

Prosjekt 4: Faseoverganger i magnetiske systemer

Live Wang Jensen

November 15, 2016

Abstract

Vi skal i denne oppgaven se nærmere på et spinnsystem beskrevet ved Ising modellen, og hvordan dette systemet oppfører seg ved ulike temperaturer. For et 2×2 system fant vi ut at vi trengte 10^5 Monte Carlo sykluser før vi fikk overensstemmelse mellom analytiske og numeriske verdier når $T = 1.0$. For et 20×20 gitter fant vi ut at vi trengte omtrent 10^5 Monte Carlo sykluser før systemet nådde likevekt, og at sannsynlighetsfordelingen til energitilstandene er normalfordelt. For 40×40 , 60×60 , 100×100 og 140×140 -gitterene fant vi ut at de, og termodynamiske størrelsene energi $\langle E \rangle$, magnetisk moment $\langle |M| \rangle$, spesifikk varmekapasitet C_V og susceptibiliteten χ oppførte seg i henhold til det vi kan forvente ut ifra fysiske lover omkring den kritiske temperaturen T_C . Ved hjelp av minste kvadraters metode estimerte vi en kritisk temperatur på $T_C = 2.280$. For et 40×40 gitter fikk vi en CPU-tid på 2 min og 18 sek, mens den paralleliserte versjonen av koden brukte 16.19 sek.

Contents

1	Introduksjon	2
2	Teori	2
2.1	Faseoverganger	4
2.2	Metropolis algoritmen	5
3	Resultater	6
3.1	2×2 -gitter	6
3.2	20×20 -gitter	7
3.3	Faseovergang ved større gittere	10
4	Diskusjon og konklusjon	13
5	Vedlegg	15

1 Introduksjon

Målet med dette prosjektet er å studere faseoverganger i to dimensjoner ved hjelp av den populære Ising modellen. Denne modellen beskriver et magnetisk materiale, og vi har forenklet modellen ved å bruke et system som består av partikler, som vi antar er festet i et gitter. Disse partiklene kan enten ha spinn opp eller spinn ned, og kan vekselvirke med hverandre ved å endre spinntilstand. Vi har brukt Metropolis algoritmen for å beregne sannsynlighetstettheten til de ulike energitilstandene ved Monte Carlo simulering. Ved en gitt kritisk temperatur vil denne modellen vise at vi får en faseovergang fra en magnetisk fase til en fase med null magnetisering. Vi skal starte med å se på et enkelt og lite system med 2×2 spinn. For et såpass lite system kan vi beregne de ulike termodynamiske størrelsene $\langle E \rangle$, $\langle |M| \rangle$, C_V og χ analytisk. Ising modellen implementeres så inn i en kode, hvor vi bruker Metropolis algoritmen til å generere nye spinntilstander. På denne måten kan vi beregne de numeriske verdiene, og sammenligne disse med de analytiske løsningene. Vi skal deretter gå over til et 20×20 gitter og se på hvor mange Monte Carlo sykluser som kreves før systemet når likevektstilstand, både ved $T = 1.0$ og $T = 2.4$. Dette gjøres ved å plote de ulike termodynamiske størrelsene som funksjon av antall sykluser. Vi skal også se på hva slags påvirkning initialtilstanden har. Videre skal vi se på sannsynlighetsfordelingen til de ulike energitilstandene og finne ut hva slags fordeling disse har. Vi skal også se på 40×40 , 60×60 , 100×100 og 140×140 -gittere og hvordan de ulike termodynamiske størrelsene oppfører seg som funksjon av temperatur, når vi befinner oss i området rundt den kritiske temperaturen T_C . Til slutt skal vi bestemme $T_C(L = \infty)$ ved hjelp av minste kvadraters metode.

2 Teori

Ising modellen gjør oss i stand til å beskrive oppførselen til et magnetisk materiale som funksjon av termisk energi og ytre magnetfelt. Vi antar her at gitteret vårt er kvadratisk og består av et rutenett av atomer, som enten kan ha spinn opp (+1) eller ned (-1). Energien i Ising modellen kan i sin enkleste form beskrives ved

$$E = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_k s_l - \mathcal{B} \sum_k^N s_k \quad (1)$$

hvor $s_k = \pm 1$. Størrelsen N representerer det totale antall spinn vi kan ha, mens J er koblingskonstanten som forteller oss noe om styrken på vekselvirkningen mellom to nabospinn. Symbolet $\langle kl \rangle$ indikerer at vi kun skal summere over de nærmeste naboene. I vårt tilfelle har vi ikke noe ytre magnetfelt \mathcal{B} , slik at det siste leddet forsvinner. Vi antar at vi har en ferromagnetisk struktur, slik at $J > 0$. I vårt tilfelle bruker vi $J = 1$. Vi kommer til å bruke periodiske grensebetingelser og **Metropolisalgoritmen** til å modellere vårt system.

For å kunne beregne forventningsverdier som for eksempel forventningsverdien til energien $\langle E \rangle$ eller magnetiseringen $\langle M \rangle$ i statistisk fysikk, trenger vi sannsynlighetsfordelingen, som forteller oss om sannsynligheten for å finne systemet vårt i en gitt konfigurasjon i :

$$P_i(\beta) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (2)$$

hvor $\beta = 1/kT$, k er Boltzmanns konstant og E_i er energien til tilstand nummer i . Z er partisjonsfunksjonen for et kanonisk ensemble. Det betyr at (N, V, T) (antall spinn, volum og temperatur) holdes konstant. Z er da gitt ved

$$Z = \sum_{i=1}^M e^{-\beta E_i} \quad (3)$$

Her summerer vi over alle mulige mikrotilstander M . Energien til hver enkelt konfigurasjon i er gitt ved

$$E_i = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_k s_l \quad (4)$$

En gitt konfigurasjon i en endimensjonal Ising Modell hvor $\mathcal{B} = 0$ med N spinn kan for eksempel se slik ut

$$\uparrow_1 \quad \uparrow_2 \quad \dots \quad \uparrow_{i-1} \quad \downarrow_i \quad \downarrow_{i+1} \quad \dots \quad \uparrow_{N-1} \quad \downarrow_N$$

hvor pilene symboliserer om spinnet peker opp (+1) eller ned (-1). Det finnes flere måter å håndtere grensebetingelsene på. Vi skal bruke **periodiske grensebetingelser**. Det betyr at nabospinnet til høyre for spinn s_N , skal ha samme verdi som spinn s_1 . På samme måte skal naboen til venstre for s_1 ha samme verdi som s_N .

