



# Mecánica Estadística Avanzada

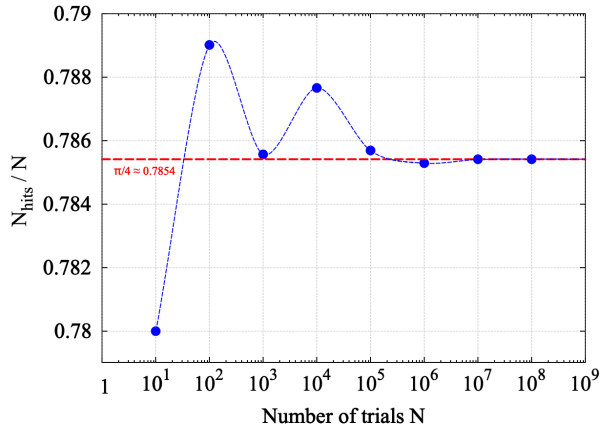
## Tarea 2

Martín Lagies Pettinelli  
24 de septiembre de 2024

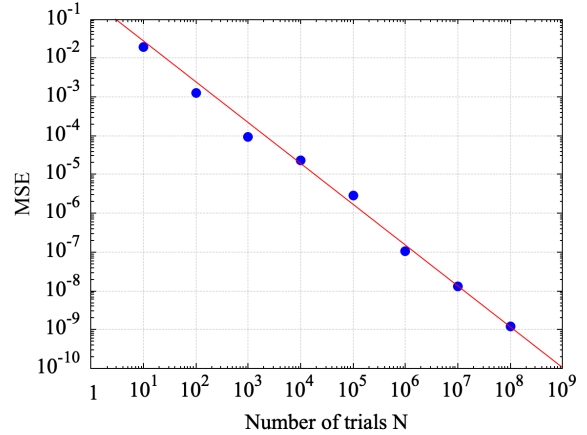
Link al repositorio de GitHub.

### Problema 1

- a) El algoritmo *direct-pi* está implementado en el archivo *direct\_pi.cpp*, y los resultados de las mediciones para  $N = 10, 100, \dots, 10^8$ , se encuentran en *data/data\_direct\_pi.txt*. La convergencia de  $N_{hits}/N$  se observa en la Figura 1(a).



- (a) Convergencia de  $N_{hits}/N$  a  $\pi/4$  según el número de intentos. Los puntos corresponden a las mediciones, mientras que la línea punteada se utiliza para mostrar la convergencia.



- (b) Desviación cuadrática media de  $N_{hits}/N$  respecto a  $\pi/4$  en función del número de intentos. Se presenta también una recta de ajuste.

**Figura 1:** Resultados del algoritmo *direct-pi*.

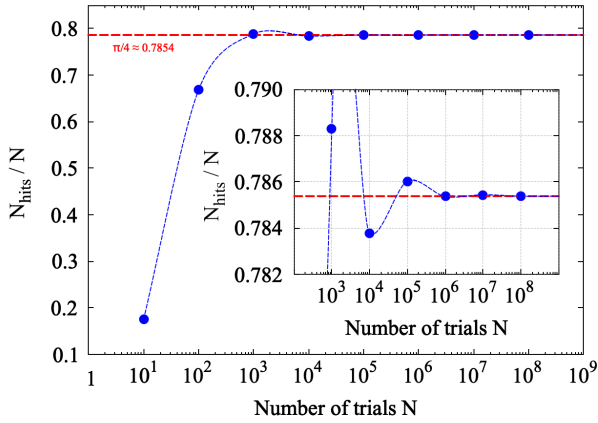
La tasa de convergencia puede ser estudiada a partir de la desviación cuadrática media (MSE)

$\langle (N_{hits}/N - \pi/4)^2 \rangle$ , la cual se presenta en la Figura 1(b). El comportamiento lineal bajo escala logarítmica sugiere utilizar un ajuste de la forma:

