

Isingmodellen

PROSJEKT 4

Thomas Haaland
`thomhaa@fys.uio.no`
Kandidatnummer: 58

Øyvind Are Rysstad Johnsen
`oarjohnse@fys.uio.no`
Kandidatnummer: 62

Abstract

I dette prosjektet skal vi simulere en bit av et ferromagnetisk materiale og undersøke hvordan magnetiseringen oppfører seg rundt metalllets kritiske temperatur. Vi starter med en teoretisk modell for opphavet til magnetiseringen. Denne modellen er løsbare bare for små systemer, men i dette prosjektet skal vi simulere for en metallbit som går mot å være stor.

Github-adresse:
`github.com/thomashaaland/Fys4150/tree/master/prosjekt4`

Contents

Introduksjon	2
Teori	2
Generell modell	2
To dimensjoner - analytisk utledning	3
Metropolisalgoritmen	4
Metoder	5
Resultater og presisjon	5
Konklusjon	12

Introduksjon

I dette prosjektet ser vi på den to-dimensjonale Ising-modellen uten et eksternt magnetfelt.

Vi antar gjennom prosjektet at vi har en ferromagnetisk ordning, med $J > 0$ - og benytter periodiske grenseverdier. Vi løser problemstillingen gjennom Metropolis-algoritmen, og vi benytter Monte Carlo-metoden. Vi finner til slutt den kritiske temperaturen for et slikt ferromagnetisk materiale.

Teori

Generell modell

Den generelle Ising-modellen beskriver et ferromagnetisk materiale i et gitt antall dimensjoner (fra én til uendelig mange). Modellen består av diskrete variabler - magnetiske spinn - som gjerne er plassert i et gitter, og kan ta en av verdiene $+1$ og -1 - henholdsvis "spinn opp" og "spinn ned". Dette er et system som kan undersøkes ved hjelp av metoder vi kjenner igjen fra statistisk fysikk og termodynamikk, der vi ser på ulike konfigurasjoner av spinnene som forskjellige mikrotilstander. Spesifikt følger systemet Boltzmannfordistribusjon med sannsynlighetsfordeling

$$P_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (1)$$

der $\beta = \frac{1}{k_b T}$, k_b er Boltzmanns konstant, T er temperatur, E_i er energien til mikrotilstand i og Z er partisjonsfunksjonen. P_i gir oss sannsynligheten for finne systemet i tilstand i . Det betyr at vi kan utlede uttrykk for ulike interessante fysiske størrelser om vi finner Z :

$$Z = \sum_{i=1}^N e^{-\beta E_i} \quad (2)$$

der summen går over antallet mulige mikrotilstander i .

Vi kan nå finne forventningsverdien til - altså gjennomsnittet av - energien til det modellerte materialet som

$$\langle E \rangle = \bar{E} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (3)$$

Den tilsvarende variansen er definert som

$$\sigma_E^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \quad (4)$$

Dette lar oss finne varmekapasiteten for konstant volum

$$C_v = \frac{1}{k_b T^2} \sigma_E^2 = \frac{\beta}{T} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \quad (5)$$

Magnetiseringa til materialet er gitt ved

$$\langle M \rangle = \sum_i \frac{M_i e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (6)$$

med tilhørende varians

$$\sigma_M^2 = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \quad (7)$$

Dette lar oss vinne susceptibiliteten χ

$$\chi = \frac{1}{k_b T} \sigma_M^2 = \beta \left(\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) \quad (8)$$

To dimensjoner - analytisk utledning

I dette prosjektet konsentrerer vi oss om den to-dimensjonale Ising-modellen, som kan løses analytisk for en gitterstørrelse $L = 2$. Energien finner vi fra uttrykket

$$E = -J \sum_{\langle k, l \rangle}^N s_k s_l \quad (9)$$

der $s_k = \pm 1$, N er det totale antall spinn og $J > 0$ en koplingskonstant som beskriver styrken på vekselvirkningene mellom de nærmeste plasserte spinnene. $\langle k, l \rangle$ forteller at vi bare summerer over de nærmeste naboene. Magnetiseringa til mikrotilstand i er gitt ved

$$M_i = \sum_{j=1}^N s_j \quad (10)$$

Vi har 16 mulige mikrotilstander for systemet vårt, beskrevet i tabellen nedenfor - med tilhørende energi og magnetisering:

