

TAREA 2

MECÁNICA ESTADÍSTICA AVANZADA



PONTIFICIA
UNIVERSIDAD
CATÓLICA
DE CHILE

Gabriel Fraczinet González

24 de Septiembre de 2024



INSTITUTO DE FÍSICA
FACULTAD DE FÍSICA

Los Códigos fueron adjuntados en un .zip por correo.

Pregunta 1

(a)

Usando el algoritmo de `direct-pi` podemos ver que usando diferentes valores de N 20 veces, obtenemos los resultados de la figura 1

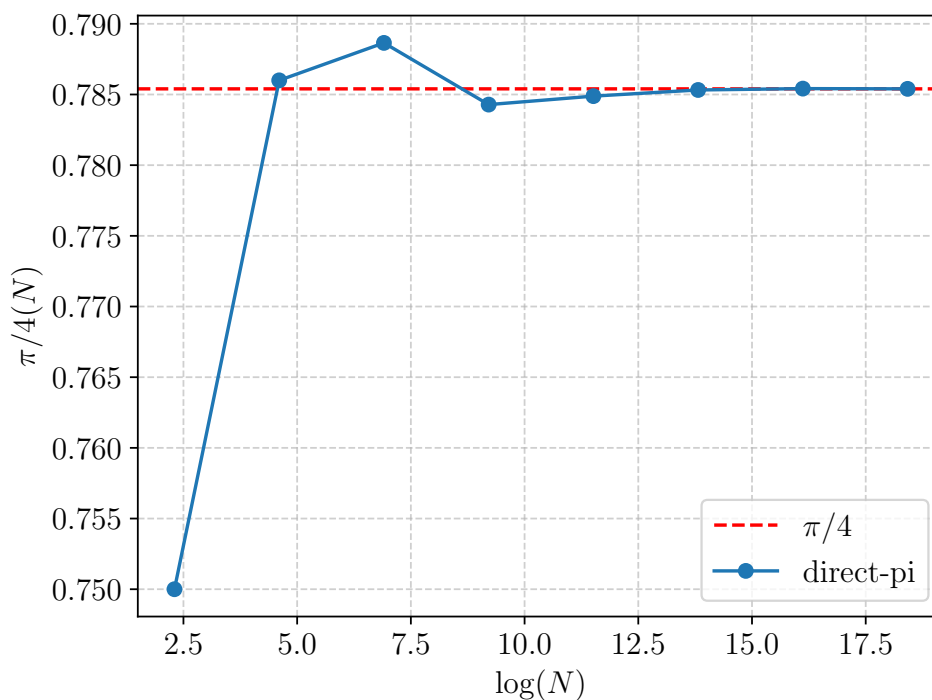


Figura 1: Valor de $\pi/4$ para diferentes valores de N

Al estar graficados para muchos valores de N , lo que hice fue promediar finalmente sobre todos los valores obtenidos para cada N . Vemos que converge a $\pi/4$ para valores grandes de N . Esto al igual que otros métodos numéricos, se tiene que para poder acercarse al valor exacto de π , es necesario cada vez usar N más grandes, esto nos habla de que para cuando $N \rightarrow \infty$ se tiene que el método debería llegar casi exactamente a $\pi/4$.

Luego graficando la desviación cuadrática media,

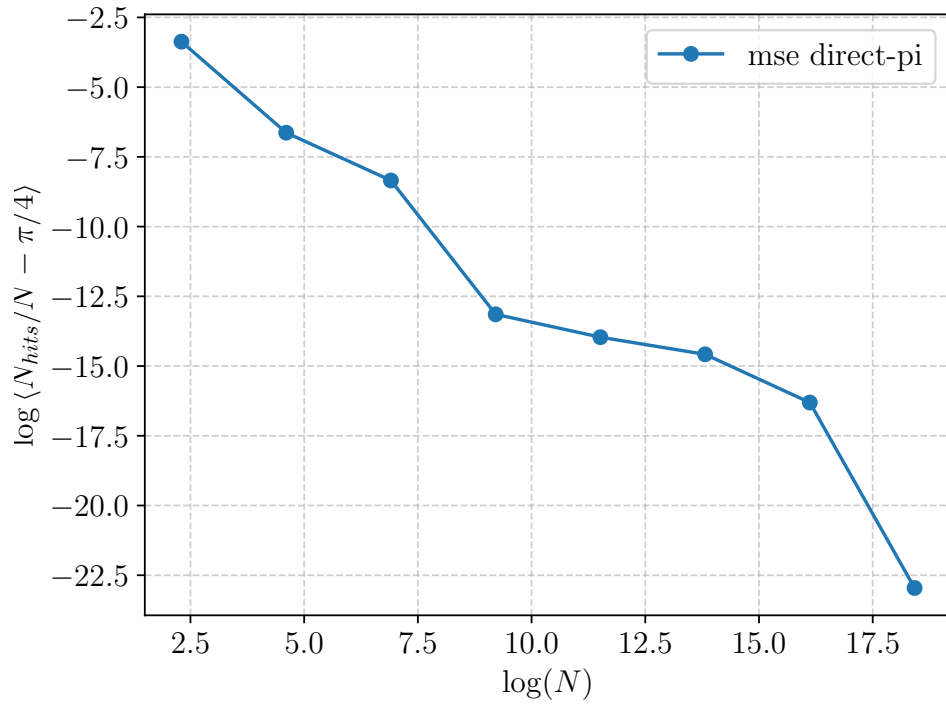


Figura 2: Desviación cuadrática media para diferentes valores de N

Donde al estar graficando en log-log al obtener un comportamiento casi lineal, vemos que la desviación cuadrática media decae de forma exponencial con N . Esto se hace evidente al pensar que para cuando se tienen valores de N cada vez más grandes, estos se van acercando a $\pi/4$.

(b)

Ahora usando el algoritmo de `markov-pi` podemos ver que nuevamente converge a $\pi/4$ para valores grandes de N .

