

# Ising modellen og Monte Carlo metoden

Carl Petter Duedahl and Henrik Modahl Breitenstein  
(Dated: November 22, 2021)

Vi 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 resultatet 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 samling 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 gitter med 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 introduserer vi det nødvendige bakgrunnsstoffet, i metod-edelen så ser vi mer konkret på hva vi skal gjøre og i resultat og diskusjonsdelen så presenterer og diskuterer vi hva vi fant.

## II. TEORI

### A. Definerer av tilstanden og dens egenskaper

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 den 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 spinn  $\epsilon$  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 magnetiseringen gitt ved

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

så vi da får en magnetisasjon per spinn 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

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

og susceptibiliteten

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

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

$$\Delta E = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_{a_k} s_{l_a} - (-J) \sum_{\langle kl \rangle}^N s_{k_b} s_{l_b}$$

$$\Delta E = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_{k_a} s_{l_a} - s_{k_b} s_{l_b}$$

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

$$\Delta E = -J \begin{pmatrix} s_{i,j-1} s_{i,j_a} - s_{i,j-1} s_{i,j_b} \\ + s_{i+1,j} s_{i,j_a} - s_{i+1,j} s_{i,j_b} \\ + s_{i,j+1} s_{i,j_a} - s_{i,j+1} s_{i,j_b} \\ + s_{i-1,j} s_{i,j_a} - s_{i-1,j} s_{i,j_b} \end{pmatrix}$$

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 spinn ned til opp og  $-1 - (+1) = -2$  når den skifter fra spinn 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.

## B. Markov-kjede og Metropolis-Hastings

Vi skal anta at tilstandene utvikler seg som en Markov-kjede. Det betyr at den sannsynligheten for den neste tilstanden som den utvikler seg i avhenger kun av den gamle tilstanden. Vi kan ikke vite sannsynligheten, men vi vil bruke en Markovkjede Monte Carlo algoritme til dette. Den kan forklares som i punktene under:

1. Ha en tilstand  $x_i$
2. Lag en ny kandidattilstand  $x'$  ved hjelp av en forslags sannsynlighetsfordelingsfunksjon (pdf) som bare avhenger av  $x_i$ .

3. Test  $x'$  mot en akseptansregel.

4. Hvis  $x'$  blir akseptert:  $x_{i+1} = x'$   
Hvis  $x'$  ikke blir akseptert  $x_{i+1} = x_i$

5. Repeter for  $x_{i+1}$  og oppover.

Vi skal bruke en Metropolis-Hastingsalgoritme som gir oss at sannsynligheten for å akseptere den nye verdien er gitt som

$$A(x_i \rightarrow x') = \min(1, \frac{p(x')}{p(x_i)} \frac{T(x' \rightarrow x_i)}{T(x_i \rightarrow x')})$$

hvor  $p(x_i)$  og  $p(x')$  er sannsynligheten for å finne systemet i den tilhørende tilstanden.  $\frac{T(x' \rightarrow x_i)}{T(x_i \rightarrow x')}$  er vår forslagssannsynlighetsfunksjon for at  $x'$  går over til  $x_i$  delt på forslagssannsynligheten for at  $x_i$  blir  $x'$ . I vårt tilfelle vil vi anta at disse to er like sannsynlige slik at

$$T(x' \rightarrow x_i) = T(x_i \rightarrow x')$$

Da kan vi ha vår akseptanssannsynlighet som

$$A(x_i \rightarrow x') = \min(1, \frac{p(x')}{p(x_i)})$$

## C. Burn-in tiden

I starten vil vi sannsynligvis se at tilstanden faller ganske kraftig i starten før den mykner ut. Denne delen kalles burn-in tiden og er tiden før den nærmer seg en stabil fase. Selv om vi i teorien burde ha med alle mulige faser for å få riktige forventningsverdier, vil vi droppe verdiene som kommer innen denne tiden. Dette er fordi disse verdiene er så store at det skaper en så stor vekt, mens det kan være like mange verdier av motsatte verdier som ikke blir sjekket. Dessuten er det en mye større sannsynlighet for å være i den stabile enn den ustabile fasen og siden vi ikke sjekker alle, så utelukker vi de som driver den numeriske forventningsverdien bort fra den reelle.