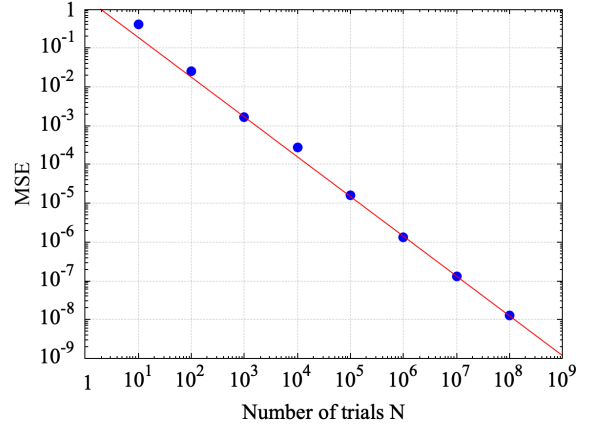
$$\log(f(N)) = A + b \log(N) \implies f(N) = aN^b$$

A partir de este ajuste se obtiene  $b \approx -1,05$ , lo que indica que la desviación cuadrática media va como, aproximadamente,  $\sim 1/N$ .

- b) El algoritmo markov-pi está implementado en el archivo *markov-pi.cpp*, y los resultados de las mediciones para  $(x_0, y_0) = (1, 1)$ ,  $\delta = 0,3$  y distintos valores de  $N$  se encuentran en *data/data-markov-pi.txt*. La convergencia de  $N_{hits}/N$  se observa en la Figura 2(a).



(a) Convergencia de  $N_{hits}/N$  a  $\pi/4$  según el número de intentos. Los puntos corresponden a las mediciones, mientras que la línea punteada se utiliza para mostrar la convergencia.

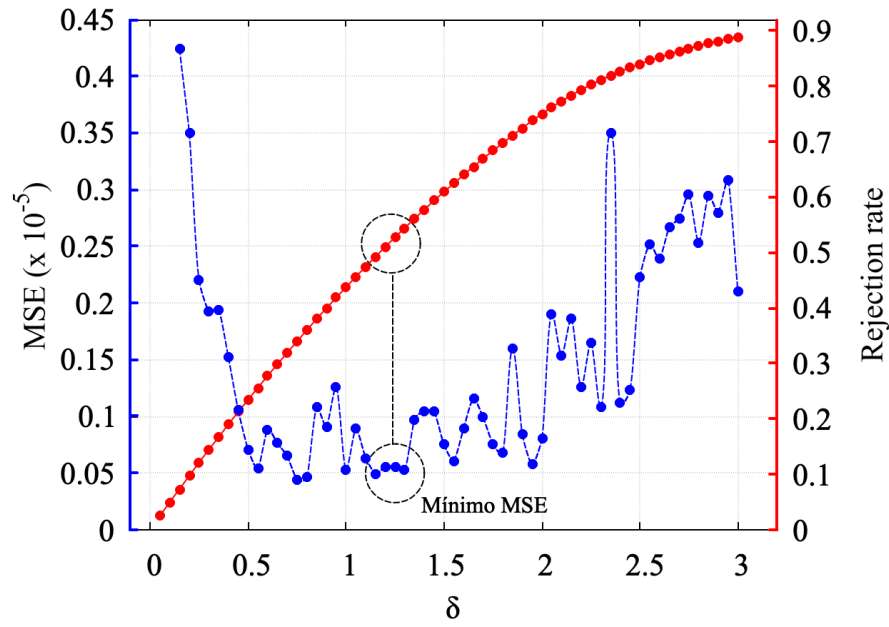


(b) Desviación cuadrática media de  $N_{hits}/N$  respecto a  $\pi/4$  en función del número de intentos. Se presenta también una recta de ajuste.

**Figura 2:** Resultados del algoritmo markov-pi, con  $\delta = 0,3$ .

Al igual que para el algoritmo direct-pi, el comportamiento del MSE sugiere realizar un ajuste de la forma  $f(N) = aN^b$ . Con lo anterior se obtiene  $b \approx -1,03$ . Nuevamente,  $MSE \sim 1/N$ .