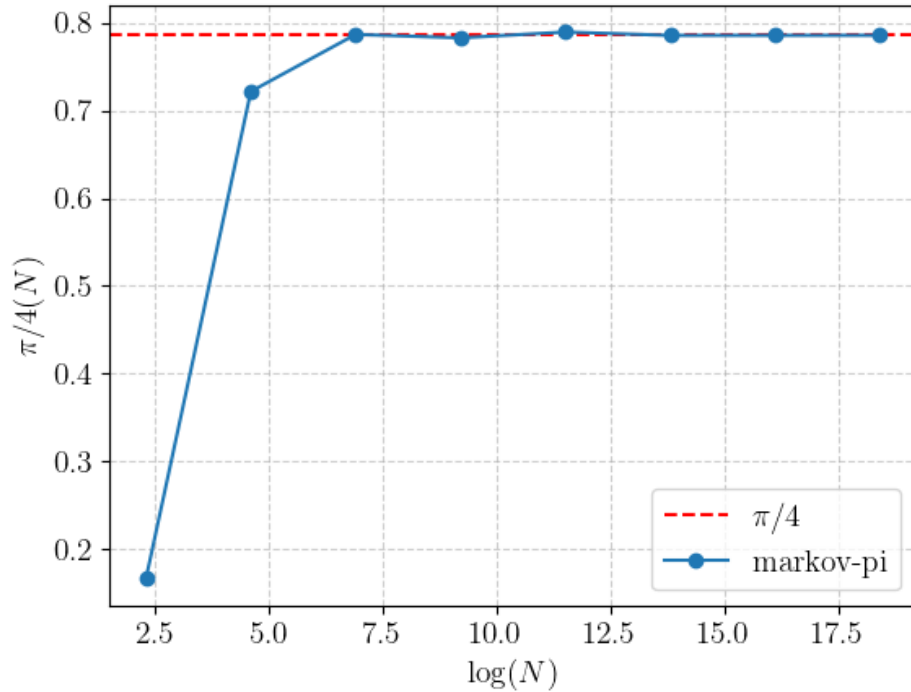


Figura 3: Valor de $\pi/4$ para diferentes valores de N con $\delta = 0,3$ usando el método de Markov

De este método, en comparación con el anterior, se observa que este converge más rápido hacia $\pi/4$ que el método de `direct-pi`. Luego graficando la desviación cuadrática media, en función de δ , con un $N = 10^6$ fijo con valores de $\delta \in [0, 3]$,

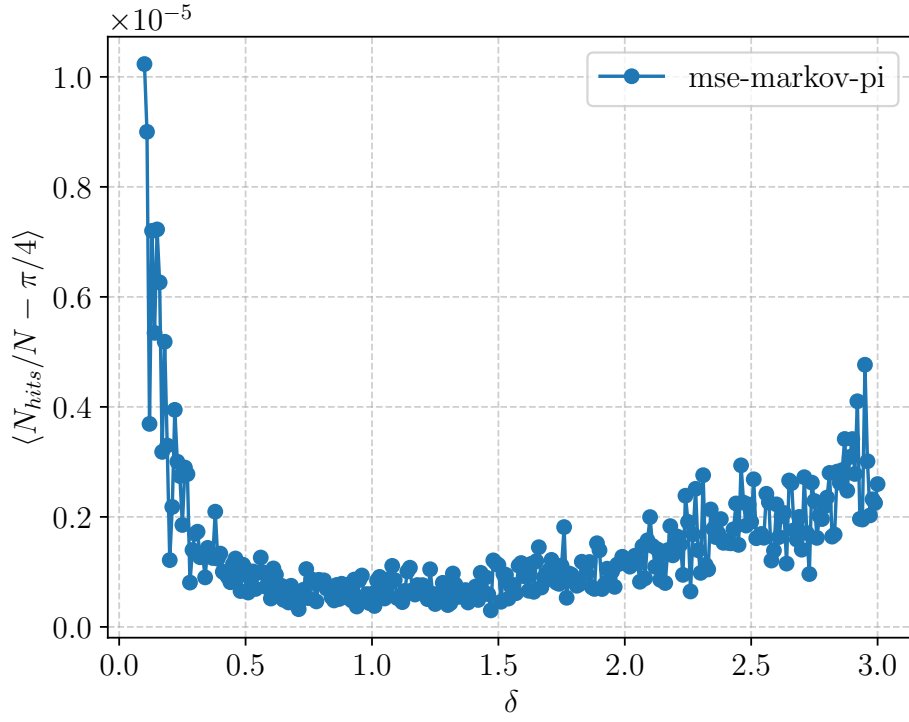


Figura 4: Desviación cuadrática media para diferentes valores de δ

Luego por último graficando la tasa de rechazo en función de δ . Acá podemos observar que para valores pequeños de δ se obtiene una alta tasa de aceptación casi entre $[\sim 0,3, \sim 1,5]$, donde además es posible observar que para valores más cercanos a $\delta = 3$, la tasa de rechazo, comienza a ser mucho mayor. Estos resultados son consistentes con lo planteado en clases (Clase 4 - Montecarlo).

Pregunta 2

(a)

Para este caso se tiene que usando el algoritmo `gray-flip` combinándolo con el algoritmo de `enumerate-ising` entonces de esta forma vemos que para $N = 2$, obtenemos, usando condiciones de borde periódicas, los estados de,

```
(base) gabbo@MacBook-Pro-de-Gabriel a % make run
Condiciones de borde: Periodicas.
Tamaño de la red: 2x2
Cantidad de configuraciones con energía -8: 2
Cantidad de configuraciones con energía 0: 12
Cantidad de configuraciones con energía 8: 2
```

Figura 5: Cantidad de configuraciones de energía para un sistema de $N = 2$

Luego para $N = 4$ obtenemos,

```
(base) gabbo@MacBook-Pro-de-Gabriel a % make run
Condiciones de borde: Periodicas.
Tamaño de la red: 4x4
Cantidad de configuraciones con energía -32: 2
Cantidad de configuraciones con energía -24: 32
Cantidad de configuraciones con energía -20: 64
Cantidad de configuraciones con energía -16: 424
Cantidad de configuraciones con energía -12: 1728
Cantidad de configuraciones con energía -8: 6688
Cantidad de configuraciones con energía -4: 13568
Cantidad de configuraciones con energía 0: 20524
Cantidad de configuraciones con energía 4: 13568
Cantidad de configuraciones con energía 8: 6688
Cantidad de configuraciones con energía 12: 1728
Cantidad de configuraciones con energía 16: 424
Cantidad de configuraciones con energía 20: 64
Cantidad de configuraciones con energía 24: 32
Cantidad de configuraciones con energía 32: 2
```

Figura 6: Cantidad de configuraciones de energía para un sistema de $N = 4$

En ambos casos, es posible ver que se recupera la tabla de la diapositiva 15 de la clase 5. Es posible observar para estos casos, que existe una simetría en la cantidad de configuraciones de energía, esto se debe a que para cada configuración de energía, existe una configuración de energía con la misma cantidad de energía pero con diferente configuración de spins. Entonces podemos representar $N(E) = N(-E)$

Para condiciones de borde no periódicas, obtenemos

```
(base) gabbo@MacBook-Pro-de-Gabriel a % make run
Condiciones de borde: No Periodicas.
Tamaño de la red: 2x2
Cantidad de configuraciones con energía -4: 2
Cantidad de configuraciones con energía 0: 12
Cantidad de configuraciones con energía 4: 2
```