## D. Parallellisering

I dette prosjektet vil vi bruke parallellisering på datamaskinen for å spare tid. Parallellisering er kort forklart at man bruker flere kjerner på datamaskinen til å gjøre operasjoner samtidig. Datamaskinen deler altså oppgaven i mindre oppgaver som den kjører i parallelle tråder istedenfor å bare kjøre den i serie i en enkelt tråd. Vi definerer nå  $T_1$  som tiden det vil ta med en enkelt tråd og  $T_n$  som tiden det vil ta med  $n$  tråder. Da får vi at tidsforksjellen blir  $\frac{T_1}{T_n}$ . I et ideelt tilfelle hvor maksinen ikke bruker noe tid på å fordele oppgaver og alle tråder er like effektive har vi:

$$T_n = \frac{T_1}{n}$$

Da får vi at

$$\frac{T_1}{T_n} = \frac{T_1}{\frac{T_1}{n}} = n$$

Men vanligvis får vi ikke et slikt ideelt tilfelle. Uansett vil ikke engang en uendelig parallellisering gjøre det uendelig fort. Det vil finnes en grense. Vi vil kunne ha noen utregninger som ikke kan parallelliseres, men må gjøre i serie, gitt ved  $1 - f$ . På en enkelt tråd vil dette gå som

$$T_1 = (1 - f)T_1 + fT_1$$

, mens det  $n$  tråder vil ha tiden

$$T_n = (1 - f)T_1 + f\frac{T_1}{n}$$

. Vi får da at økningen i hastighet ved parallellisering blir

$$\frac{T_1}{T_n} = \frac{T_1}{(1 - f)T_1 + f\frac{T_1}{n}} = \frac{1}{(1 - f) + \frac{f}{n}}$$

Når vi da har uendelig med tråder vil vi få

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{T_1}{T_n} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{(1 - f) + \frac{f}{n}} = \frac{1}{1 - f}$$

og vi ser at det er en minimumsgrense for hvor fort parallellisering kan gå. I våres tilfeller har vi bare 4 eller 8 kjerner og like mange tråder, så vi vil ikke være i nærheten av å nå dette tallet.

### E. Finne $T_c(L = \infty)$ med endelig datasett

Lars Onsager sine 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

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

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

## III. METODE

### A. Monte Carlo syklusen

Vi lager først en kode som enten kan starte med alle spinn opp eller starte med alle spinnene tilfeldig fordelt mellom opp og ned. Herfra kan vi gjøre en Markov-kjede Monte Carlo(MCMC) ved å lage en forsøksstilstand hvor

vi flipper ett tilfeldig spinn i den forrige tilstanden og ser om denne blir akseptert. Hvis den blir akseptert gjør vi dette til den nye tilstanden. Hvis den ikke blir akseptert, forkaster vi den. Vi husker fra teorien av sannsynligheten for å akseptere spinnflipp var gitt som

$$A(s_i \rightarrow s') = \min(1, \frac{p(s')}{p(s_i)})$$

Altså dersom  $\frac{p(s')}{p(s_i)} > 1$  setter vi sannsynligheten for aksept til å bli 1 og aksepterer den uansett. Hvis  $\frac{p(s')}{p(s_i)} < 1$  trekker vi et tilfeldig tall  $A$  mellom 0 og 1. Hvis  $\frac{p(s')}{p(s_i)} > A$  aksepterer vi flippet. Hvis ikke, aksepterer vi det ikke. Vi vet at

$$p(s) = \frac{-e^{E(s)\beta}}{Z}$$

så

$$\frac{p(s')}{p(s_i)} = \frac{e^{-E(s')\beta}/Z}{e^{-E(s_i)\beta}/Z} = e^{-(E(s') - E(s_i))\beta} = e^{-\Delta E\beta}$$

og vi husker fra teorien at det bare var 5 verdier som  $\Delta E$  kunne ha. Vi kan trenger derfor kun å finne  $\Delta E$  for hver gang og ha lagret  $e^{-\Delta E\beta}$  og trekke ut hvilken vi trenger avhengig av  $\Delta E$ . Dersom  $\Delta E < 0$  ser vi at  $e^{-\Delta E\beta} > 1$  så for  $\Delta E = (-4J, -8J)$  så vil vi alltid akseptere denne energien. I dette prosjektet vil vi normalisere slik at  $[E] = J$ ,  $[T] = \frac{J}{k_B}$  osv.