Para estudiar la precisión obtenida como función de  $\delta$ , se corrió el algoritmo con  $N = 10^6$  fijo, variando  $\delta$  entre 0 y 3. Al mismo tiempo, se registró la tasa de rechazo directamente desde el algoritmo. Los resultados se presentan en la Figura 3. Lo primero a destacar del gráfico, es que para valores muy bajos y muy altos de  $\delta$ , el MSE aumenta considerablemente. Por supuesto, esto se relaciona directamente con el hecho de tener una tasa de rechazo muy baja y muy alta, respectivamente, en estos extremos. A pesar de que no existe un mínimo muy claro del MSE (teniendo valores relativamente bajos y oscilantes entre 0,5 y 1,6), se observa que en  $\delta \approx 1,25$  se encuentran los valores consistentes más bajos (en relación a las mediciones vecinas). Como el gráfico muestra, los valores de  $\delta \approx 1,25$  entregan tasas de rechazo muy cercanas a 0,5, verificando la validez de la regla *one-half*.



**Figura 3:** Desviación cuadrática media y tasa de rechazo en función de  $\delta$  para  $N = 10^6$  en el algoritmo markov-pi.

Nótese que la elección de  $N = 10^6$  se basa en los resultados de la primera parte del análisis del algoritmo markov-pi, teniendo un error lo suficientemente bajo sin aumentar significativamente los costos computacionales. Se espera que con un  $N$  mayor se obtenga el mismo resultado cualitativo.

## Problema 2

- a) El algoritmo gray-flip para N spins está implementado en el módulo *functions.py*, y se utiliza el módulo *configurations.py* para testarlo con  $N = 4$ . Los resultados se encuentran en el archivo *data/configurations.txt*. La combinación con el algoritmo enumerate-ising se encuentra en el archivo *enumerate\_ising.cpp*. A partir de este módulo se calcularon las densidades de estados de las redes cuadradas con y sin condiciones de borde periódicas, guardando los resultados en los archivos *data/densidades\_e\_pbc.txt* y *data/densidades\_e\_no\_pbc.txt*, respectivamente. Los datos se presentan además en las siguientes tablas:

$N(E) = N(-E)$			
$E$	2x2	4x4	6x6
0	12	20524	13172279424
4	0	13568	11674988208
8	2	6688	8196905106
12		1728	4616013408
16		424	2122173684
20		64	808871328
24		32	260434986
28		0	71789328
32		2	17569080
36			3846576
40			804078
44			159840
48			35148
52			6048
56			1620
60			144
64			72
68			0
72			2

**Tabla 1:** Valores de energía para redes 2x2, 4x4 y 6x6 con condiciones de borde periódicas.

$N(E) = N(-E)$			
$E$	2x2	4x4	6x6
0	12	11472	7206345520
2	0	9984	6951501824
4	2	7344	6244335166
6		4928	5230849920
8		2638	4093604824
10		1216	3000507536
12		584	2065952532
14		224	1340056928
16		72	821190292
18		32	476852512
20		8	263185168
22		0	138380976
24		2	69487240
26			33435520
28			15444302
30			6853760
32			2931560
34			1214336
36			484210
38			186624
40			71064
42			25744
44			8824
46			3168
48			1132
50			288
52			100
54			48
56			8
58			0
60			2

**Tabla 2:** Valores de energía para redes 2x2, 4x4 y 6x6 con condiciones de borde no periódicas.

- b) Las densidades de estados  $N(E, M)$  considerando magnetización y condiciones de borde periódicas se encuentran en los archivos *data/densidades\_em.txt* (en formato de tabla) y *data/densidades\_em\_2.txt* (en formato de listas). Los datos en ambos archivos son iguales. Para los sistemas de  $2 \times 2$  y  $4 \times 4$ :

$E \backslash M$	-4	-2	0	2	4	$\sum M$
-8	1	0	0	0	1	2
-4	0	0	0	0	0	0
0	0	4	4	4	0	12
4	0	0	0	0	0	0
8	0	0	2	0	0	2