Det **magnetiske momentet** i et slik system er definert ved

$$M = \sum_{j=1}^N s_j \quad (5)$$

hvor vi summer over alle spinn ved en gitt konfigurasjon i . I det endimensjonale tilfellet vil hvert spinn kun ha to naboer; en til høyre og en til venstre. Tar vi dette over til det todimensjonale plan, får hvert spinn plutselig fire naboer. Dersom vi ser på et 2×2 -gitter med periodiske grensebetingelser, ender vi opp med totalt $2^4 = 16$ ulike tilstander. Noen eksempler er gitt nedenfor:

$$\uparrow\uparrow \quad \uparrow\uparrow \quad \downarrow\downarrow \quad \downarrow\downarrow$$

$$\uparrow\uparrow \quad \uparrow\downarrow \quad \uparrow\downarrow \quad \downarrow\downarrow$$

$$E = -8J \quad E = 0 \quad E = 0 \quad E = -8J$$

Vi ser fort at det er flere ulike tilstander som har samme totalenergi. Antall tilstander som har samme totalenergi kalles for *degenerasjonsgraden* til energien. Tabell 1 gir en oversikt over de ulike tilstandenes energi, magnetisk moment og degenerasjonsgrad for 2×2 tilfellet.

Table 1: Energi og magnetisk moment for den todimensjonale Ising modellen, med $N = 2 \times 2$ spinn og periodiske grensebetingelser.

#Spinn opp	Degenerasjonsgrad	Energi	Magnetisk moment
4	1	-8J	4
3	4	0	2
2	4	0	0
2	2	8J	0
1	4	0	-2
0	1	-8J	-4

Videre har vi at forventningsverdien til energien er

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (6)$$

mens forventningsverdien til *absoluttverdien* til det magnetiske momentet blir

$$\langle |M| \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i^M |M_i| e^{-\beta E_i} \quad (7)$$

hvor M_i er det magnetiske momentet ved tilstanden i .

Den **spesifikke varmekapasiteten** er gitt ved

$$C_V = \frac{1}{kT^2} \sigma_E^2 = \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (8)$$

hvor

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_i E_i^2 e^{-\beta E_i} \quad (9)$$

Susceptibiliteten er gitt ved

$$\chi = \frac{1}{kT} \sigma_{|M|}^2 = \frac{1}{kT} (\langle |M|^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2) \quad (10)$$

hvor $|M|$ er absoluttverdien av det magnetiske momentet M .

2.1 Faseoverganger

Nær den kritiske temperaturen T_C kan vi beskrive mange av de termodynamiske størrelsene ved hjelp av en såkalt potenslov. Dette er en egenskap som innebærer at frekvensen av en størrelses verdi er eksponensiell avtagende med den gjeldende verdien. For Ising modellen kan forventningsverdien til det magnetiske momentet beskrives ved

$$\langle M(T) \rangle \sim (T - T_C)^\beta$$

hvor $\beta=1/8$ er en såkalt *kritisk eksponent*. Tilsvarende kan vi beskrive varmekapasiteten ved

$$C_V \sim |T_C - T|^\alpha$$

og susceptibiliteten ved

$$\chi(T) \sim |T_C - T|^\gamma$$

hvor $\alpha = 0$ og $\gamma = 7/4$. I tillegg har vi *korrelasjonslengden* som forventes å være på samme størrelse som gitteravstanden når $T \gg T_C$. Siden spinnene blir mer og mer korrelerte når T nærmer seg T_C , vil korrelasjonslengden øke i nærheten av den kritiske temperaturen. Siden vi jobber på en datamaskin, vil vi alltid ha en endelig størrelse på gitteret vårt. Det er mulig å skalere slik at vi kan knytte oppførselen til et endelig gitter med resultatene til et uendelig stort gitter. Den kritiske temperaturen skaleres da som

$$T_C(L) - T_C(L = \infty) = aL^{-1/\nu}$$

hvor a er en konstant og ν er definert ved ligningen

$$\xi(T) \sim |T_C - T|^{-\nu}$$

Ved å sette $T = T_C$ får vi at

$$\langle M(T) \rangle \sim (T - T_C)^\beta \rightarrow L^{-\beta/\nu}$$

og

$$C_V(T) \sim |T_C - T|^{-\gamma} \rightarrow L^{\alpha/\nu}$$

og

$$\chi(T) \sim |T_C - T|^{-\alpha} \rightarrow L^{\gamma/\nu}$$

2.2 Metropolis algoritmen

For å beregne disse termodynamiske størrelsene på en datamaskin, skal vi bruke Metropolis algoritmen på Ising modellen med periodiske grensebetingelser. Denne algoritmen ble lagt frem av Metropolis mfl. i 1953. Vi kan generere nye tilstander fra den forrige tilstanden ved å bruke en sannsynlighetsmodell som avhenger av energidifferansen mellom tilstandene. I vårt tilfelle er Monte Carlo samplings-funksjonen vår det samme som sannsynligheten for at systemet befinner seg i en tilstand s gitt ved

$$P_s = \frac{e^{-\beta E_s}}{Z}$$

hvor Z er partisjonsfunksjonen for vårt kanoniske ensemble

$$Z(\beta) = \sum_s e^{\beta E_s}$$

Siden vi trenger en oversikt over *alle* tilstandene systemet kan ha for å kunne beregne partisjonsfunksjonen, sier det seg selv at dette vil være en tung og tidkrevende prosess. En

Ising modell med $N = L \times L$ antall spinn i to dimensjoner, vil ha 2^N ulike konfigurasjoner. I Metropolis algoritmen slipper vi heldigvis unna dette, siden vi kun ser på *forholdet* mellom sannsynlighetene. Kort fortalt går Metropolis algoritmen ut på at vi

1. Starter med en initilstand med energi E_1 . Denne startkonfigurasjonen av spinn kan for eksempel ha alle spinnene pekende oppover, eller helt tilfeldig.
2. Endre starttilstanden ved å flippe kun ett spinn, og beregn den nye energien E_2 .
3. Dersom differansen $\Delta E = E_2 - E_1 \leq 0$, aksepterer vi den nye konfigurasjonen. Energien er nå lavere enn det den startet med å være. På denne måten beveger vi oss mot et energiminimum.
4. Dersom differansen $\Delta E > 0$, beregn $w = e^{\beta \Delta E}$, og sammenlign w med et tilfeldig trukket tall, r .
5. Hvis $r \leq w$ godtas den nye konfigurasjonen. Hvis ikke beholdes den gamle konfigurasjonen.
6. Oppdater de termodynamiske størrelsene du vil beregne.
7. Når du har gått gjennom hele gitteret har du gått gjennom én Monte Carlo syklus. En slik syklus regnes som én måling. For å få flere målinger må du gå gjennom flere slike sykluser.