### B. Analytiske 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 i Appendix A. Ved å se på hvor godt det stemmer overnes kan vi se om de numeriske bergningene vi gjør er akseptable.

### C. Burn-in tiden

Av Figure 1 ser vi fortsatt at funksjonen starter ganske langt fra en god tilstand. Derfor vil vi ikke starte på initialtilstanden, men heller etter 1000 Monte Carlo syklus. Altså etter burn-in perioden fra teoridelen. Her begynner tallene å bli mer rolige og kan være nærmere en forventningsverdi. Én Monte Carlo syklus er definert som  $L \cdot L = N$  antall forsøk på flipper.

### D. Sannsynlighetsfordelingen

Vi skal så finne sannsynlighetsfordelingen. Denne finner vi ved å lage et histogram av alle syklusene, inkludert burn-in tiden. Dette gir oss en gjenkonstruksjon av sannsynlighetsfordeling.

### E. Forventingsverdier for forskjellige $L$

Først så parallelliserer vi koden vår over temperaturene med OpenMP, og tester den med å sette opp en liten utregning hvor den kjører over 10 temperaturer og går igjennom 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  $L = 100$ . Dette gjør vi også som en slags parallellisering, da vi fordeler de forskjellige verdiene for  $L$  over flere PCer. For de to første størrelsene så ser vi på  $T = [2.1, 2.4] J/k_B$  og for  $L = 100$  så setter vi  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$ .

### F. Finne $T_c$

Nå som vi har laget verdier av varmekapasiteten ved de forskjellige temperaturene kan vi da ta toppunktet (altså hvor varmekapasiteten er på et maksimum) for hver verdi og sette disse inn for seg. Det er her fasendringen skjer og vi vil finne denne for  $L = \infty$ . Vi gjør altså en lineær regresjonsanalyse av de tre punktene og finner stigningstallet. Stigningstallet vil da være en tilnærming til den kritiske temperaturen  $T_c(L = \infty)$ .

## IV. RESULTATER

### A. 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 beregningene for samme  $L$  og  $T$  så fikk vi at:

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

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

$$C_v \approx 0.04$$

$$X \approx 0.005$$

### B. Forventningsverdier for energi og magnetisme per spinn

Vi fikk grafene [Figure 1](#) og [Figure 2](#) for  $T = 1 J/k_B$  hvor vi ser hvordan forventningsverdiene utvikler seg med hensyn på antall Monte Carlo sykluser. For  $T = 2, 4 J/k_B$  så fikk vi plottene i [Figure 3](#) og [Figure 4](#).

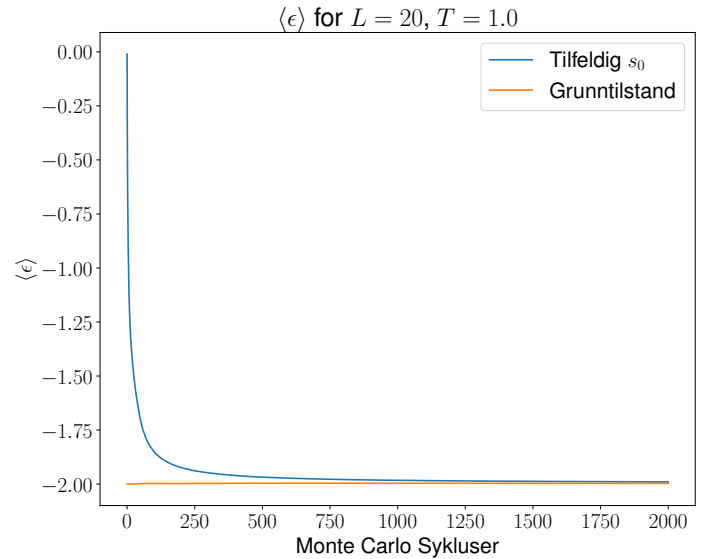


Figure 1. Forventningsverdien av energien per spinn etter et antall Monte Carlo sykluser. Ser at den som starter fra tilfeldig spinnmatrixe ender opp på samme steds som grunntilstandsmatrixen. Vi bruker det til å estimere burn-in tiden til systemet.

