Tarea 2: FIM8451 - Mecánica Estadística Avanzada
Instituto de Física
Pontificia Universidad Católica de Chile
Prof: B. Loewe,
Segundo Semestre 2024
Fecha de Entrega: jueves 12 de Septiembre, 2024

Los problemas de esta tarea son principalmente numéricos. Adjunte copia del código que escribió y empleó, o mandé a baloewe@uc.cl (formato de asunto: "FIM8451 - Tarea 2: {Apellido}") link a repositorio GitHub, indicando esta opción en su tarea. Se evaluará la calidad de los gráficos, esperando calidad de publicación.

Problema 1

a). Implemente el algoritmo `direct-pi` (clase 4, slide 7). Usando $N = 10, 100, \ldots, 10^8$, corralo 20 veces cada vez. Usando data de estos runs, muestre que $N_{\text{hits}/N}$ converge a $\pi/4$, estime la desviación cuadrática media $\langle (N_{\text{hits}}/N - \pi/4)^2 \rangle$ y grafíquelo como función de N. ¿Cómo escala la desviación cuadrática media con N?

b). Implemente y corra elalgoritmo `markov-pi` (clase 4, slide 10), empezando desde la posición $(x_0, y_0) = (1, 1)$. Usando un rango de tiro $\delta = 0.3$, muestre nuevamente que $N_{\text{hits}/N}$ converge a $\pi/4$. Luego, estudiaremos la presición obtenidqa como función de δ y verificaremos la validez de la regla "one-half": Grafique la desviación cuadrática media $\langle (N_{\text{hits}}/N - \pi/4)^2 \rangle$, para un N fijo grande, como función de δ en el rango $\delta \in [0, 3]$. Grafique la tasa de rechazo de este algoritmo como función de δ. ¿Para qué valores de la tasa de rechazo se obtiene la mayor presición?

Problema 2

a). Implemente el algoritmo `gray-flip` (clase 5, slide 14) para N spins. Testeelo imprimiendo todas las configuraciones posibles para un número N pequeño y comparelas con las de la tabla en la slide 14, clase 5. Combine este algoritmo con el algoritmo `enumerate-ising` (clase 5, slide 15) para generar la densidad de estados de las redes cuadradas de dimensiones 2×2, 4×4 y 6×6 con y sin condiciones de borde periódicas. Consejo: para el caso 6x6, asegurese de escoger un formato de data capaz de mostrar todos los digitos.

b). Use la enumeración de `gray-flip` para generar histogramas con el número de configuraciones con energía E y magnetización M, $\mathcal{N}(E, M)$ en el modelo de Ising en redes cuadradas de tamaño 2×2, 4×4 y 6×6 con condiciones de borde periódicas. Sumando sobre M, recupere la data de la tabla en la slide 15, clase 5. Usando $\mathcal{N}(E, M)$, genere y grafique la distribución de probabilidad π_M de la magnetización por spin $m = M/N$ como función de la temperatura (compare con la figura en la slide 18, clase 5). Discuta el cambio cualitativo de π_M entre los regímenes unimodal y bimodal, el cual esta bien capturado por el Binder cumulant $B(T) = \frac{1}{2}\left[3 - \langle m^4(T)\rangle / \langle m^2(T)\rangle^2\right]$. Grafique $B(T)$ para las 3 redes y determine sus límites de alta y baja temperatura. Finalmente, muestre que los Binder cumulants de redes de distinto tamaño se intersectan casi exactamente en $T_c = 2/\ln(1+\sqrt{2})$

Problema 3

Implemente el algoritmo `markov-ising` (clase 5, slide 23), i.e., el algorimto local de Metropolis para el modelo de Ising. Ocupelo para medir la energía y el calor específico como función de la temperatura para una red de 6x6 con condiciones de borde periódica. Compare sus resultados (mínimo 4 cifras significativas) con los resultados exactos en la tabla en la slide 17 clase 5. Genere gráficos de la magnetización absoluta promedio como función de la temperatura para redes de distintos tamaños (4×4, 8×8, 16×16 y 32×32).

Problema 4

Implemente el algoritmo `cluster-ising` (clase 5, slide 34), i.e., el algoritmo de Wolff. Ocupelo para medir la energía y el calor específico como función de la temperatura para una red de 6x6 con condiciones de borde periódica. Compare sus resultados (mínimo 4 cifras significativas) con los resultados exactos en la tabla en la slide 17 clase 5. Usando este algoritmo, obtenga y grafique histogramas de la magnetización, y el Binder cumulant como función de la temperatura para redes de tamaño 6×6, 16×16, 32×32 y 64×64. Vuelva a verificar que los Binder cumulants se intersectan casi exactamente en T_c (ver problema 2).