$E_1 = 0$ $M_1 = 0$ $\uparrow \uparrow$ $\downarrow \downarrow$	$E_2 = 0$ $M_2 = 0$ $\uparrow \downarrow$ $\uparrow \downarrow$	$E_3 = 0$ $M_3 = 0$ $\downarrow \uparrow$ $\downarrow \uparrow$	$E_4 = 0$ $M_4 = 0$ $\downarrow \downarrow$ $\uparrow \uparrow$
$E_5 = 0$ $M_5 = 2$ $\uparrow \uparrow$ $\uparrow \downarrow$	$E_6 = 0$ $M_6 = 0$ $\uparrow \downarrow$ $\downarrow \uparrow$	$E_7 = 0$ $M_7 = 2$ $\uparrow \downarrow$ $\uparrow \uparrow$	$E_8 = 0$ $M_8 = 2$ $\downarrow \uparrow$ $\uparrow \uparrow$
$E_9 = 0$ $M_9 = -2$ $\downarrow \downarrow$ $\downarrow \uparrow$	$E_{10} = 0$ $M_{10} = -2$ $\downarrow \downarrow$ $\uparrow \downarrow$	$E_{11} = 0$ $M_{11} = -2$ $\uparrow \downarrow$ $\downarrow \downarrow$	$E_{12} = 0$ $M_{12} = -2$ $\downarrow \uparrow$ $\downarrow \downarrow$
$E_{13} = 8J$ $M_{13} = 0$ $\uparrow \downarrow$ $\downarrow \uparrow$	$E_{14} = 8J$ $M_{14} = 0$ $\downarrow \uparrow$ $\uparrow \downarrow$	$E_{15} = -8J$ $M_{15} = -4$ $\downarrow \downarrow$ $\downarrow \downarrow$	$E_{16} = -8J$ $M_{16} = 4$ $\uparrow \uparrow$ $\uparrow \uparrow$

Videre kan vi finne partisjonsfunksjonen for systemet

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} = 2e^{-8\beta J} + 4 + 4 + 4 + 2e^{8\beta J} = 4(\cosh 8\beta J + 3) \quad (11)$$

Vi har også:

$$\frac{\partial Z}{\partial \beta} = 32J \sinh 8\beta J \quad (12)$$

Dette gir oss raskt flere interessante størrelser, som vi siden kan sammenlikne med numeriske resultater fra simulering:

$$\langle E \rangle = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{1}{4(\cosh 8\beta J + 3)} (32J \sinh 8\beta J) = -\frac{8J \sinh 8\beta J}{\cosh 8\beta J + 3} \quad (13)$$

$$\langle E^2 \rangle = \sum_i \frac{E_i^2 e^{-\beta E_i}}{Z} = \frac{128J^2 (e^{-8\beta J} + e^{8\beta J})}{4(\cosh 8\beta J + 3)} = \frac{64J^2 \cosh 8\beta J}{\cosh 8\beta J + 3} \quad (14)$$

$$\langle M \rangle = \sum_i \frac{M_i e^{-\beta E_i}}{Z} = \frac{4e^{8\beta J} - 4e^{8\beta J} + 8 - 8}{Z} = 0 \quad (15)$$

$$\langle M^2 \rangle = \sum_i \frac{M_i^2 e^{-\beta E_i}}{Z} = \frac{4^2 e^{8\beta J} + 4^2 e^{8\beta J} + 16 + 16}{4(\cosh 8\beta J + 3)} = \frac{8(e^{8\beta J} + 1)}{\cosh 8\beta J + 3} \quad (16)$$

$$\langle |M| \rangle = \sum_i \frac{|M_i| e^{-\beta E_i}}{Z} = \frac{4e^{8\beta J} + 4e^{8\beta J} + 8 + 8}{4(\cosh 8\beta J + 3)} = \frac{8(e^{8\beta J} + 2)}{4(\cosh 8\beta J + 3)} = \frac{2(e^{8\beta J} + 2)}{\cosh 8\beta J + 3} \quad (17)$$

$$\chi = \beta \left(\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2 \right) \quad (18)$$

$$C_v = \frac{64\beta J \cosh 8\beta J}{\cosh 8\beta J + 3} \quad (19)$$

Metropolisalgoritmen

For å utføre simuleringen benytter vi oss av Metropolisalgoritmen. Vi simulerer ett stykke ferromagnetisk metallstykke ved å lage et gitter der hver node kan ta verdiene $s_i = [-1, 1]$ og vi holder oss til to dimensjoner. Dette er Ising-modellen (i to dimensjoner). I algoritmen velger vi oss ut en tilfeldig posisjon i gitteret og flipper spinnet i noden dersom endringen i energi er negativ. Dersom endringen er positiv snur vi spinnet med en sannsynlighet gitt av $w = e^{-\beta \Delta E}$ der β er $\frac{1}{k_B T}$, k_B er Boltzmann's konstant, T er temperatur og ΔE er endringen i temperatur.