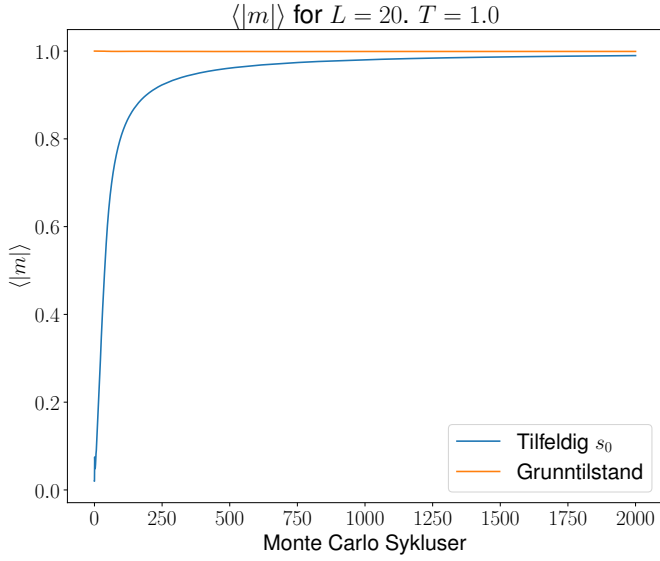


Figure 2. Forventingsverdien til magnetisering per spinn for  $T = 2.4 J/k_B$  og  $L = 20$ . Den tilfeldige  $s_0$  starter på en høy energi imens grunntilstanden starter med alle spinn opp for å ha den laveste energien.

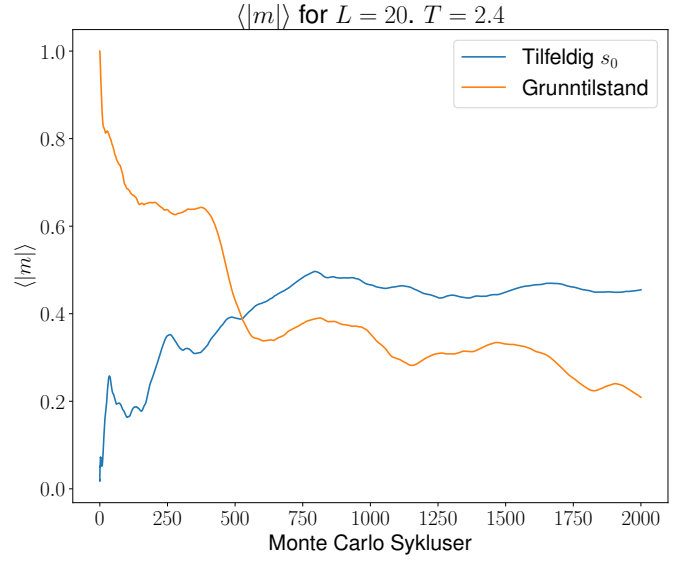


Figure 4. Forventingsverdien til magnetisering per spinn. Her er  $T = 2,4 J/k_B$  og  $L = 20$ . Vi har brukt 500 000 Monte Carlo sykluser for hver instans av Ising modellen med forskjellige temperaturer.

For  $T = 1.0 J/k_B$  og  $L = 20$ , så fikk vi gjenkonstruert sannsynlighetsfordelingen som vist i ??.