3 Resultater

3.1 2x2-gitter

Analytiske løsninger

Vi starter med å se på et enkelt todimensjonalt system, nemlig et 2×2 gitter. Partisjonsfunksjonen for et 2×2 -gitter kan finnes ved ligning (3). Dersom vi bruker verdiene gitt i tabell 1, ser vi at vi kun har tre ulike energier; to konfigurasjoner har $E = -8J$, tolv konfigurasjoner har $E = 0$ og to konfigurasjoner med $E = 8J$. Setter vi dette inn i ligningen får vi at

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{i=1}^{16} e^{-\beta E_i} = e^{-\beta(-8J)} + 2e^{-\beta(8J)} + e^{-\beta(-8J)} + 12e^{-\beta(0)} \\ &= 2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12 \end{aligned}$$

Videre kan vi finne $\langle E \rangle$ ved å bruke ligning (6), slik at

$$\begin{aligned} \langle E \rangle &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \left[\ln(2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12) \right] \\ &= -\frac{16Je^{8\beta J} - 16Je^{-8\beta J}}{2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12} \end{aligned}$$

Vi vet fra tabell 1 at vi har én konfigurasjon med $M = 4$, én med $M = -4$, fire med $M = 2$, fire med $M = -2$ og seks konfigurasjoner med $M = 0$. Vi bruker ligning (7) til å finne forventningsverdien til systemets magnetiske moment $\langle |M| \rangle$. Dette gir oss

$$\begin{aligned}\langle |M| \rangle &= \frac{1}{2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12} \cdot (4e^{-\beta(-8J)} + 4 \cdot 2 \cdot e^0 + 4 \cdot 2 \cdot e^0 + |-4|e^{-\beta(-8J)}) \\ &= \frac{8e^{8\beta J} + 16}{2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12}\end{aligned}$$

Den spesifikke varmekapasiteten er gitt ved (8) og vi ender opp med

$$C_V = \frac{1}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) = \frac{1}{kT^2} \left[\frac{2 \cdot 64J^2(e^{8\beta J} + e^{-8\beta J})}{2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12} - \left(-\frac{16Je^{8\beta J} - 16Je^{-8\beta J}}{2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12} \right)^2 \right]$$

Til slutt har vi susceptibiliteten gitt ved ligning (10)

$$\chi = \frac{1}{kT} (\langle |M|^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2) = \frac{1}{kT} \left[\frac{32e^{8\beta J} + 32}{2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12} - \left(\frac{8e^{8\beta J} + 16}{2e^{8\beta J} + 2e^{-8\beta J} + 12} \right)^2 \right]$$

Numeriske løsninger

Vi kan sammenligne de analytiske løsningene med de numeriske løsningene funnet ved hjelp av Metropolis algoritmen. I koden `IsingModel_4a.cpp` har Ising modellen blitt implementert sammen med de analytiske uttrykkene, slik at vi enkelt kan beregne $\langle E \rangle$, $\langle |M| \rangle$, C_V og χ . I koden er det brukt periodiske grensebetingelser med $L = 2$, $J = 1$ og $T = 1.0$ (med enheten kT/J). I tabell 2 ser vi resultatene fra en kjøring av programmet. Her er antall Monte Carlo sykluser satt til 10^5 . Med disse verdiene oppnådde vi en presisjon på to desimaler. Vi ser på to ulike initialkonfigurasjoner, en hvor alle spinn starter med å peke oppover, og en hvor hvert spinn peker tilfeldig opp eller ned.

Table 2: Numeriske vs analytiske verdier for ulike termodynamiske størrelser. Her starter vi systemet vårt med alle spinn pekende oppover og antall Monte Carlo sykluser er 10^5 .

	Numerisk	Analytisk
$\langle E \rangle$	-1.9960	-1.9960
$\langle M \rangle$	0.9987	0.9987
C_V	0.1267	0.1283
χ	0.0157	0.0160

Table 3: Numerisk vs analytiske verdier for ulike termodynamiske størrelser. Her starter vi med et system hvor de ulike spinnene peker i tilfeldig retning. Antall Monte Carlo sykluser er 10^5 .

	Numerisk	Analytisk
$\langle E \rangle$	-1.9961	-1.9960
$\langle M \rangle$	0.9988	0.9987
C_V	0.1258	0.1283
χ	1.0159	0.0160

3.2 20x20-gitter

Vi skal nå se nærmere på et gitter med $L = 20$ spinn i x og y retning. Vi vil studere hvor lang tid det tar før systemet når likevekt. I vårt tilfelle måler vi tid i antall Monte

Carlo sykluser. Etter at systemet har nådd likevekt kan vi nemlig begynne å beregne ulike termodynamiske størrelser. Ved å plote ulike forventningsverdier som funksjon av antall Monte Carlo sykluser kan vi enkelt se på grafen når systemet har begynt å stabilisere seg mot likevekt. Vi starter med å se på et system hvor $T = 1.0$ hvor alle spinn starter med å peke opp. Deretter ser vi på hva som skjer hvis systemet starter med tilfeldig orienterte spinn. Det samme gjøres så for $T = 2.4$.