For å finne energien lar vi hvert spinelement virke på sine umiddelbare naboer, slik at energien vi summerer over egentlig er energien som ligger i hver binding. Dersom vi ser på en binding av gangen ser vi at vi kan skrive endringen i energi dersom vi flipper en spin som

$$\Delta E_i = -J s_i s_e + J s_i s_f$$

for $i = [1, 2, 3, 4]$ der i løper over de fire naboene og s_f og s_e er det spinelementet som blir flippet henholdsvis før og etter. Da får vi

$$\Delta E_{tot} = J [(s_1 + s_2 + s_3 + s_4) s_f - (s_1 + s_2 + s_3 + s_4) s_e]$$

$$\Delta E_{tot} = J (s_1 + s_2 + s_3 + s_4) (s_f - s_e)$$

Fra dette ser vi at endringen i energi for et slikt system alltid kan skrives som

$$\Delta E = [-8J, 0, 8J]$$

for $L = 2$ og

$$\Delta E = [-8J, -4J, 0, 4J, 8J]$$

for $L > 2$. Altså finnes det bare 5 mulige endringer i energi for ett enkelt spinn flipp.

Ved beregninger på Ising-modellen i to dimensjoner, er antallet mulige konfigurasjoner gitt som 2^N - der $N = L \times L$ er antallet spinn i gitteret vi ser på, med gitterlengde L . Metropolisalgoritmen benytter bare sannsynlighets-forholdstall, så vi trenger ingen beregning av partisjonsfunksjonen.

Metoder

Når vi implimenterer teorien til Isingmodellen i en simulering er det å finne energien og magnetiseringen sentrale punkter. For å finne magnetiseringen summerer vi ganske enkelt over alle punkter i Ising matrisen og blir gjort av funksjonen magnetisation i koden. For å finne energien bruker vi som beskrevet i teoridelen at energien er gitt ved $E = -J\sum_{\langle k,l \rangle} s_k s_l$ og summerer dermed bare over de nærmeste naboene. Dersom vi for alle punkt bare summerer over naboen under og til venstre vil vi til slutt summe over alle bindinger. Vi tar med periodiske grensebetingelser og alle punkter har dermed fire naboer. I koden vår gjør funksjonen energyfind dette.

I Metropolis algoritmen velger vi oss ett tilfeldig punkt og prøver å flippe spinnets i dette punktet. Dette gjør vi gjentatte ganger og hvert forsøk er en Monte Carlo syklus. For hver Monte Carlo syklus summer vi opp magnetisering og energi og snitter som gir oss forventningsverdiene $\langle E \rangle$, $\langle E^2 \rangle$, $\langle |M| \rangle$ og $\langle M^2 \rangle$ som videre gir oss varmekapasitet C_v og susceptibilitet χ . Når vi danner forventningsverdier hopper vi over de første 10^4 syklusene for å bare ta med den delen av Metropolisalgoritmen der systemet er nær likevekten.

Sannsynligheten for å flippe spinnets i Metropolis algoritmen er gitt av en relativ sannsynlighetsfaktor. Siden sannsynligheten for at systemet skal være i en gitt tilstand er

$$P_i = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_i}$$

Forholdet mellom sannsynlighetene for at et system er i to tilstander er gitt som

$$\frac{P_i}{P_j} = e^{-\beta E_i - E_j} = e^{-\beta \Delta E}$$

Dette forholdet benytter vi oss av som sannsynligheten for å utføre en spinflip. På denne måten slipper vi å finne partisjonsfunksjonen Z i koden vår. For å vite om vi skal utføre en slik flip må vi finne w i hvert Monte Carlo syklus, og w avhenger av eksponensial funksjonen. Å ha en eksponensial funksjon i en løkke som går over minst 10^6 iterasjoner kan bli kostbart med tanke på FLOPS, så vi testet om vi sparte tid på å ta den ut fra løkka. Det gjorde vi ikke, og vi mistenker at Compileren vår gjorde det for oss siden vi ikke klarte å oppdage noen forskjell. Vi valgte allikevel å trekke eksponentialfunksjonen utenfor Monte Carlo løkka.