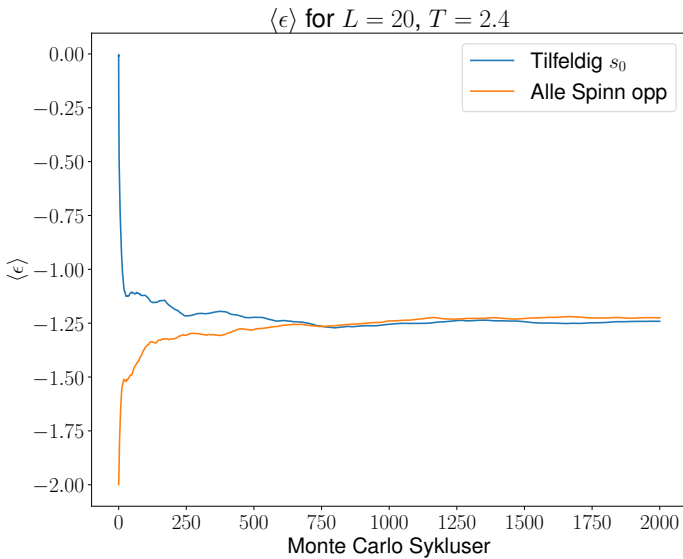


Figure 3. Forventingsverdien av energien per spinn etter et antall Monte Carlo sykluser. Her er temperatur  $T = 2.4 J/k_B$  og  $L = 20$ . Selv om for høyere temperaturer så vil ikke alle spinn opp være den laveste energitilstanden så bruker vi den som en referansetilstand.

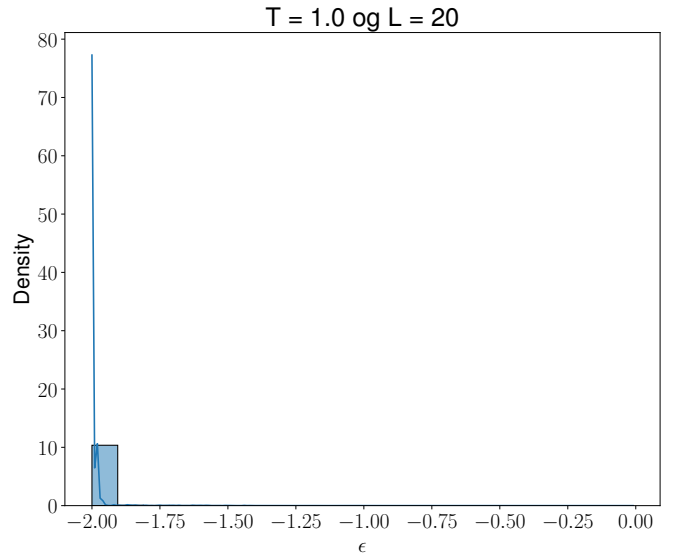


Figure 5. Histogram og følgende sannsynlighetsfordeling for  $T = 1,0 J/k_B$  og  $L = 20$ .

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

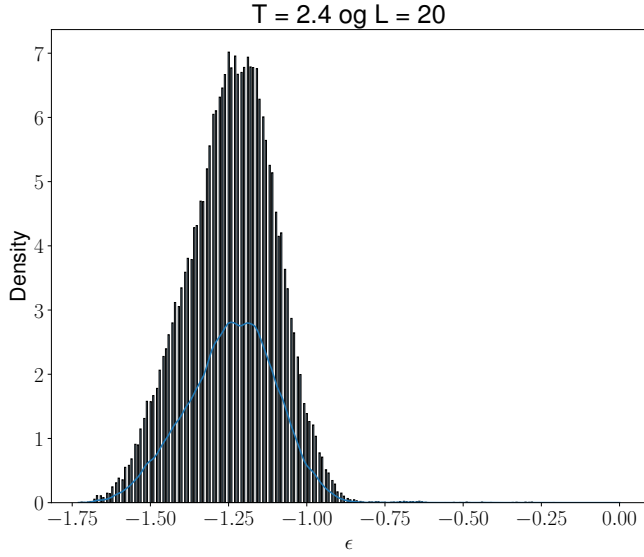


Figure 6. Histogram og følgende sannsynlighetsfordeling for  $T = 2,4 J/k_B$  og  $L = 20$ .

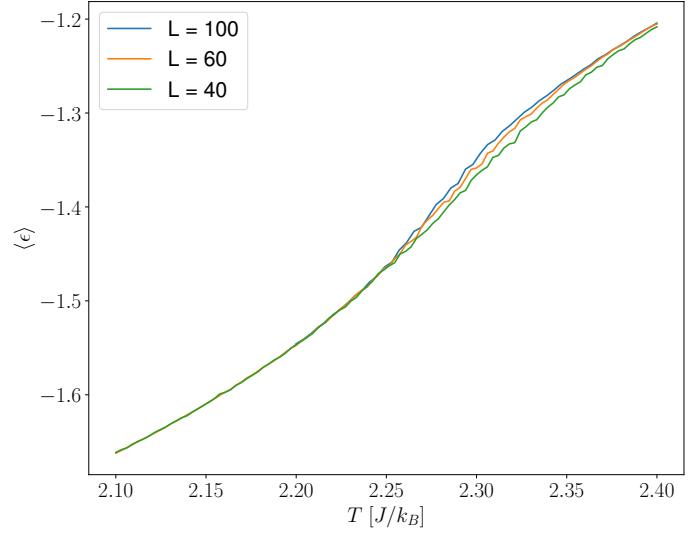


Figure 7. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventningsverdien for energi per spinn blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  kun har 50. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$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