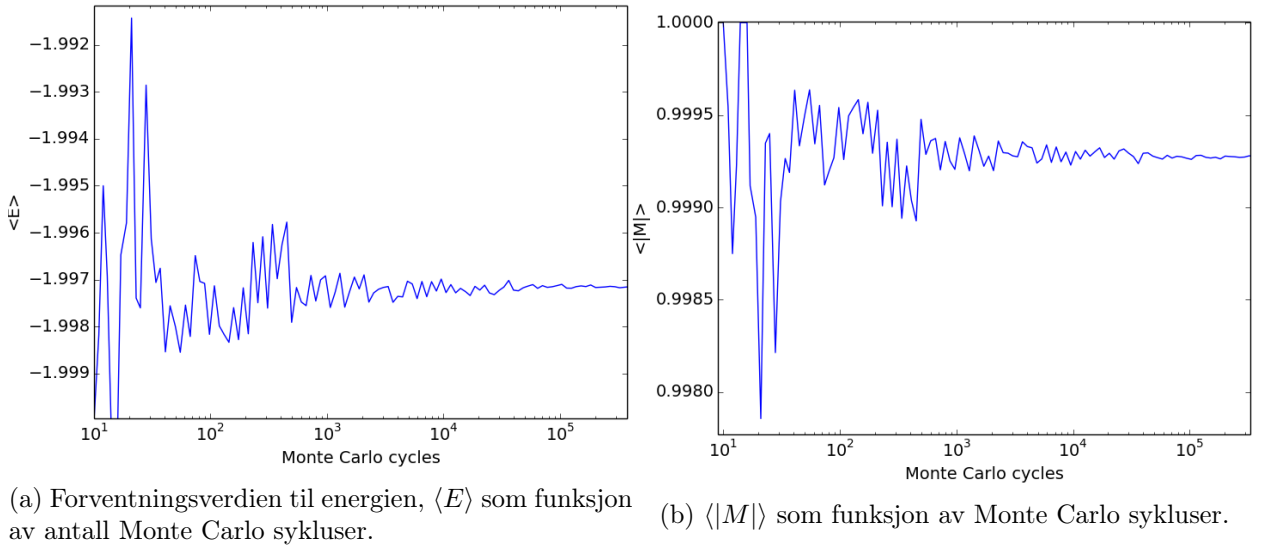


Figure 1: Energien $\langle E \rangle$ og det magnetiske momentet $\langle |M| \rangle$ som funksjon av Monte Carlo sykluser. Her er temperaturen $T = 1.0$ og initieell konfigurasjon er med alle spinn oppover. Vi ser i at systemet har nådd likevekt etter omkring 10^4 sykluser.

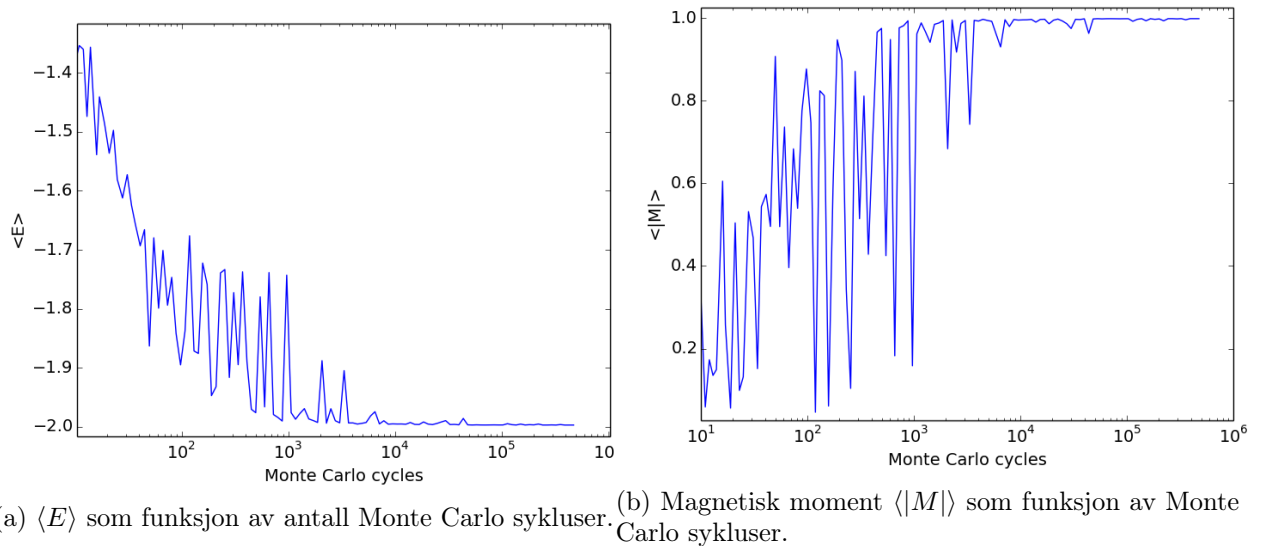


Figure 2: Her ser vi energien $\langle E \rangle$ og det magnetiske momentet $\langle |M| \rangle$ som funksjon av Monte Carlo sykluser ved $T = 1.0$. Her starter spinnene i tilfeldig retning, og systemet begynner å stabilisere seg etter omkring 10^4 sykluser.

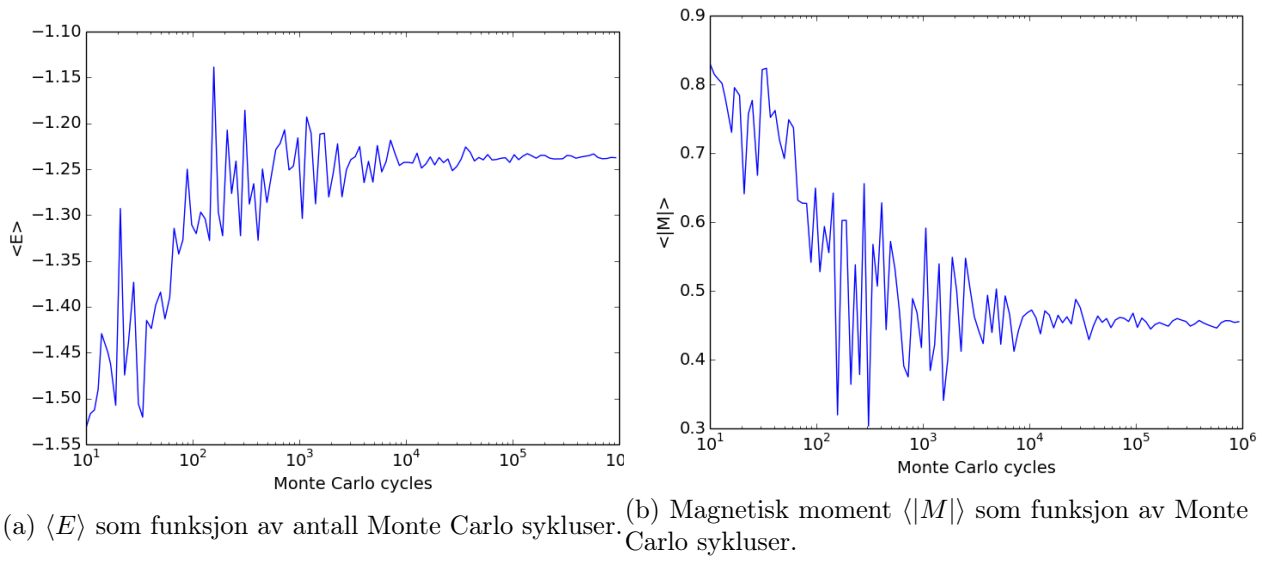


Figure 3: Her ser vi energien $\langle E \rangle$ og det magnetiske momentet $\langle |M| \rangle$ som funksjon av Monte Carlo sykluser ved $T = 2.4$. Her starter alle spinnene i grunntilstanden, pekende oppover. Systemet når likevekt etter omkring 10^5 sykluser.