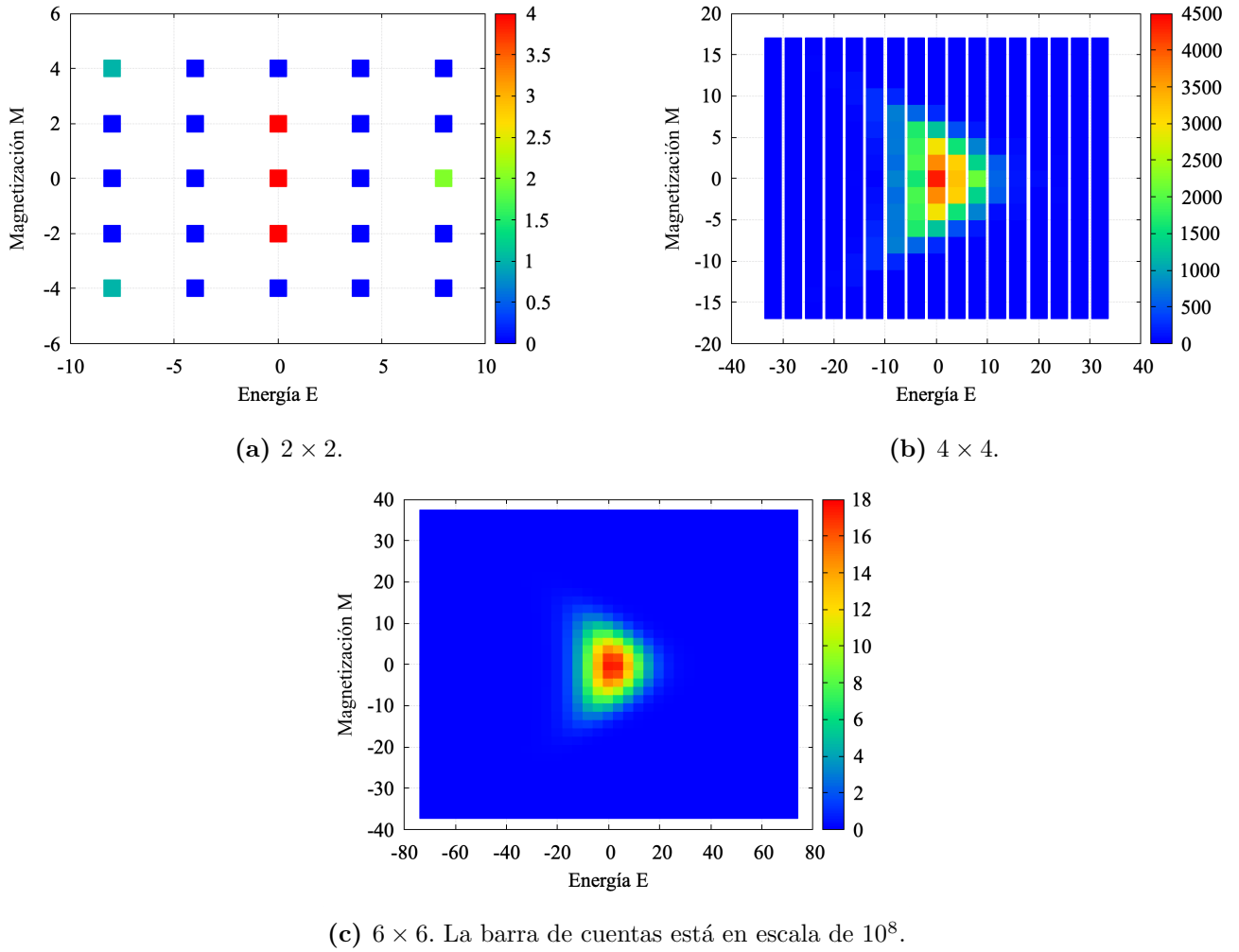
**Tabla 3:** Número de estados para cada configuración de energía y magnetización en un sistema  $2 \times 2$ .

$N(E, M) = N(E, -M)$										
$E \backslash M$	0	2	4	6	8	10	12	14	16	$\sum M$
-32	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2
-28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
-24	0	0	0	0	0	0	0	16	0	32
-20	0	0	0	0	0	0	32	0	0	64
-16	8	0	0	0	24	96	88	0	0	424
-12	0	64	96	192	256	256	0	0	0	1728
-8	768	624	704	688	736	208	0	0	0	6688
-4	1600	1920	1824	1664	576	0	0	0	0	13568
0	4356	3680	2928	1248	228	0	0	0	0	20524
4	3264	3136	1568	448	0	0	0	0	0	13568
8	2112	1392	768	128	0	0	0	0	0	6688
12	576	512	64	0	0	0	0	0	0	1728
16	120	96	56	0	0	0	0	0	0	424
20	64	0	0	0	0	0	0	0	0	64
24	0	16	0	0	0	0	0	0	0	32
28	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
32	2	0	0	0	0	0	0	0	0	2