Når programmet var ferdig og alle data funnet, gikk vi tilbake for å sjekke om hele programmet fungerte som det skulle. Da oppdaget vi at vi hadde fjernet funksjonalitet vi hadde brukt i oppgave d). Siden vi har vært litt sent ute med programmet vårt, fant vi ikke tid til å reimplimentere denne funksjonaliteten, så vi brukte en gammel metropolis funksjon slik at vi har en egen funksjon for å løse oppgave b), c) og d).

Resultater og presisjon

Siden Ising systemet er løselig for $L = 2$ har vi først funnet forventningsverdien av energi og magnetisering samt varmekapasitet og susceptibilitet. Vi sammenligner de analytiske løsningene med simulering for $L = 2$. Fra figur 1, 2, 3 og 4 ser vi at den numeriske løsningen fluktuerer rundt den analytiske med en feil på ca. ± 0.0005 for energi og ± 0.005 for magnetisering. Videre ser man at energien ligger litt over den analytiske løsningen i snitt, mens for magnetisering ligger like under. Men feilen ser ut til å konvergere etter mange nok Monte Carlo sykluser. Her er det liten forbedring etter 0.5×10^7 sykluser. Så vi ser at vi antakeligvis burde ha kastet de første 10^7 syklusene og ikke de første 10^4 som vi gjorde. Videre vil vi forvente svært jevne resultater først etter 10^8 eller 10^9 sykluser.

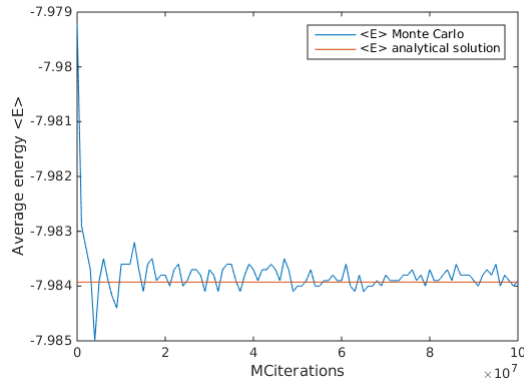


Figure 1: Her ser vi forventingsverdien til energien som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 2$ - plottet sammen med den analytiske løsningen.

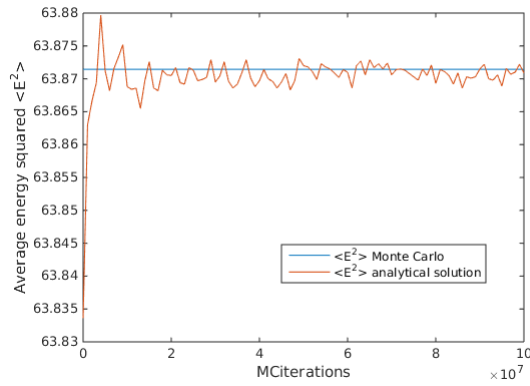


Figure 2: Figuren viser forventingsverdien til energien kvadrert som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 2$ - plottet sammen med den analytiske løsningen.

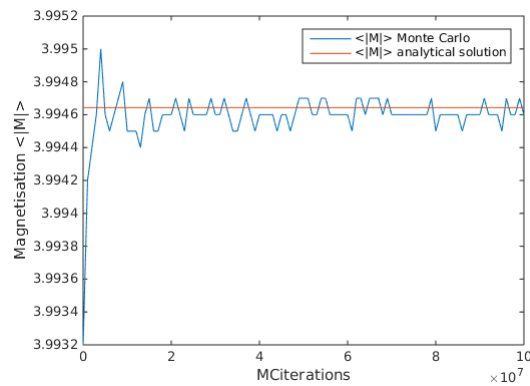


Figure 3: Plot av forventingsverdien til absoluttverdien av magnetiseringa som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 2$ - plottet sammen med den analytiske løsningen.

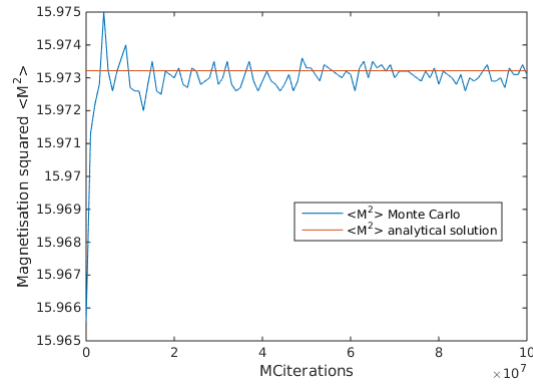


Figure 4: Figuren viser forventingsverdien til magnetiseringa kvadrert som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 2$ - plottet sammen med den analytiske løsningen.