Figura 7: Cantidad de configuraciones de energía para un sistema de $N = 2$

Para $N = 4$ obtenemos,

```

(base) gabbo@MacBook-Pro-de-Gabriel a % make run
Condiciones de borde: No Periodicas.
Tamaño de la red: 4x4
Cantidad de configuraciones con energía -24: 2
Cantidad de configuraciones con energía -20: 8
Cantidad de configuraciones con energía -18: 32
Cantidad de configuraciones con energía -16: 72
Cantidad de configuraciones con energía -14: 224
Cantidad de configuraciones con energía -12: 584
Cantidad de configuraciones con energía -10: 1216
Cantidad de configuraciones con energía -8: 2638
Cantidad de configuraciones con energía -6: 4928
Cantidad de configuraciones con energía -4: 7344
Cantidad de configuraciones con energía -2: 9984
Cantidad de configuraciones con energía 0: 11472
Cantidad de configuraciones con energía 2: 9984
Cantidad de configuraciones con energía 4: 7344
Cantidad de configuraciones con energía 6: 4928
Cantidad de configuraciones con energía 8: 2638
Cantidad de configuraciones con energía 10: 1216
Cantidad de configuraciones con energía 12: 584
Cantidad de configuraciones con energía 14: 224
Cantidad de configuraciones con energía 16: 72
Cantidad de configuraciones con energía 18: 32
Cantidad de configuraciones con energía 20: 8
Cantidad de configuraciones con energía 24: 2

```

Figura 8: Cantidad de configuraciones de energía para un sistema de $N = 4$

En este caso, al no tener condiciones de borde, es posible ver otras configuraciones de energía.

(b)