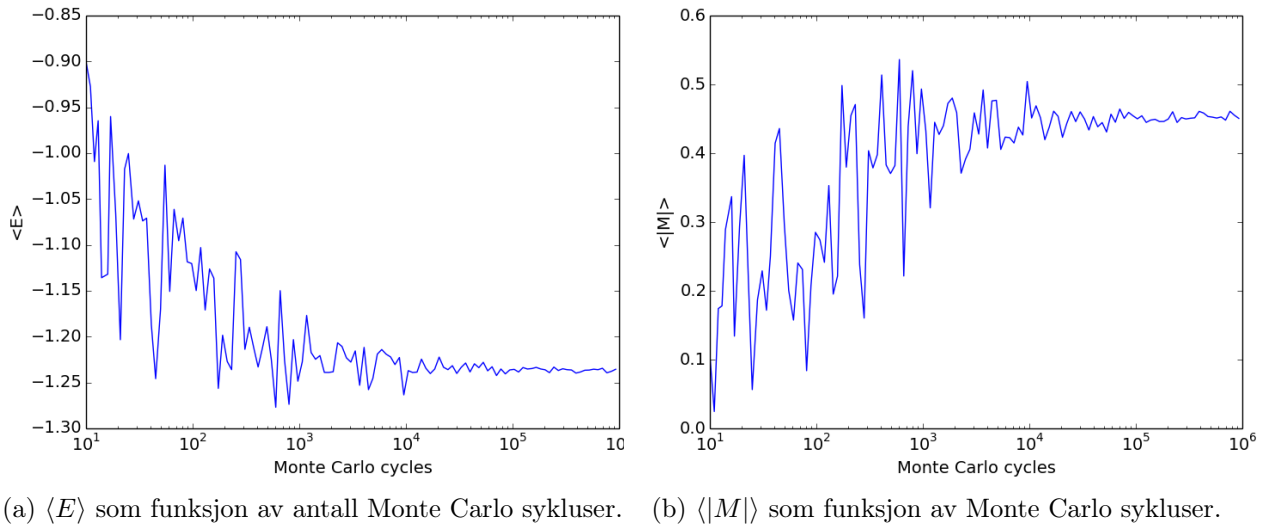


Figure 4: Figurene over viser energien $\langle E \rangle$ og det magnetiske momentet $\langle |M| \rangle$ som funksjon av antall Monte Carlo sykluser ved $T = 2.4$. Her starter alle spinnene i tilfeldig retning, og systemet når likevekt etter omkring 10^5 sykluser.

I figuren nedenfor vises et plot av antall aksepterte tilstander som funksjon av temperatur.

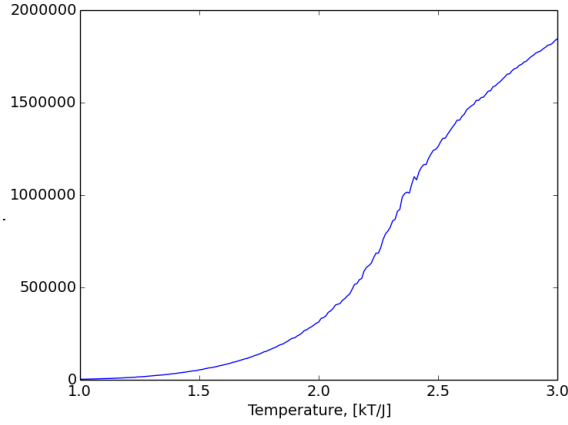
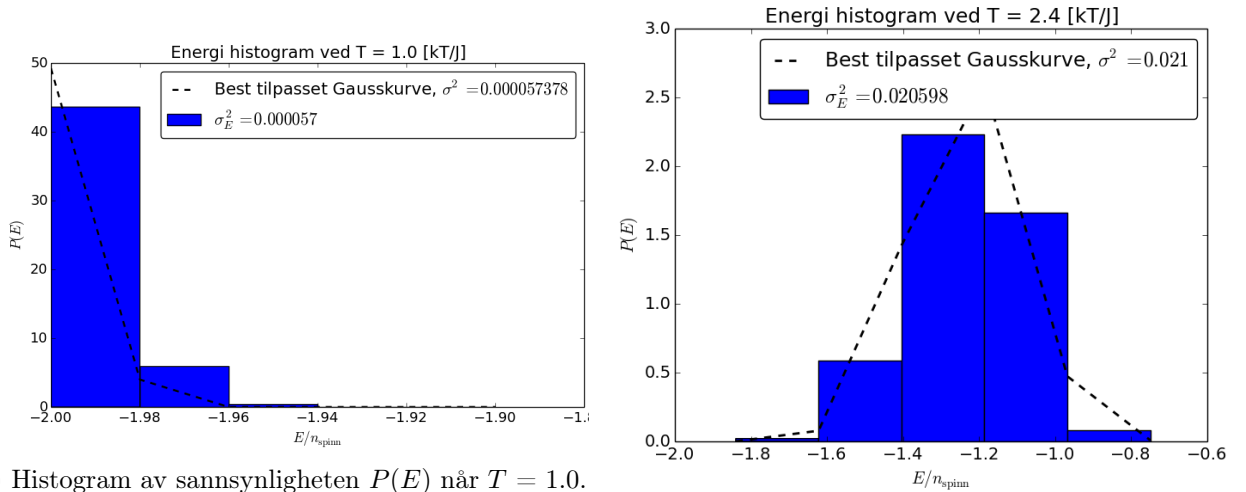


Figure 5: Antall aksepterte tilstander som funksjon av temperatur. I dette tilfellet startet alle spinn i grunntilstanden.

Sannsynlighetsfordelingen

Sannsynligheten for at systemet befinner seg i en viss energitilstand E_i kan beregnes ved å telle antall ganger en viss energi dukker opp i beregningen (frekvensen til E).



(a) Histogram av sannsynligheten $P(E)$ når $T = 1.0$.

(b) Histogram av sannsynligheten $P(E)$ når $T = 2.4$.