**Tabla 4:** Número de estados para cada configuración de energía y magnetización en un sistema de  $4 \times 4$

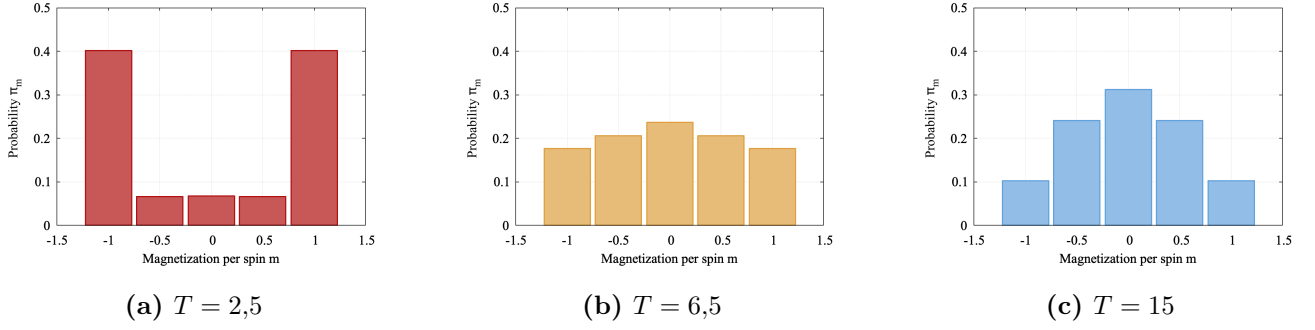
En las Tablas 3 y 4 se puede observar que, al sumar sobre las magnetizaciones para una misma energía, se recuperan los datos de la Tabla 1. Por razones de tamaño, la tabla para el sistema de  $6 \times 6$  no se presenta en el formato anterior, aunque es fácil comprobar que también cumple lo mencionado.

Es más sencillo observar las cuentas anteriores a partir de histogramas para  $E$  y  $M$  con mapas de calor, como se muestra en la Figura 4.