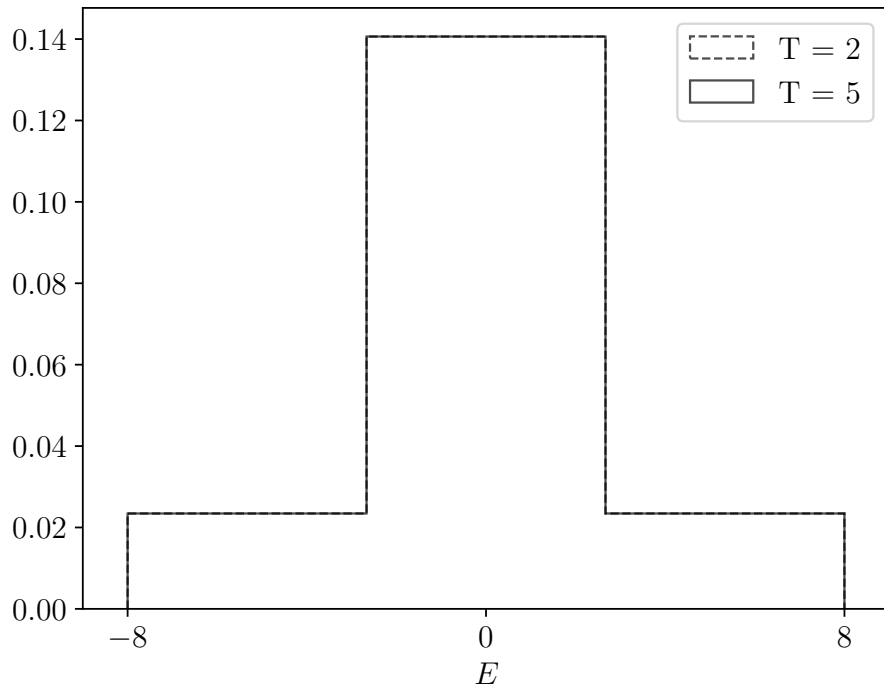


Figura 9: Histograma de energía para un sistema de $N = 2$

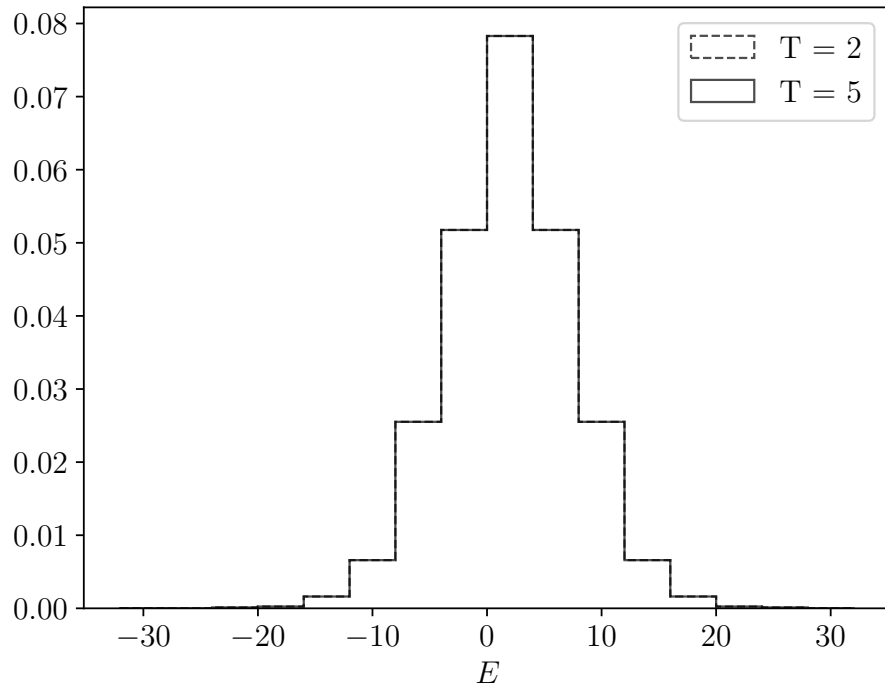


Figura 10: Histograma de energía para un sistema de $N = 4$

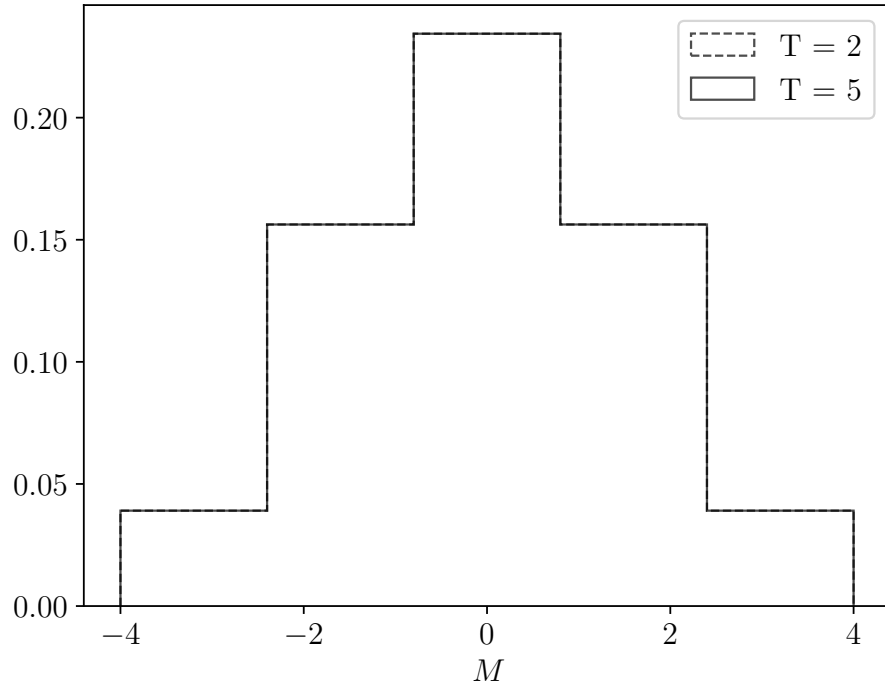


Figura 11: Histograma de magnetización para un sistema de $N = 2$

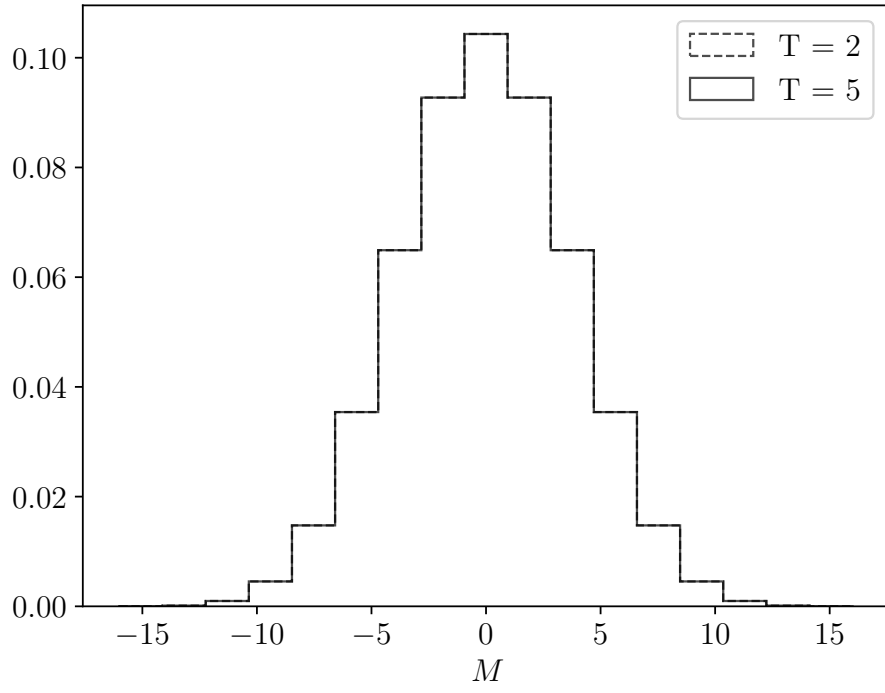


Figura 12: Histograma de magnetización para un sistema de $N = 4$

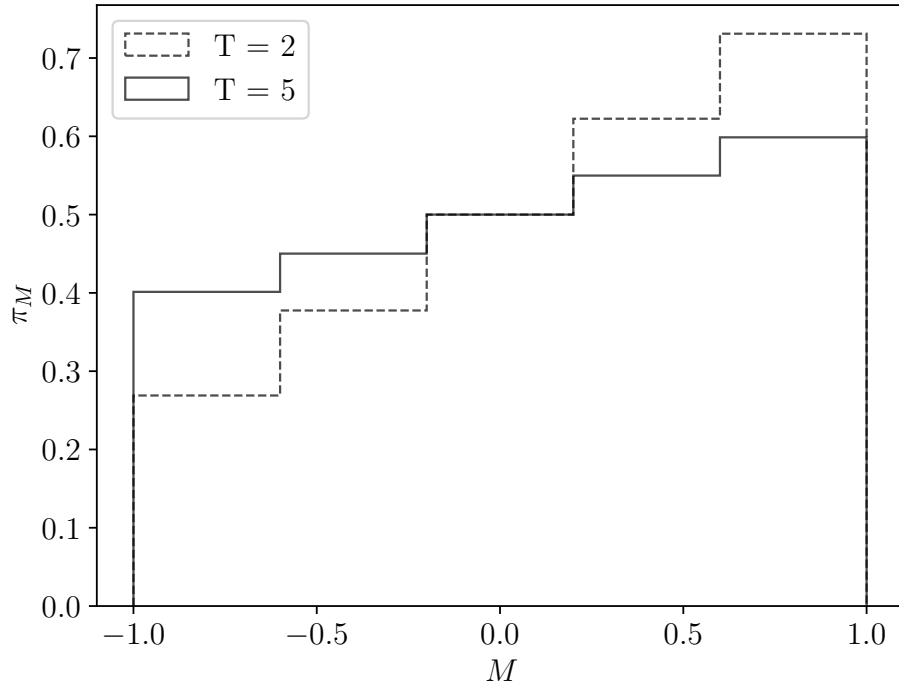


Figura 13: Histograma de π_M para un sistema de $N = 2$

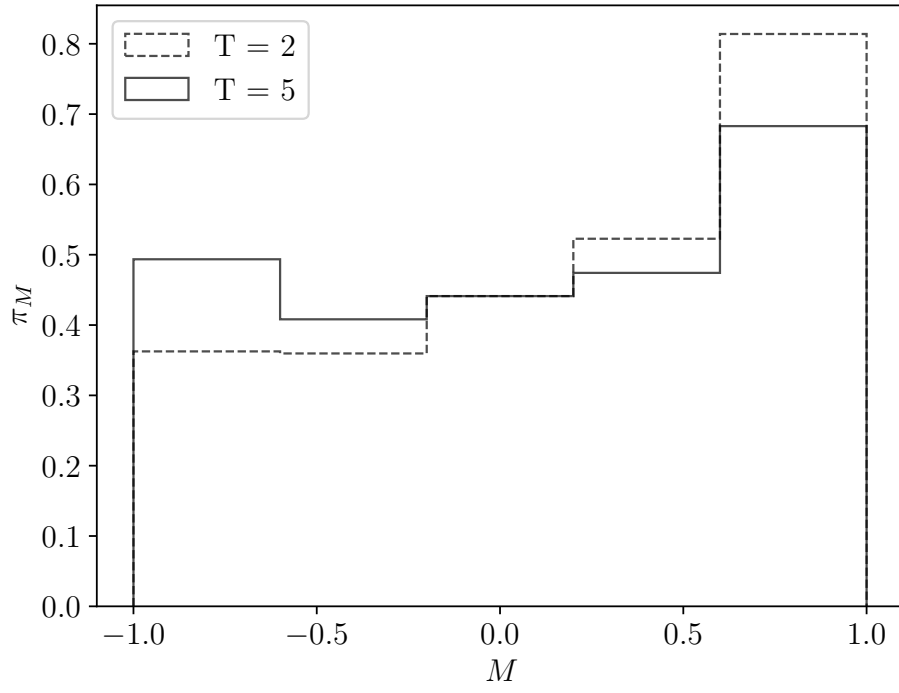


Figura 14: Histograma de π_M magnetización para un sistema de $N = 4$

Luego el binder cumulant para $N = 2$ es,

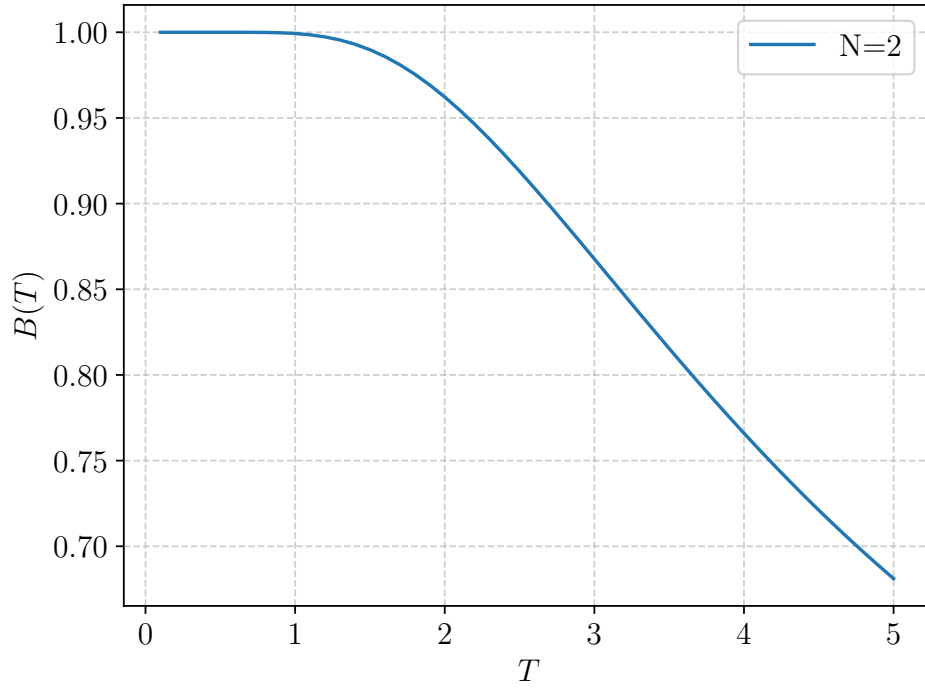


Figura 15: Binder cumulant para un sistema de $N = 2$

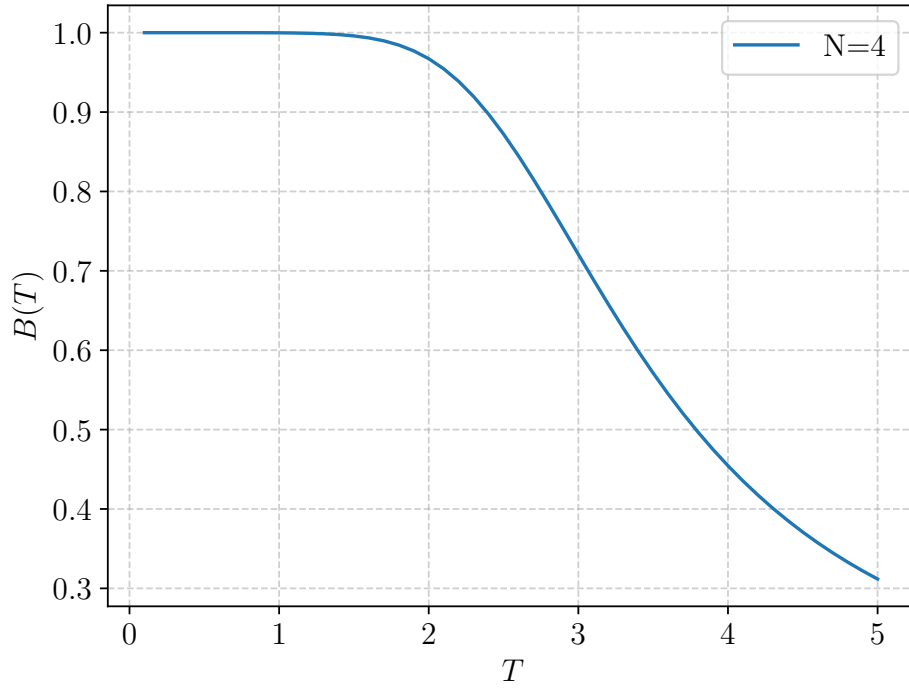


Figura 16: Binder cumulant para un sistema de $N = 4$