Figure 6: Figurene over viser histogrammer over sannsynligheten for å finne systemet i en energitilstand E_i . Histogrammet er normert slik at summen av arealet av alle boksene er 1. Vi ser at i a) har vi totalt tre ulike tilstander, og variansen i energi er $\sigma_E^2 = 0.000057$. I b) har vi fem ulike tilstander. Den stiplede linjen viser oss den best tilpassede Gausskurven, med tilhørende varians $\sigma^2 = 0.021$. Variansen i energien er $\sigma_E^2 = 0.020598$.

3.3 Faseovergang ved større gittere

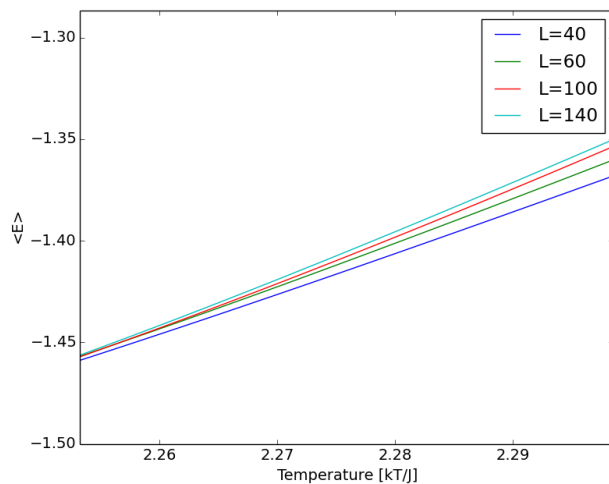
Vi skal nå se på hvordan Ising modellen oppfører seg i nærheten av den kritiske temperaturen T_C , som funksjon av gitterstørrelsen $L \times L$. Vi plotter derfor $\langle E \rangle$, $\langle |M| \rangle$, C_V og χ som funksjon av T når $T \in [2.0, 2.3]$. Dette gjøres for $L = 40$, $L = 60$, $L = 100$ og $L = 140$. Med

såpass store gittere var det gunstig å parallellisere koden og å bruke optimaliseringsflagg ved kompilering. Ved $L = 40$ får vi allerede en markant forskjell i CPU-tid.

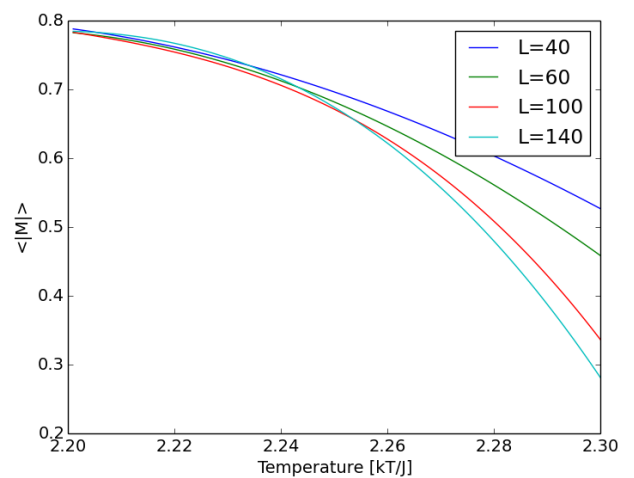
CPU – tid uparallellisert kode : 2min,28sek

CPU – tid parallellisert kode : 16.19sek

I figurene nedenfor er de ulike termodynamiske størrelsene plottet som funksjon av T i intervallet $T \in [2.2, 2.3]$ med $\Delta T = 0.001$ og 10^5 sykluser. For å unngå hakkete grafer er det brukt interpolasjon i plottefunksjonen.

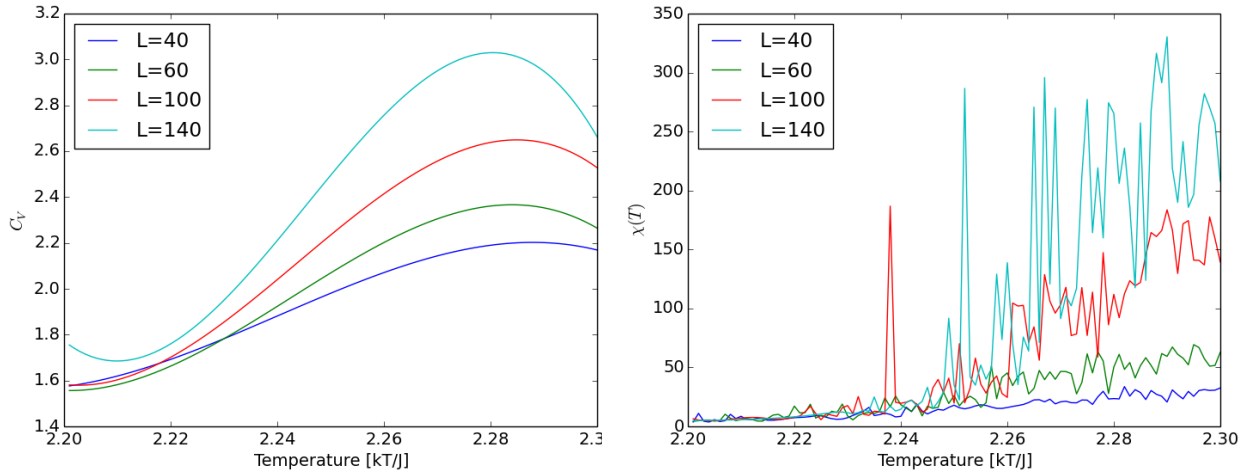


(a) $\langle E \rangle$ som funksjon av T .



(b) $\langle |M| \rangle$ som funksjon av T .

Figure 7: Her ser vi $\langle E \rangle$ og $\langle |M| \rangle$ som funksjon av temperatur for ulike gitterstørrelser L . Når L øker ser vi at $\langle E \rangle$ øker, mens $\langle |M| \rangle$ synker. Dette blir tydeligere jo høyere T vi har.



(a) Spesifikk varmekapasitet C_V som funksjon av T .

(b) Susceptibiliteten χ som funksjon av T .

Figure 8: C_V og χ som funksjon av T . Vi ser at jo større L er, jo høyere spesifikk varmekapasitet har vi. Uansett størrelse på L ser vi at C_V har en bratt stigning ved økende T -verdier, med toppunkt omkring $T \approx 2.28$. I b) ser vi grafen til χ , av en eller annen grunn ville ikke denne la seg interpolere. Det går fortsatt ann å skimte et mønster her; jo større L , jo høyere susceptibilitet.