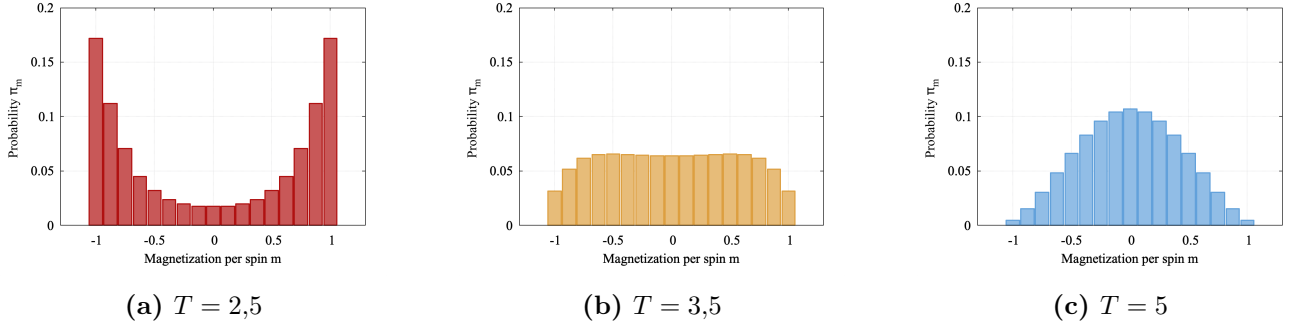


**Figura 4:** Histogramas de las densidades de estado  $N(E, M)$  para sistemas de distintos tamaños.

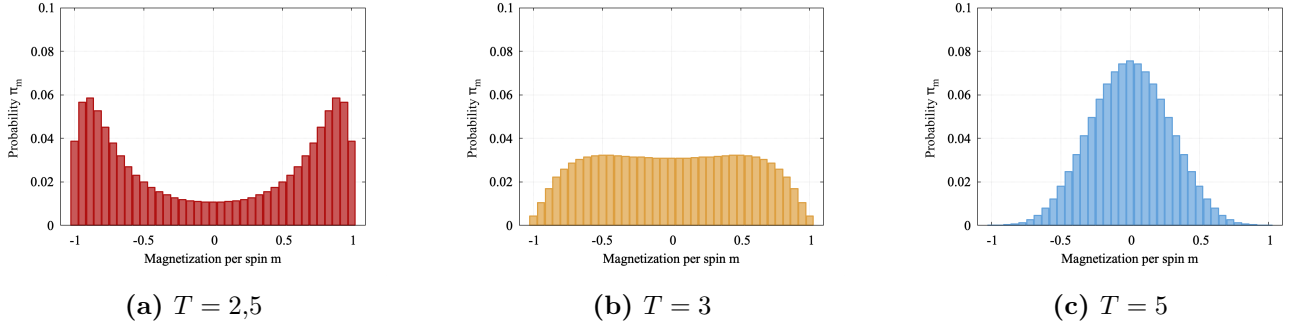
A partir de las densidades de estados, y utilizando el módulo *probability.py*, se generó la distribución de probabilidad  $\pi_m$  como función de la temperatura. Se presentan las distribuciones para los distintos sistemas, para temperaturas bajas y altas, en las Figuras 5-7. En los gráficos se observa claramente el cambio cualitativo entre bajas y altas temperaturas, pasando de una distribución bimodal a una unimodal. Particularmente, los resultados para el sistema  $6 \times 6$  coinciden con los vistos en clases. Además de lo anterior, se observa que en una temperatura intermedia, la magnetización se distribuye aproximadamente uniforme (indicando la transición). Se observa que esta transición cualitativa ocurre a temperaturas cada vez menores para redes de mayor tamaño.



**Figura 5:** Histogramas de magnetización para el sistema  $2 \times 2$  para distintas temperaturas.



**Figura 6:** Histogramas de magnetización para el sistema  $4 \times 4$  para distintas temperaturas.



**Figura 7:** Histogramas de magnetización para el sistema  $6 \times 6$  para distintas temperaturas.

El cambio cualitativo queda mejor descrito a partir del binder cumulant, obtenido a partir del módulo *probability.py* para los sistemas de  $2 \times 2$ ,  $4 \times 4$  y  $6 \times 6$ , cuyos resultados se encuentran en el archivo *data/binder.txt*, y se presentan además en la Figura 8. El primer resultado importante lo vemos en el gráfico (a), donde se observa que, a bajas temperaturas, los binder cumulants tienden a 1. Lo anterior es esperable debido a lo observado en los histogramas de magnetización: a bajas temperaturas, la magnetización tiende a estabilizarse sobre uno de dos valores (magnetización mínima o máxima), y oscila poco. En esta fase ordenada se cumple:

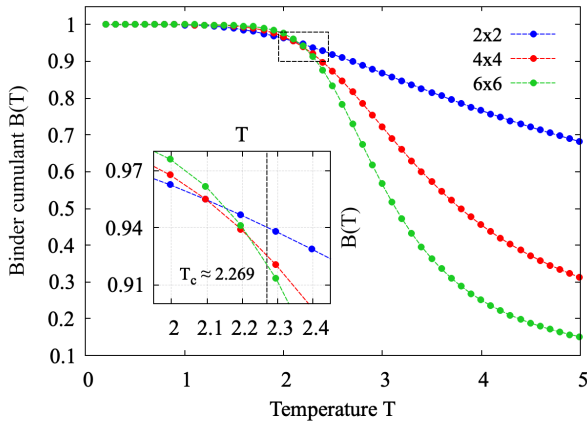
$$\langle m^4 \rangle \approx \langle m^2 \rangle^2 \implies B(T) \longrightarrow 1$$