Podemos ver que el Binder Cumulant, casi intersectan en $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$, lo que es consistente con lo esperado.

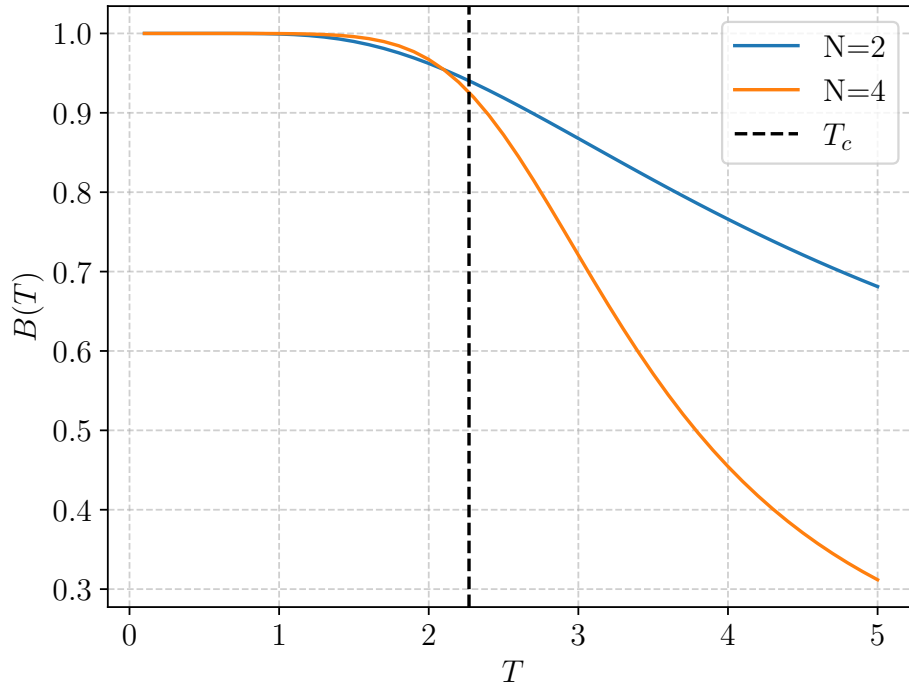


Figura 17: Binder cumulant para 2 redes de $N = 2$ y $N = 4$

Es posible observar que las curvas de Binder Cumulant, tienen valores donde ambas curvas coinciden, pero esto se me ocurre que tenga que ver con los comportamientos modal y bimodal, ahora esto, ocurre cercano a temperaturas a $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$. Esto porque para el minuto en el que hice esta pregunta ya había hecho la pregunta 4, donde en los histogramas Para $T = 2$ existía un comportamiento bimodal

y justamente para $T = 5$ hay un comportamiento unimodal, donde según las clases en el punto T_c es justamente la cota donde ocurre un comportamiento o el otro.

