker på å komme seg ned til  $\langle m \rangle = 0$ .

For varmekapasiteten ([Figure 9](#)) så forventet vi egentlig at maksimumet til grafen skulle øke og bli spissere ved økning av  $L$ , men kan være at det er fordi vi har for få temperatursteg. Men siden  $T_c$  ikke er avhengig av hvor høyt topppunktet til grafen er, så bruker vi dataene for  $L = 100$  i beregningene av  $T(L = \infty)$  også. Med det så fikk vi en verdi nærme den analytiske verdien funnet av Lars Onsager:  $T(L = \infty) \approx 2,269 J/k_B$ .

## VI. KONKLUSJON

Vi har sett på hvordan forventningsverdiene  $\langle \epsilon \rangle$ ,  $\langle |m| \rangle$  og egenskapene  $C_v$  og  $X$  endrer seg med temperatur og størrelse til en Ising modell. Ved sammenlikning av numeriske og analytiske resultater for et lite system så hadde vi god overenstemmelse. For  $T = 1 J/k_B$  så fant vi at en tilfeldig initialtilstand vil falle ned til grunntilstanden med nettsen alle spinn opp, hvor for høyere temperaturer den vil falle til en tilstand med ikke kun spinn opp. Ved å ta å se på fordelingen av forskjellige energier så har vi gjenkonstruert en tilnærmet sannsynlighetsmodell for  $T = 1 J/k_B$  og  $T = 2.4 J/k_B$ . For å finne grensenverdien til den kritiske temperaturen har vi sett på økningen av maksverdien til varmekapasiteten for  $L = 40$ ,  $L = 60$  og  $L = 100$ . Med våre numeriske beregninger så fikk vi at  $T_c(L = \infty) \approx 2,269 J/k_B$ .

### Appendix A: $2 \times 2$ gitter

Vi starter med å finne alle mulige tilstander for et  $2 \times 2$  gitter, som gitt i figur A

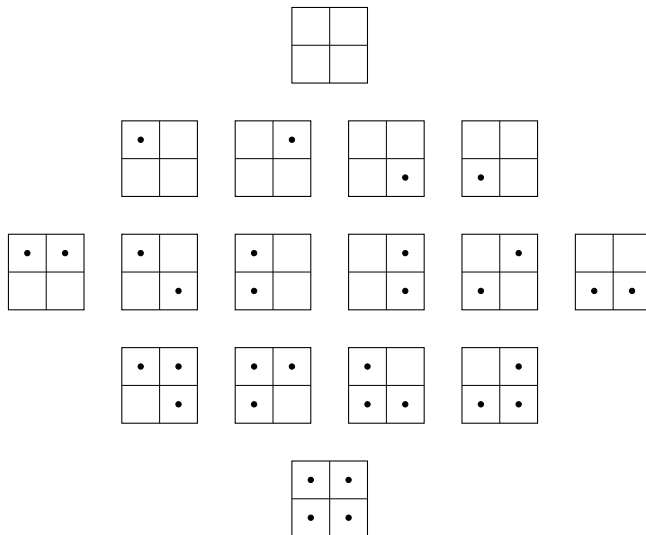


Figure 11. Alle tilstander som er mulig i et  $2 \times 2$ -gitter. En rute med en prikk i seg betyr at dette spinnet har spin opp altså  $+1$ , mens en blank rute betyr at dette spinnet har spin ned, altså  $-1$

Vi ser altså at det er 16 forskjellige muligheter tilstander i et  $2 \times 2$ -gitter, men noen av disse er symmetriske. Alle fire tilstandene med ett spin opp er symmetriske, det samme gjelder for ett spin ned. Alle tilstandene for to spin opp hvor to av dem er naboer er har også en symmetri og det samme med de to diagonale. Vi kan derfor si at de som er symmetriske har samme total energi.

Så var det magnetiseringen. Siden magnetiseringen er gitt som