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

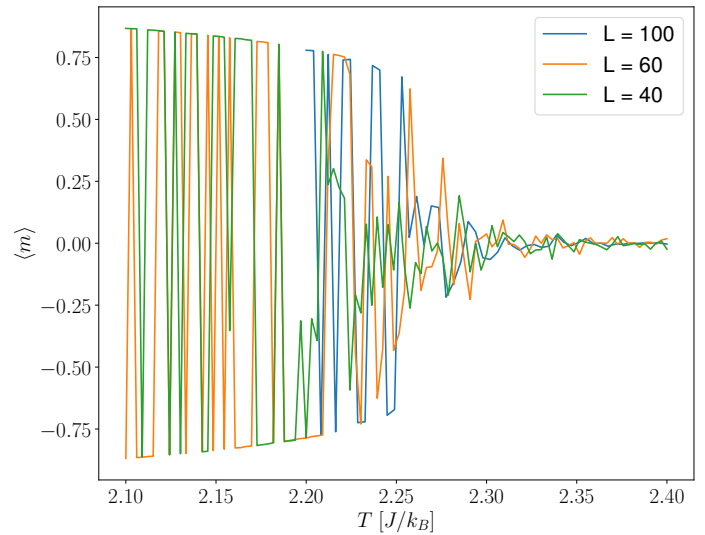


Figure 8. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventningsverdien for absoluttverdien av magnetisering per spinn blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  kun har 50. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over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

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:

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

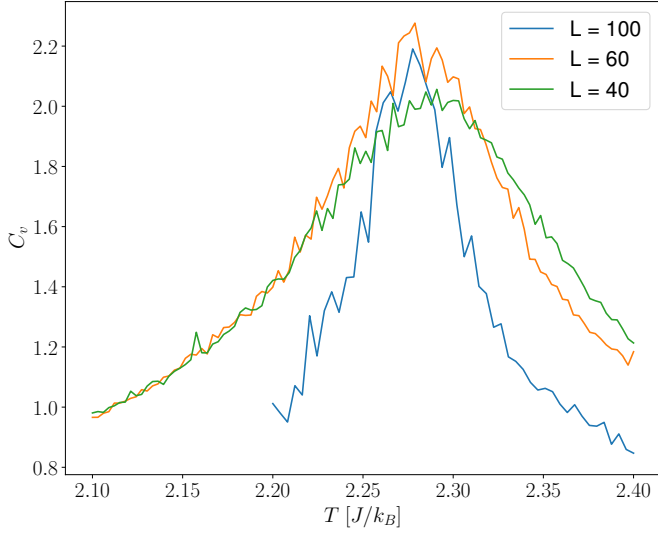


Figure 9. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventingsverdien for varmekapasiteten blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  har 50 steg. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$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