Pregunta 3

Entonces para este caso, tenemos que usando el algoritmo de `markov-ising` o `Metropolis`. Podemos calcular la energía y el calor específico como función de la temperatura para un red de $N = 6$. Usando condiciones de borde periódicas de esta forma podemos obtener los resultados según la figura 18

```
(base) gabbo@MacBook-Pro-de-Gabriel p3 % make run
Temperatura : 2, < E/N > : -1.7472, C_v : 0.692318
Temperatura : 2, < E/N > : -1.74716, C_v : 0.69438
Temperatura : 2, < E/N > : -1.74742, C_v : 0.6792
Temperatura : 2, < E/N > : -1.7472, C_v : 0.690191
Temperatura : 2, < E/N > : -1.74722, C_v : 0.691207
```

Figura 18: Energía y calor específico como función de la temperatura para una red de $N = 6$ para temperatura fija $T = 2$ y 10^6 Sampling Steps.

Donde notamos que comparando con la figura 19 obtenida desde la diapositiva 23 de la clase 5 podemos ver que los resultados son consistentes.

Run	$\langle E/N \rangle$	c_V	El resultado exacto		
1	-1.74772	0.68241	T	$\langle e \rangle$	c_V
2	-1.74303	0.70879	2.0	-1.747	0.68592
3	-1.75058	0.66216			
4	-1.74958	0.68106			
5	-1.75075	0.66770			

6x6 lattice, T=2, PBC, 10^6 samples

Figura 19: Energía y calor específico como función de la temperatura para una red de $N = 6$ para temperatura fija $T = 2$. Valores de referencias rescatados desde la clase.

De hecho dentro de los primeros 4 decimales, este método corresponde a una buen aproximación al sistema. Para poder obtener una mejor aproximación, es necesario obtener más runs. Además, es necesario hacer una fase de equilibración antes de calcular la energía promedio. Esto ya que es necesario tener una fase donde al igual que antes hagamos iteraciones del sistema para acercarnos al equilibrio (o valor real) debido a la aleatoriedad del proceso.

Por esto último de hecho es que se obtienen diferentes valores para la energía en el orden del cuarto decimal en comparación con la figura 19.

Luego graficando la magnetización absoluta promedio como función de la temperatura para una red de $N = 6$ tomando 10^6 Sampling Steps. Obtenemos la figura 20

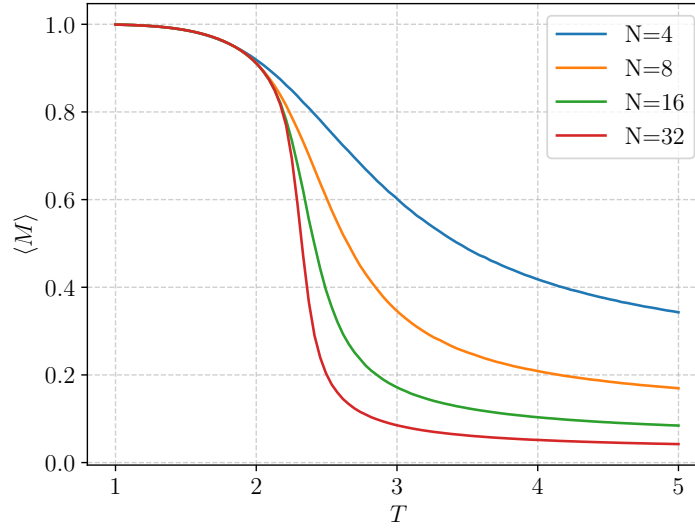


Figura 20: Magnetización absoluta promedio como función de la temperatura para una red de $N = 6$ para temperatura fija $T = 2$

Al graficar la magnetización contra la temperatura es posible observar que a temperaturas cercanas a $[0, 1]$, se tiene que la magnetización es constante. Esto se debe a que estamos cercanos al 0 de temperatura, otras teorías deberían ser válidas en los límites para cuando $T \gg 1$ o similares, pero deberíamos ver otros efectos y quizás la magnetización se podría no visualizar de manera completa.

Además es posible observar que para cuando mientras más grande es nuestra red de spines, más sensible es la magnetización a los cambios de temperatura, esto lo vemos en las curvas para cuando $N > 4$ donde cercano al punto de $T \approx 2,2$, la magnetización decae de forma significativa, siendo mientras más grande la red, esta decae más rápido.

Pregunta 4

Usando el algoritmo de `cluster-ising`, podemos ver que podemos recuperar los valores para la energía y calor específico,

```
(base) gabbo@MacBook-Pro-de-Gabriel p4 % make run
g++ -Wall -std=c++17 -Og -g -c main.cxx -o main.o
g++ -Wall -std=c++17 -Og -g -o miprograma.exe ising_model.o main.o
Red de tamaño N = 6 creada
T: 2, <E/N>: -1.74757, C_v: 0.680384
T: 2, <E/N>: -1.74713, C_v: 0.687286
T: 2, <E/N>: -1.74764, C_v: 0.675806
T: 2, <E/N>: -1.74743, C_v: 0.682411
T: 2, <E/N>: -1.74759, C_v: 0.685065
```

Figura 21: Energía y calor específico como función de la temperatura para una red de $N = 6$ para temperatura fija $T = 2$ y 10^6 Sampling Steps.

Es posible comparando los resultados nuevamente usando un tiempo de equilibración y calculando la energía poder recuperar los resultados casi exactos de la figura 19, pero usando ahora el método de `cluster-ising`, con la diferencia que para este método podemos llegar a resultados más exactos en los runs que hicimos, donde nos acercamos cada vez más al resultado de $C_v = 0,685$, pero al ser un método con cierto grado de aleatoriedad y necesitar un tiempo de equilibrio, mientras mayor sea el tiempo de equilibrio y mayor el número de runs, más deberíamos acercarnos a los valores exactos.