Nærmere bestemmelse av T_C

Vi kan bruke ligningen

$$T_C = T_C(L = \infty) = aL^{-1/\nu}$$

til å finne et bedre estimat av den kritiske temperaturen T_C ved den termodynamiske grenseverdien $L \rightarrow \infty$. Vi bruker da at $\nu = 1$. Ved å se på resultatene fra simuleringene når $L = 40$, $L = 60$, $L = 100$ og $L = 140$. Vi kan altså linke den kritiske temperaturen T_C til et gitter med endelig L sammen med den kritiske temperaturen for et *uendelig* gitter. Siden vi allerede har simulert systemet for fire ulike gitterstørrelser, har vi allerede fire punkter vi kan bruke. Vi velger å se på toppunktet i grafen til C_V for de ulike gitterstørrelsene og bruker disse til å lage en lineærtilpasning ved minste kvadraters metode. Figur 9 viser resultatet. Ved å plotte $C_{V,max}$ mot $1/L$ ser vi at $T_C(\infty)$ vil ligge i skjæringspunktet med y-aksen, da lineærtilpasningen vil være på formen $T_C(L) = a(1/L) + T_C(\infty)$. Vi ender da opp med at $T_C(L = \infty) = 2.280$.

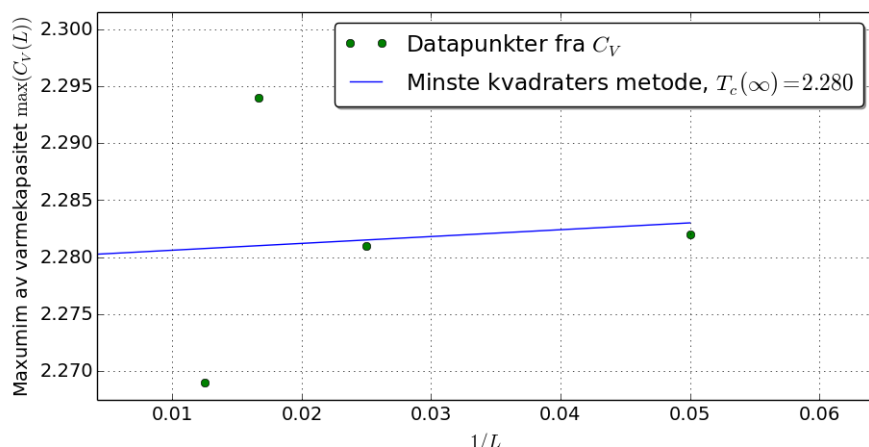


Figure 9: Lineært tilpasning av de fire ulike maksimumsverdiene til C_V , ett punkt for hver gitterstørrelse L . Dette gir oss et estimat på $T_C = 2.280$.

Den eksakte verdien for den kritiske temperaturen er funnet (etter Lars Onsager) til å være

$$kT_C/J = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269$$

når $\nu = 1$.

4 Diskusjon og konklusjon

I tabell 2 ser vi de numerisk beregnede verdiene sammen med de analytiske løsningene. Vi har her startet med alle spinn pekende oppover, og for å få en overensstemmelse på *to* desimaler trengte vi 10^5 Monte Carlo Sykluser. Ved 10^4 sykluser hadde vi allerede god overensstemmelse for energien $\langle E \rangle$ og det magnetiske momentet $\langle |M| \rangle$. Dersom vi starter systemet med spinn pekende tilfeldig opp eller ned, ser vi av tabell 3 at vi her også trengte 10^5 Monte Carlo sykluser for å få like god overensstemmelse. I begge tilfellene var det altså C_V og χ som krevde flest Monte Carlo sykluser. Dersom antall sykluser er for lavt (størrelsesorden 10 eller 10^2) vil disse verdiene bare være null. Det kommer av at systemet ikke har nådd sin likevektstilstand ved et lavt antall sykluser, men heller befinner seg nærmere sin initiale tilstand. Sannsynligheten for at et spinn skal flippe er altså liten ved små syklusantall. Vi sett at vi trenger opp mot 10^5 sykluser for å få en overensstemmelse på to desimaler med de analytiske løsningene.

Når vi går over til 20×20 tilfellet blir det litt værre å finne de analytiske løsningene. Vi har derfor plottet forventningsverdien til energien $\langle E \rangle$ og det magnetiske momentet $\langle |M| \rangle$ som funksjon av antall Monte Carlo sykluser. Ved å se på grafene kan man danne seg et bilde på hvor lang tid systemet vil bruke på å nå likevektstilstand ved ulike temperaturer og initialkonfigurasjoner. Vi måler altså tid i antall sykluser. Vi starter med å se på tilfellet hvor $T = 1.0$ og initialkonfigurasjonen er grunntilstanden med alle spinn pekende oppover (figur 1). Systemet starter med å oscillere omkring likevektslinja, før det begynner å stabilisere seg etter 10^3 sykluser, selv om vi fortsatt har noen ustabiliteter. Etter 10^5 sykluser kan man trygt si at systemet har nådd likevekt; her er grafen ganske stabil og

ligner en rett linje. I figur 2 ser vi hvordan systemet utvikler seg ved en tilfeldig startkonfigurasjon. Startfasen her er annerledes; systemet beveger seg bestemt mot likevekt, uten noen store oscillasjoner forbi likevektslinja. Etter omtrent 10^4 sykluser ser vi at systemet har stabilisert seg i ekvilibrium. Vi ser at begge tilfellene beveger seg mot $\langle E \rangle \approx -1.99$ og $\langle |M| \rangle \approx 0.99$. Dette gir mening, siden startkonfigurasjonen ikke skal ha noe å si for systemets oppførsel i det lange løp.

Når vi øker temperaturen til $T = 2.4$, vil systemet oppføre seg noe annerledes. Vi starter med å se på tilfellet med grunntilstanden som startkonfigurasjon. Likevekt er oppnådd etter omtrent 10^5 sykluser, akkurat som ved $T = 1.0$, men oppførselen i starten er annerledes. Her beveger systemet seg målrettet mot likevektslinja. Det samme gjelder når vi har en tilfeldig startkonfigurasjon, med likevekt etter 10^5 sykluser. $T = 2.4$ ser vi at systemet vil gå mot $\langle E \rangle \approx -1.23$ og $\langle |M| \rangle \approx 0.45$.