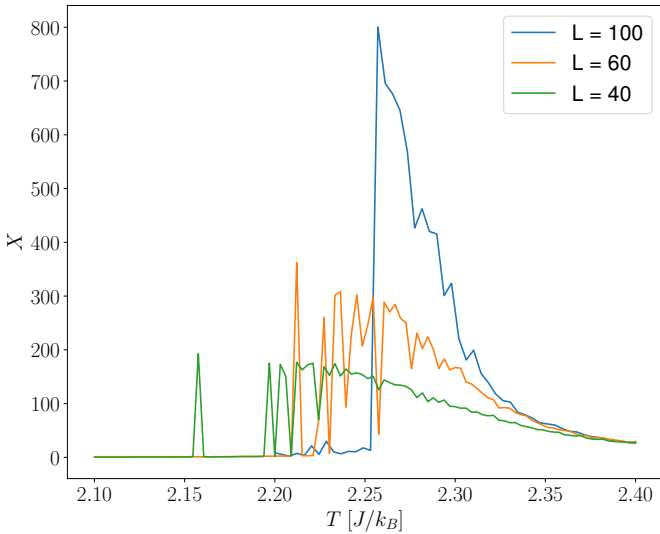


Figure 10. Vi ser på forskjellige temperaturer  $T[2.1, 2.4] J/k_B$  og ser hva forventingsverdien for susceptibiliteten blir etter 500 000 Monte Carlo sykluser.  $L = 40$  og  $L = 60$  har 100 temperatursteg imens  $L = 100$  har 50 steg. For  $L = 100$  kjørte vi også kun over  $T = [2.2, 2.4] J/k_B$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

Vi finner maksimumene til  $C_v$  for de forskjellige  $L$  og bruker likningen til  $T(L) L$ , (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  $\langle \epsilon \rangle = -2 J/k_B$ , som vi har funnet analytisk. Det stemmer godt overens med de numeriske resultatene som vi ser i [Figure 1](#) hvor vi ser 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  $T \approx 2,3 J/k_B$ .

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  $\langle m \rangle = 0$ . 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 har 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 susceptibiliteten 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 det kan være at det er fordi vi har for få temperatursteg. Men siden  $T_c$  ikke er avhengig av hvor høyt toppunktet 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 i 1944(Hjort-Jensen, 2015,s.415):  $T(L = \infty) \approx 2,269 J/k_B$ .

## VI. KONKLUSJON

Vi har sett på hvordan forventingsverdiene  $\langle \epsilon \rangle$ ,  $\langle |m| \rangle$  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 nesten 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  $T_c(L = \infty) \approx 2,28 J/k_B$ .

## REFERANSER

- Hjort-Jensen, Morten, *Computational Physics : Lecture Notes* 2015, 2015, <https://raw.githubusercontent.com/CompPhysics/ComputationalPhysics/master/doc/Lectures/lectures2015.pdf>
- Carls github repository -iFYS3150 -iProject4 <https://github.com/carlpd/FYS3150/tree/main/Project4>

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

Vi starter med å finne alle mulige tilstander for et  $2 \times 2$  gitter, som gitt i figur Figure 11

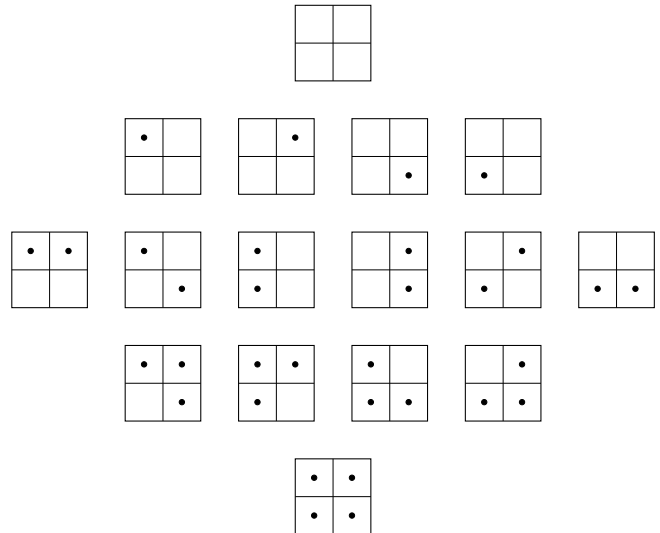


Figure 11. Alle tilstander som er mulig i et  $2 \times 2$ -gitter. En rute med en prikk i seg betyr at dette spinnet har spinn opp altså  $+1$ , mens en blank rute betyr at dette spinnet har spinn ned, altså  $-1$

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 spinn opp er symmetriske, det samme gjelder for ett spinn ned. Alle tilstandene for to spinn 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 og da trenger vi bare å finne en av disse som er symmetriske til hverandre for å finne alle. Da blir disse tilstandene også energidegenererte. Vi får da en tabell gitt som i Table I

Antall spinn opp	$E(s)$	$M(s)$	Degenerasjon
0	$-8J$	$-4$	1
1	0	$-2$	4
2	0	0	4
2	$8J$	0	2
3	0	2	4
4	$-8J$	4	1