Ahora obteniendo los histogramas de magnetización, tenemos que para $N = 6$,

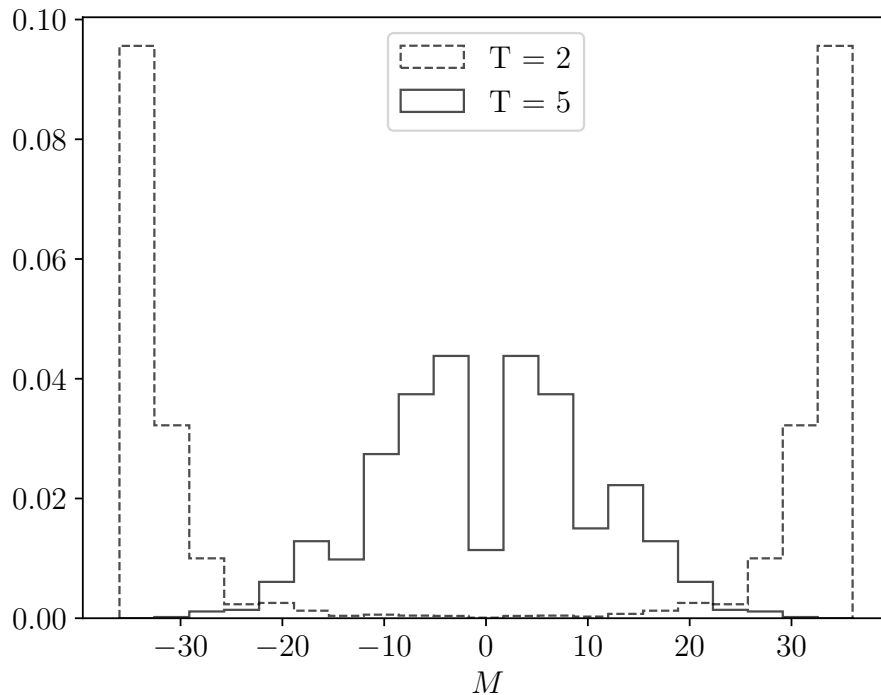


Figura 22: Histograma de magnetización para una red de $N = 6$

Luego para $N = 16$,

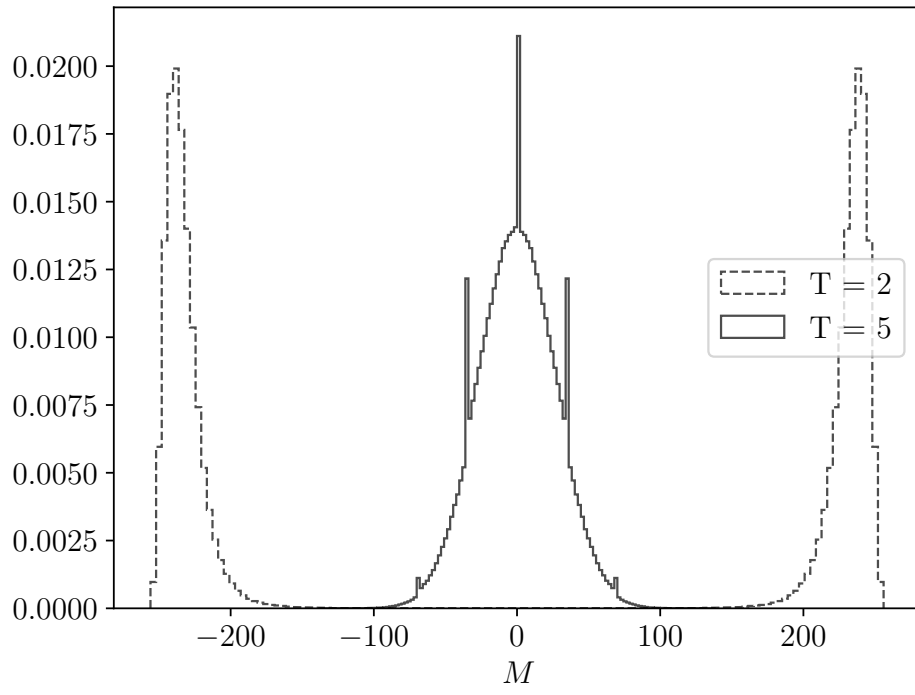


Figura 23: Histograma de magnetización para una red de $N = 16$

Luego para $N = 32$,

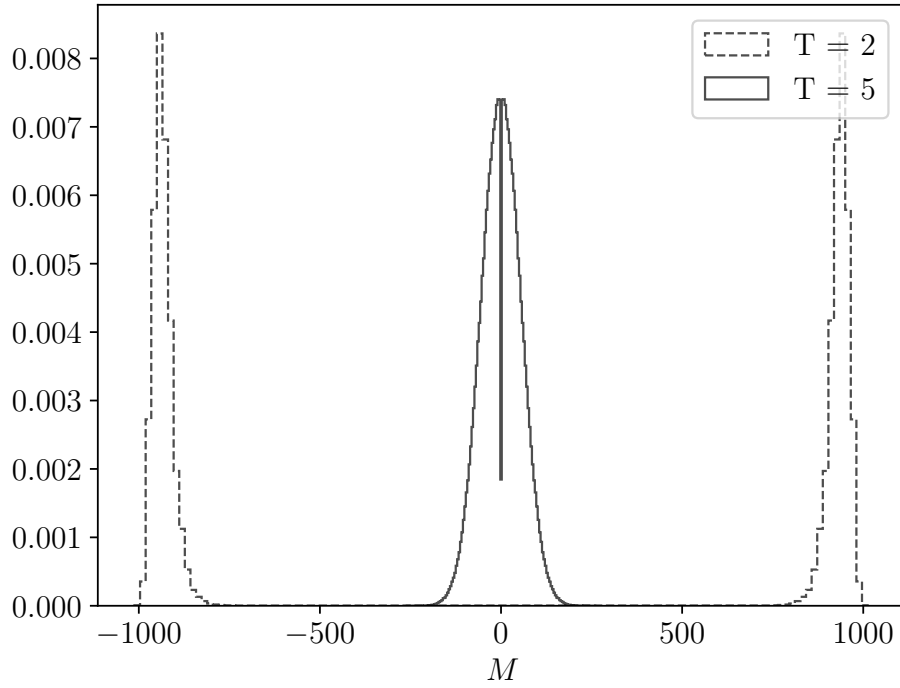


Figura 24: Histograma de magnetización para una red de $N = 32$

Luego para $N = 64$,

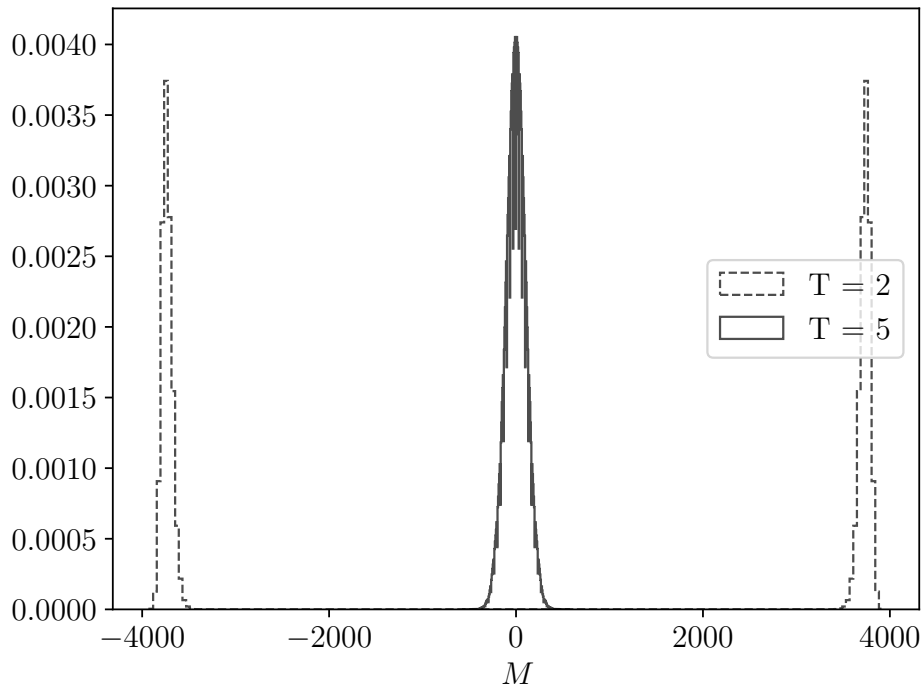


Figura 25: Histograma de magnetización para una red de $N = 64$

En los histogramas es posible ver que para todas las redes al graficar $T = 2$ y $T = 5$, existe un comportamiento bimodal y unimodal respectivamente. Esto es consistente con lo visto a través del binder cumulant de la pregunta 2. Se puede inferir nuevamente que entre $T = 2$ y $T = 5$ existe un