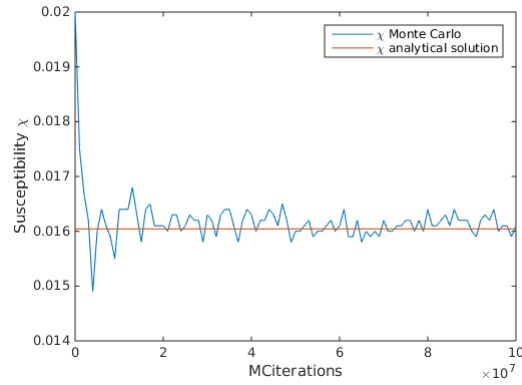


Figure 5: Figuren viser forventingsverdien til susceptibiliteten som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 2$ - plottet sammen med den analytiske løsningen.

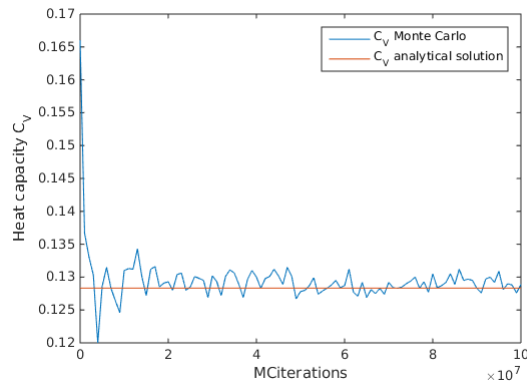


Figure 6: Figuren viser forventingsverdien til varmekapasiteten som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 2$ - plottet sammen med den analytiske løsningen.

Vi øker gitterstørrelse til $L = 20$ og sammenligner tilfeldig start med en ordnet start, samt når temperaturen er 1 og 2.4. Fra figur 7, 8, 9 og 10 ser det ut som at det trengs 0.5×10^5 sykler. Videre kan man sammenligne antallet aksepterte Monte Carlo sykler som et mål på hvorvidt man er kommet nær likevektspunktet. Fra figur 11 spesielt er det tydelig at så og si alle Monte Carlo syklene blir akseptert fram til likevekts punktet blir nådd, deretter flater kurven brått ut og vi ser at verdiene nærmer seg en bestemt verdi samtidig som antallet aksepterte Monte Carlo sykluser får samme stigningstall. Dette indikerer at man kan bruke aksepterte Monte Carlo sykluser for å finne når man burde starte å telle med hva som er likevektspunktet. Videre, ved å sammenligne $T = 1$ og $T = 2.4$ er det tydelig at man må ha mange Monte Carlo sykluser for å få et godt gjennomsnitt. To kjøringar vil ha avvikende gjennomsnitt for hver verdi. Vi anslår som et røft estimat basert på øyemål av de ovennevnte grafene at antall Monte Carlo sykluser må godt over 10^5 som vist på grafene. I den siste delen av prosjektet, der vi skal finne kritisk temperatur måtte vi kjøre 10^8 sykluser for å få et resultat der man kan begynne å lese av oppførselen rundt kritiske temperatur med noen særlig grad av nøyaktighet.

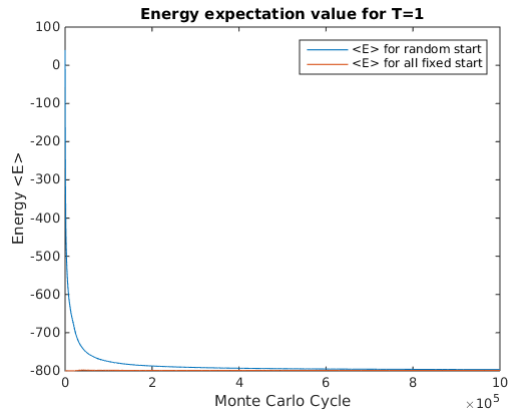


Figure 7: Her ser vi forventingsverdien til energien som en funksjon av antal gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 1$. Vi har med både en randomisert startkonfigurasjon og en startkonfigurasjon med alle spinn pekende opp.