Table I. En tabell med verdiene til  $2 \times 2$  matrisen

Så kan vi bruke dette til å finne den andre verdiene. Først ser vi på  $Z$ , som blir

$$Z = \sum_s e^{-\beta E(s)} = 12e^0 + 2e^{-\beta(-8J)} + 2e^{-\beta 8J}$$



Altså blir

$$Z = 12 + 4 \cosh(8\beta)$$

Så finner vi  $\langle \epsilon \rangle$ , altså

$$\langle \epsilon \rangle = \sum_s p(s) \frac{E(s)}{N} = \sum_s \frac{e^{-\beta E(s)} E(s)}{N}$$

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{-8J e^{8J} \cdot 2 + 8J e^{-\beta 8J} \cdot 2}{NZ} = \frac{-16J}{NZ} (e^{8\beta J} - e^{-8\beta J})$$

$$\langle \epsilon \rangle = -\frac{16J}{4Z} 2 \sinh(8\beta J) = \frac{-8J}{Z} \sinh(8\beta J)$$

Så finner vi  $\langle \epsilon^2 \rangle$  med

$$\langle \epsilon^2 \rangle = \sum_s \frac{E(s)^2}{N^2} p(s) = \sum_s e^{-\beta E(s)} \frac{E(s)^2}{N^2 Z}$$

$$\langle \epsilon^2 \rangle = \frac{2(8J)^2 e^{8J\beta} + 2(8J)^2 e^{-8J\beta}}{N^2 Z} = \frac{2(8J)^2}{N^2 Z} \cosh(8J\beta)$$

$$\langle \epsilon^2 \rangle = 4 \left( \frac{8J}{4} \right)^2 \cosh(8J\beta) = \frac{16J^2}{Z} \cosh(8J\beta)$$

Så kan vi bruke disse til å finne

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

Hvor

$$\langle \epsilon \rangle^2 = (\langle \epsilon \cdot N \rangle)^2 = \langle \epsilon \rangle \cdot N^2 = \left( \frac{-8J \cdot 4}{Z} \sinh(8J\beta) \right)^2$$

så

$$\langle E \rangle^2 = \left( \frac{32J}{Z} \right)^2 \sinh^2(8J\beta)$$

Mens

$$\langle E^2 \rangle = \langle (\epsilon^2 \cdot N^2) \rangle = \frac{16^2 J^2}{Z} \cosh(0J\beta)$$

så vi får at

$$C_V = \frac{1}{Nk_B T^2} \left( \frac{16^2 J^2}{Z} \cosh(0J\beta) - \left( \frac{32J}{Z} \right)^2 \sinh^2(8J\beta) \right)$$

Så finner vi magnetiseringen

$$\langle |M| \rangle = \sum_s |M(s)| p(s) = \frac{4e^{8J} + 2e^0 + 2e^0 + 4e^{8J}}{Z} = 4 \frac{1 + 2e^{8J\beta}}{Z}$$

så

$$\langle |m| \rangle = \left\langle \frac{|M|}{N} \right\rangle = \frac{4}{4} \frac{1 + 2e^{8J\beta}}{Z} = \frac{1 + 2e^{8J\beta}}{Z}$$

Så har vi

$$\langle M^2 \rangle = \sum_s M(s)^2 p(s) = \frac{16e^{8J\beta} + 4 + 4 + 16e^{8J\beta}}{Z} = 8 \frac{1 + 4e^{8J\beta}}{Z}$$

så

$$\langle m^2 \rangle = \frac{8}{16} \frac{1 + 4e^{8J\beta}}{Z} = \frac{1 + 4e^{8J\beta}}{2Z}$$

Da får vi at

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

så

$$\chi = \frac{1}{Nk_B T} \left( 8 \frac{1 + 4e^{8J\beta}}{Z} - \left( 4 \frac{1 + 2e^{8J\beta}}{Z} \right)^2 \right)$$

$$\chi = \frac{1}{Nk_B T} \left( 8 \frac{1 + 4e^{8J\beta}}{Z} - \frac{1 + 4e^{8J\beta} + 4e^{16J\beta}}{Z^2} \right)$$

og disse verdiene kan vi bruke til å kontrollteste våre verdier når vi regner ut for andre  $L$ .