

This is a Very Important Title!

Person McSomething
(Dated: November 22, 2021)

This abstract is abstract.

If you want to learn more about using L^AT_EX, you should check UiO's official tutorials: <https://www.mn.uio.no/ifi/tjenester/it/hjelp/latex/>

If you are familiar with L^AT_EX and you want to learn more about the REVTeX4-1 document class, check: http://www.physics.csbsju.edu/370/papers/Journal_Style_Manuals/auguide4-1.pdf

I. INTRODUKSON

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 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 spinn ϵ 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 spinn som

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

Vi skal også finne forventningsverdiene $\langle \epsilon \rangle$ og $\langle |m| \rangle$. Forventningsverdien 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

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

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

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 sansynligheten for den neste tilstanden som den utvikler seg i avhenger kun av den gamle tilstanden. Vi kan ikke vite sansynligheten, 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 sansynlighetsfordelingsfunksjon (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 sansynligheten for å finne systemet i den tilhørende tilstanden. $\frac{T(x' \rightarrow x_i)}{T(x_i \rightarrow x')}$ er vår forslagssansynlighetsfunksjon for at x' går over til x_i delt på forslagssansynligheten 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 forkåret 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 tidsforskjellen 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 parallelisering 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.

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 spinntilstand 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 ΔE kunne ha. Vi kan trenger derfor kun å finne ΔE for hver gang og ha lagret $e^{-\Delta E\beta}$ og trekke ut hvilken vi trenger avhengig av ΔE . 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. 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.

C. 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.

IV. RESULTATER

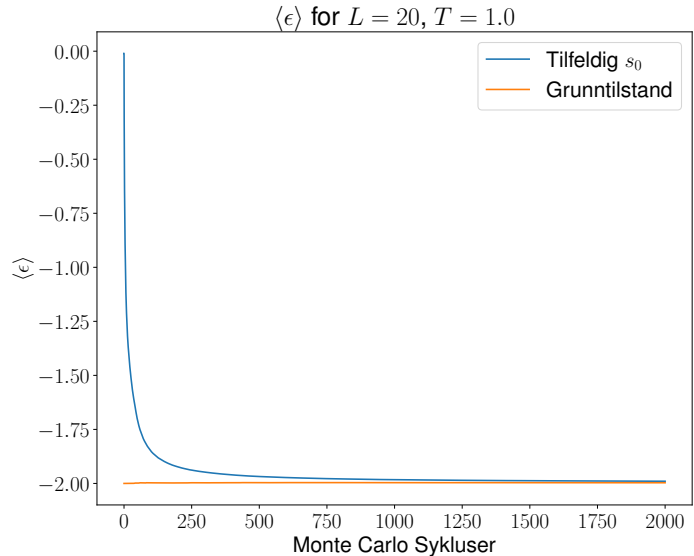


Figure 1. Forventningsverdien av energien per spinn etter et antall Monte Carlo syklus. Ser at den som starter fra tilfeldig spinntilstand ender opp på samme steds som grunntilstandsmatrisen. Vi bruker det til å estimere burn-in tiden til systemet.

V. DISKUSJON

VI. KONKLUSJON

ACKNOWLEDGMENTS

I would like thank myself for writing this beautiful document.

REFERENCES

- Reference 1
- Reference 2

Appendix A: 2×2 gitter

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

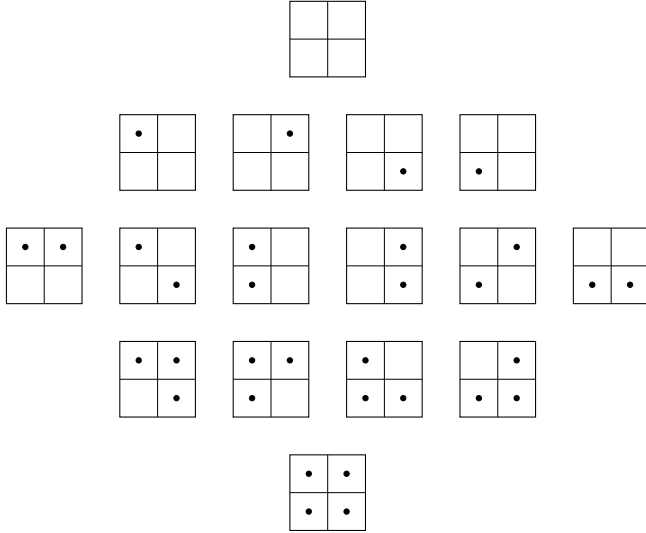


Figure 2. Alle tilstander som er mulig i et 2×2 -gitter. En rute med en prikk i seg betyr at dette spinnnet har spinn opp altså $+1$, mens en blank rute betyr at dette spinnnet har spinn ned, altså -1

Vi ser altså at det er 16 forskjellige muligheter tilstander i et 2×2 -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 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 2×2 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

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

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

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

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

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

Appendix B: This is another appendix

Tada.

Note that this document is written in the two-column format. If you want to display a large equation, a large

figure, or whatever, in one-column format, you can do this like so:

This text and this equation are both in one-column format.

[?]

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi \quad (\text{B1})$$

Note that the equation numbering (this: B1) follows the appendix as this text is technically inside Appendix B. If you want a detailed listing of (almost) every available math command, check: <https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/Mathematics>.

And now we're back to two-column format. It's really easy to switch between the two. It's recommended to keep the two-column format, because it is easier to read, it's not very cluttered, etc. Pro Tip: You should also get used to working with REVTeX because it is really helpful in FYS2150.

One last thing, this is a code listing:

```
This will be displayed with a cool programming font!
```

You can add extra arguments using optional parameters:

```
This will be displayed with a cool programming font!
```

You can also list code from a file using `\lstinputlisting`. If you're interested, check https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/Source_Code_Listings.

This is a basic table:

Table II. This is a nice table

Hey	Hey	Hey
Hello	Hello	Hello
Bye	Bye	Bye

You can a detailed description of tables here: <https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/Tables>.

I'm not going to delve into Tikz in any level detail, but here's a quick picture:

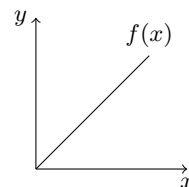


Figure 3. This is great caption

If you want to know more, check: <https://en.wikibooks.org/wiki/LaTeX/PGF/TikZ>.