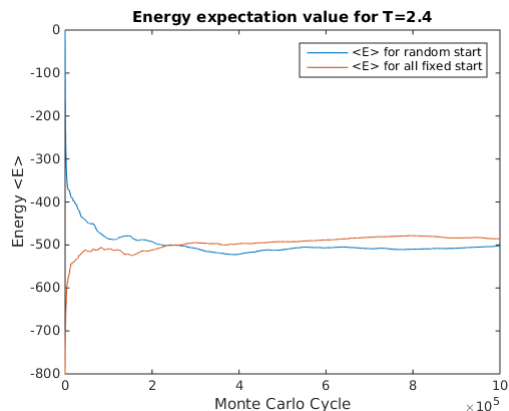


Figure 8: Her ser vi forventingsverdien til energien som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 2.4$. Vi har med både en randomisert startkonfigurasjon og en startkonfigurasjon med alle spinn pekende opp.

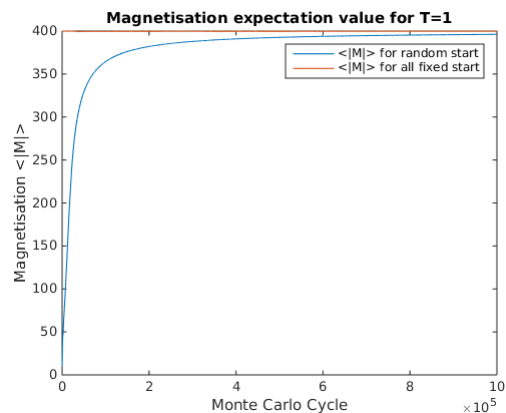


Figure 9: Her ser vi forventingsverdien til absoluttverdien av magnetiseringa som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 1$. Vi har med både en randomisert startkonfigurasjon og en startkonfigurasjon med alle spinn pekende opp.

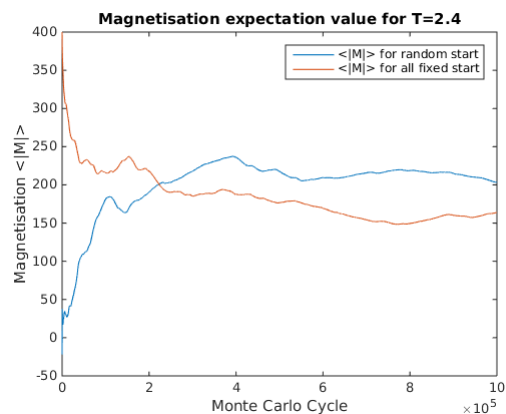


Figure 10: Her ser vi forventingsverdien til absoluttverdien av magnetiseringa som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 2.4$. Vi har med både en randomisert startkonfigurasjon og en startkonfigurasjon med alle spinn pekende opp.

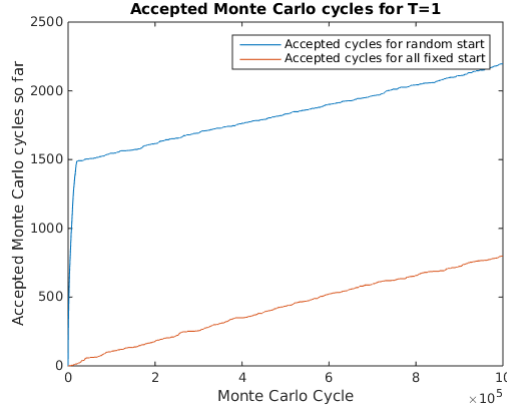


Figure 11: Her ser vi antallet aksepterte vendinger av spinn som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 1$. Vi har med både en randomisert startkonfigurasjon og en startkonfigurasjon med alle spinn pekende opp.