Ut ifra grafene i figur 2, 1, 3 og 4 kan vi konkludere med at systemet etter 10^5 har nådd likevekt og at vi etter dette kan beregne de ulike termodynamiske størrelsene. I figur 5 ser vi at antallet aksepterte tilstander er lavt ved lave temperaturer. Antallet begynner deretter å øke tilnærmet eksponentielt frem til $T \approx 2.4$, før veksten begynner å avta igjen. Vi har altså færre spinn flipp ved lavere temperaturer. Dette kommer av at vi i Metropolis algoritmen sammenligner et tilfeldig generert tall med faktoren $\exp(-\Delta E/T)$, slik at når T blir mindre vil færre nye tilstander aksepteres.

Figur 6 viser oss sannsynlighetsfordelingen for at systemet befinner seg i en bestemt energitilstand E . Vi ser at ved $T = 1.0$, har vi *tre* ulike energitilstander; -1.98, -1.96 og -2.00. Sannsynlighetsfordelingen her er ikke en typisk normalfordeling. Her ser vi at mesteparten av tilstandene har energien -2.00. Det var derfor vanskelig å finne en Gauss kurve som passet til denne fordelingen. Likevel får vi et overraskende godt resultat når vi prøver å tilpasse denne fordelingen med en Gauss kurve. Det kan komme av at histogrammet vårt kun dekker den ene halvdel av Gauss kurven. Variansen σ^2 er jo standardavviket kvadrert, og standardavviket forteller om når spredningen av verdiene i datasettet vårt. Vi vet at i en normalfordeling vil 68.27% av datasettet befinne seg under ett standardavvik fra gjennomsnittsverdien. Den beregnede variansen $\sigma_E^2 = 0.000057$ passer derfor godt med denne Gauss kurvens varians $\sigma^2 = 0.000057378$.

Når $T = 2.4$ ser vi at vi har *fem* ulike energitilstander. Sannsynlighetsfordelingen her ligner mer på en normalfordeling, og vi ser at $\sigma_E^2 = 0.020598$ og $\sigma^2 = 0.021$ stemmer godt overens med hverandre. Etter å ha studert figur 6 kan vi derfor konkludere med at sannsynlighetsfordelingen er normalfordelt!

Over til de litt større systemene. Her er det nødvendig med en parallellisert kode, med mindre man har ekstremt god tid. Når vi kjører en uparallellisert kode med $L = 40$, $T \in [2.1, 2.3]$ og $\Delta T = 0.005$ og 10^4 sykluser, endte vi med en CPU-tid på 2 min og 28 sek. Kjører vi en parallellisert kode med samme parametere, ble CPU-tiden 16.19 sek ved bruk av fire prosessorer. Det er altså en tydelig forskjell i tidsbruk, og det er klart at for større gittere og et høyere antall sykluser vil forskjellene bli enda større. For å optimalisere ytterligere, ble det brukt kompleringsflagg(-O3).

Ser vi nærmere på figur 7 og 8, ser vi flere tegn på at systemet her gjennomgår en faseover-

gang. Typiske tegn er en bratt stigning i $\langle E \rangle$, mens $\langle |M| \rangle$ synker brått. Andre tegn er at den spesifikke varmekapasiteten har toppunkt (omkring $T = 2.28$), samtidig som at χ er økende. Dersom vi hadde simulert for et større intervall kunne vi sett at χ vil nærme seg et toppunkt for så å begynne å synke igjen. Disse toppunktene blir tydeligere jo større L er. Alt dette indikerer at systemet gjennomgår en faseovergang. Ut ifra grafene i figur 8 er det mulig å gjøre et estimat av den kritiske temperaturen T_C , som vil ligge i toppunktet til disse grafene. Med dette kan vi anslå at $T_C \approx 2.28$.

Til slutt ser vi på estimeringen av den kritiske temperaturen. Ved bruk av minste kvadraters metode kom vi frem til at $T_C = 2.280$, mens den eksakte løsningen er $T_C = 2.269$. Avviket vårt kan komme av at vi ikke hadde mange nok punkter å lage en lineærtilpasning ut ifra. Dersom vi hadde simulert for flere forskjellige gitterstørrelser, ville vi også fått flere toppunkter og dermed flere punkter å lage en lineærtilpasning ut ifra. Hvis vi i tillegg hadde økt temperaturintervallet ville vi muligens fått med oss toppunktene i grafen til χ slik at vi kunne laget en lineærtilpasning ut ifra disse også, for sammenligning.

Kort oppsummert kan vi konkludere med at Metropolis algoritmen egner seg godt for simulering av spinn-gitter som gjennomgår en faseovergang beskrevet ved Ising modellen. Jo større gitter vi har, jo mer realistisk blir resultatene vi får. Alle de fysiske størrelsene har oppført seg som forventet ved den kritiske temperaturen. Vi har i tillegg klart å estimere den kritiske temperaturen ved hjelp resultatene vi har fått fra denne modellen. Det viste seg at denne verdien $T_C = 2.280$ lå ganske nær den eksakte løsningen $T_C = 2.269$. Ved å bruke en parallellisert kode klarte vi å komme gjennom simuleringene innenfor rimelig tid, og det viste seg svært nyttig når vi skulle simulere systemer med 140×140 spinn.

5 Vedlegg

Alle koder og resultater som er brukt i rapporten finnes på Github-adressen:
<https://github.com/livewj/Project4>

References

- [1] M. Hjort-Jensen: Computational physics, lecture notes 2015. Fysisk institutt, UiO, 2016.
- [2] Oppgavetekst: Project 4, Fysisk institutt, UiO, 29.10.16
- [3] Termodynamiske uttrykk: "Energy Fluctuations in the Canonical Ensemble", Nick Oulette. <<https://www.sccs.swarthmore.edu/users/02/no/pdfs/fluct.pdf>>, 14.11.16
- [4] Utgangspunktet for kodene `IsingModel.cpp` og `ParaIsingModel.cpp` er hentet fra kursets Github-side: <<https://github.com/CompPhysics/ComputationalPhysics/tree/master/doc/Programs/ParallelizationMPI>>, 14.11.16
- [5] Deler av koden i `ParaIsingModel.cpp`, samt koden brukt til å estimere T_C , er hentet fra
 <<https://github.com/henrisro/Project4>>, 14.11.16

- [6] Tips og triks for optimalisering av kode: "How to optimize codes, from vectorization to parallelization", Morten Hjorth-Jensen, Fysisk Institutt, UiO, 2016.
- [7] Potenslov: <<https://no.wikipedia.org/wiki/Potenslov>>, 14.11.16
- [8] Standardavvik: <<https://no.wikipedia.org/wiki/Standardavvik>>, 15.11.16