punto crítico donde se pasa de un comportamiento bimodal a unimodal. Graficando los binder cumulant para diferentes tamaños de red,

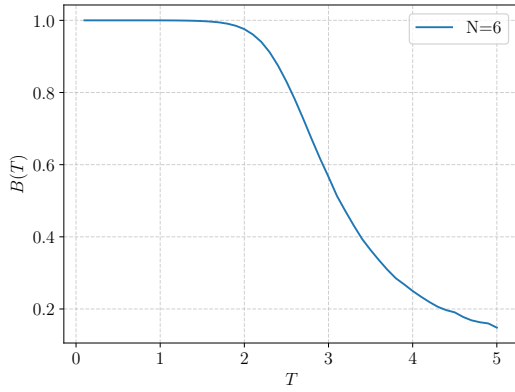


Figura 26: Binder cumulant para una red de $N = 6$

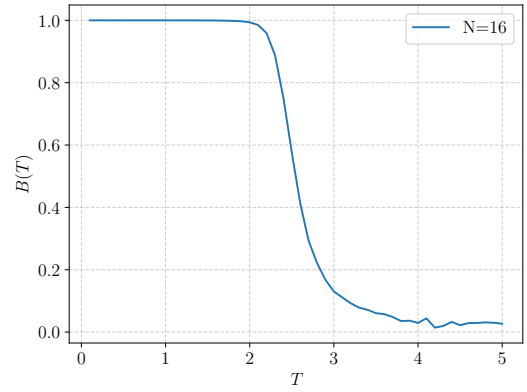


Figura 27: Binder cumulant para una red de $N = 16$

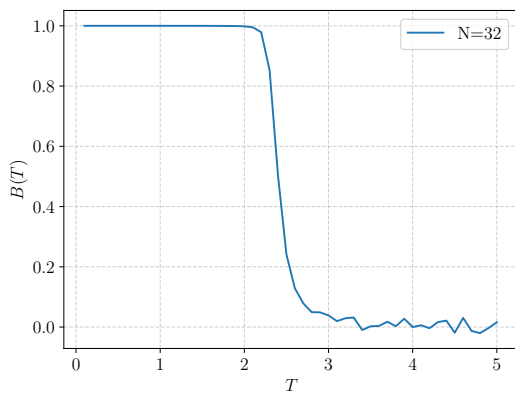


Figura 28: Binder cumulant para una red de $N = 32$

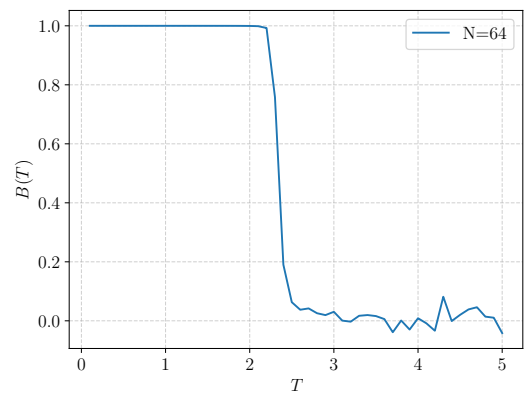


Figura 29: Binder cumulant para una red de $N = 64$

Graficando todas las curva dentro de un mismo canvas, es posible ver que estos intersectan casi en $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$, según,

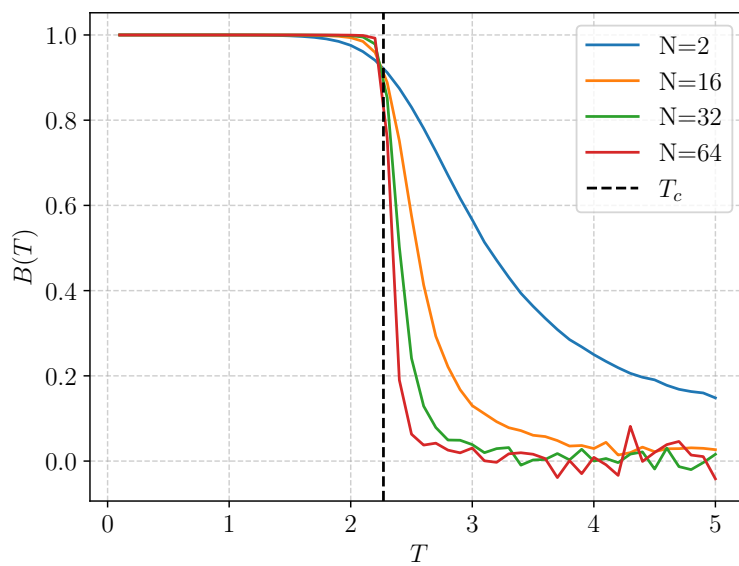


Figura 30: Binder cumulant para diferentes tamaños de red

Podemos inferir que justamente es en T_c donde los comportamientos unimodal y bimodal son críticos

y existe alguna transición entre ellos.