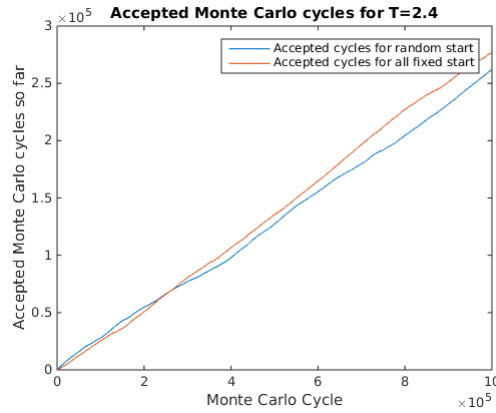
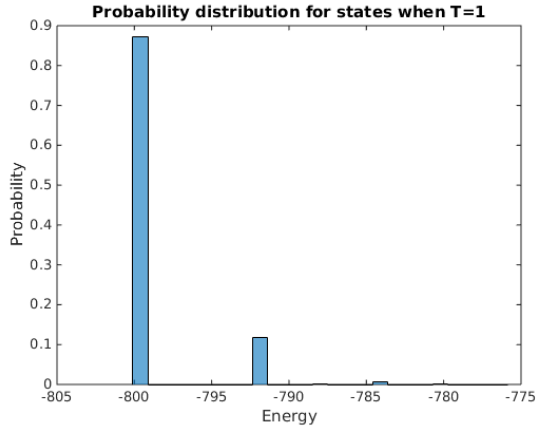


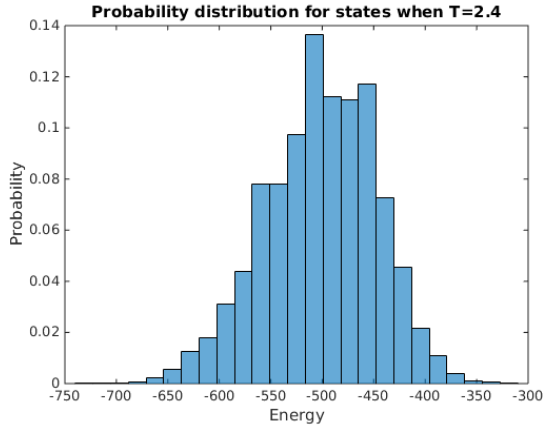
Figure 12: Her ser vi antallet aksepterte vendinger av spinn som en funksjon av antall gjennomførte Monte Carlo-sykler, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 2.4$. Vi har med både en randomisert startkonfigurasjon og en startkonfigurasjon med alle spinn pekende opp.

I figur 13 og 14 har vi laget histogram over hvilke energitilstander som blir opptatt i systemet slik at høyden på histogrammet gir sannsynlighetsfordeling. I figur 13 er temperaturen lav ved $T = 1$ og vi ser at det er svært få tilstander som blir opptatt. Til sammenligning ser vi av figur 14 at når temperaturen er $T = 2.4$ er svært mange flere tilstander tilgjengelig for systemet og vi får noe som minner om en gaussisk fordeling. Variansen σ_E for de to systemene er $\sigma_E^2(T = 1) = 8.8$ og $\sigma_E^2(T = 2.4) = 2.9 \times 10^3$. Så, den teoretiske gaussiske fordelingskurven blir skarp for lav energi og langt bredere for høyere temperatur.

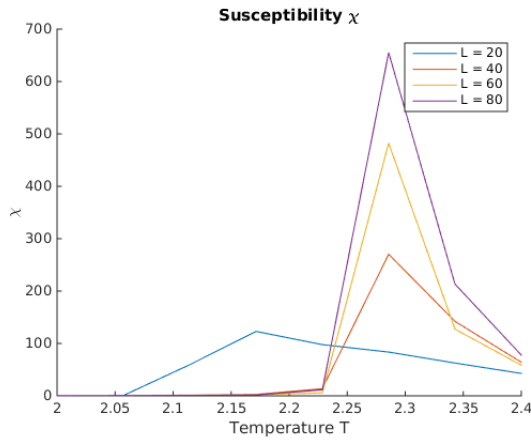
Videre plotter vi Susceptibilitet χ , varmekapasitet C_v , energi $\langle E \rangle$ og magnetisering $\langle |M| \rangle$ for $L = (20, 40, 60, 80)$ mellom temperaturene $T = (2, 2.4)$. Fra figurene ser vi at det er antydning til faseovergang. Det er ikke veldig tydelig på våre figurer, siden vi burde ha kjørt med flere Monte Carlo sykler, men det er en antydning. Ser fra oppførselen til varmekapasiteten og susceptibiliteten spesielt at faseovergangen er rundt $T = 2.3$. Dette er tydelig side $C_v \approx |T_C - T|^{-\gamma}$ når $T \rightarrow T_C$ for $L \rightarrow \infty$. Tilsvarende for susceptibiliteten. Fra grafene ser man at kritiske temperatur burde være mellom $T_C = 2.25$ og $T_C = 2.35$. Oppløsningen vår er litt dårlig, men ser man på magnetiseringen virker det som at kritisk temperatur er litt før $T = 2.3$, så basert på dette ser det ut som at kritisk temperatur ligger på ca. $T = 2.27$ som passer bra med Lars Onsager sin analytiske løsning.



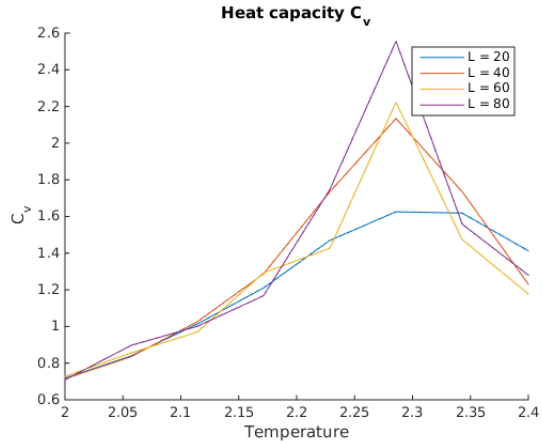
(a) Histogram av sannynligheten for å finne systemet i en energi-tilstand, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 1$.



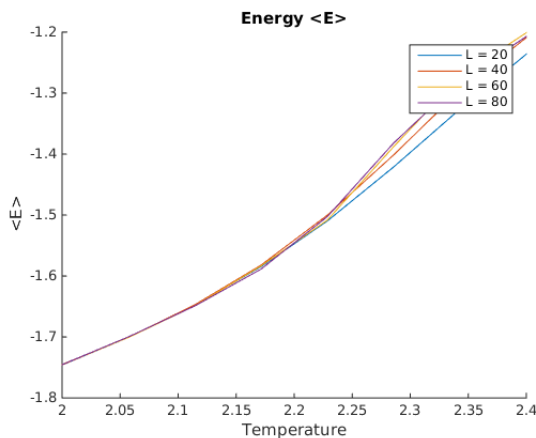
(b) Histogram av sannynligheten for å finne systemet i en energi-tilstand, for tilfellet med gitterstørrelse $L = 20$ - plottet for temperatur $T = 2.4$.



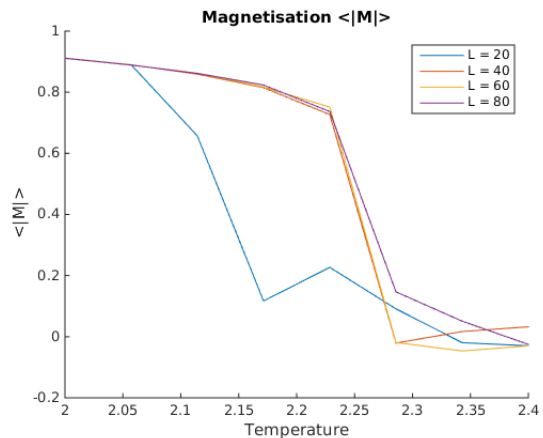
(a) Susceptibilitet χ som funksjon av temperatur for forskjellige gitter størrelser fra $L = 20$ til $L = 80$.



(b) Varmekapasitet C_v som funksjon av temperatur for forskjellige gitter størrelser fra $L = 20$ til $L = 80$.



(a) Forventnings verdien av energien $\langle E \rangle$ som funksjon av temperatur.



(b) Absolutt verdien av magnetisering $\langle |M| \rangle$ som funksjon av temperatur.

Konklusjon

Vi ser at programmet vårt krever endel effektivisering for å kunne kjøre med tilstrekkelig nøyaktighet for å finne kritisk temperatur med noen særlig god grad av sikkerhet, men det er mulig å se en trend og det går an å gjette på hvor faseovergangen skjer. Med et program som er slik vi har skrevet det, burde det være mulig å få vilkårlig nøyaktighet dersom vi bruker nok tid, siden programmet ikke opptar minne med hensyn på Monte Carlo sykluser. Dermed ville det i teorien være mulig å la programmet gå lenge nok, dersom vi ikke tar hensyn til numeriske feil som for eksempel trunkeringsfeil når vi summerer et stort og et lite tall og at store nok tall kan representeres i maskinen. Men, programmet er tregt, og kan med fordel effektiviseres. For eksempel er vi usikre på om paralleliseringen er gjort på best mulig måte.

Videre virker det som at vår metode konvergerer litt sakte mot forventningsverdiene. På siste del av oppgaven måtte vi kjøre 10^8 Monte Carlo sykluser for å få et brukbart resultat.