Por otro lado, el gráfico (b) muestra el límite a altas temperaturas, esta vez variando para cada red. Se observa que luego de la temperatura crítica (hacia altas temperaturas), los binder cumulants se comportan como  $a + bx^{-c}$ , por lo que ajustando los datos con este comportamiento se puede obtener de manera aproximada la tendencia para  $T \rightarrow \infty$ . Particularmente, se obtiene  $a = 0,228; 0,079; 0,033$  para las redes de  $2 \times 2$ ,  $4 \times 4$  y  $6 \times 6$ , respectivamente, siendo estos los valores a los cuales tienden los binder cumulants. Observamos que este límite se acerca cada vez más a cero conforme aumenta el tamaño de la red. Esto se puede explicar nuevamente a partir de los histogramas obtenidos, donde a altas temperaturas la magnetización se aproxima cada vez más a una distribución normal conforme la red aumenta su tamaño (como se observa en las Figuras 5-7 (c)). Para una distribución normal de media cero, el cuarto momento cumple:

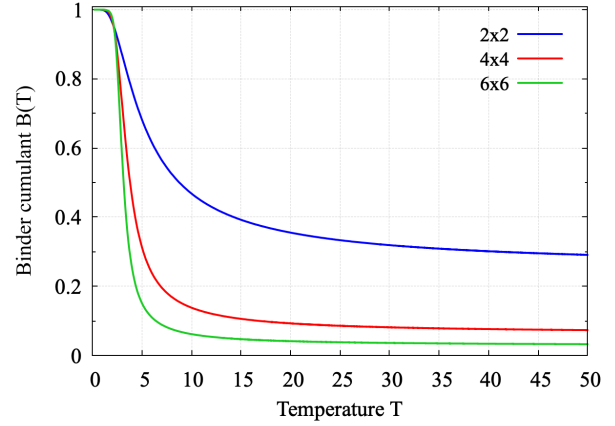
$$\langle m^4 \rangle = 3\langle m^2 \rangle^2$$

y por lo tanto el binder cumulant para  $T \rightarrow \infty$  y en el límite termodinámico cumple:

$$B(T) \rightarrow 0$$



(a) Límites de bajas temperaturas y unión de los binder cumulants.



(b) Límites de altas temperaturas.

**Figura 8:** Binder cumulant para las redes de  $2 \times 2$ ,  $4 \times 4$  y  $6 \times 6$ .

Por último, la Figura 8(a) nos permite observar la intersección de los binder cumulants de redes de distintos tamaños. Siendo más específicos, contrario a lo indicado por la teoría, las curvas se intersectan en tres puntos distintos, promediando aproximadamente  $T = 2,15$ . Este valor presenta un error relativo de 5,2% respecto al valor esperado. Este error es lo suficientemente pequeño como para confirmar que los binder cumulants se intersectan aproximadamente en  $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2})$ .



## Problema 3

El algoritmo markov-ising está implementado en el archivo *markov\_ising.cpp*. Este se utilizó, inicialmente, para medir la energía y el calor específico de una red de  $6 \times 6$  con condiciones de borde periódicas. Los resultados se encuentran en el archivo *data/energy.txt*, y se presentan también en las tablas a continuación, comparando con los resultados exactos:

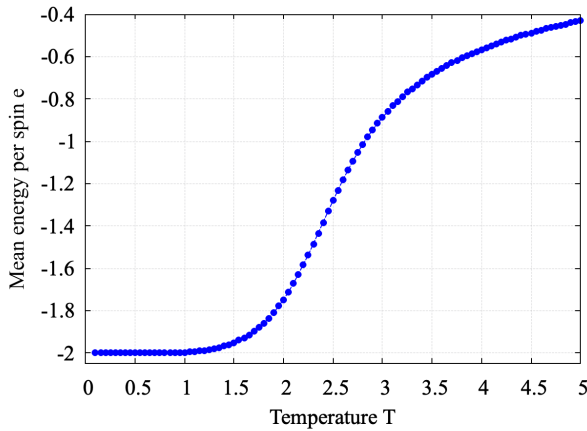
$T$	$\langle e \rangle$ exacto	$\langle e \rangle$ obtenido	$\epsilon$ relativo (%)
0.5	-1.999	-2.000	0.05
1.0	-1.997	-1.997	0.00
1.5	-1.951	-1.951	0.00
2.0	-1.747	-1.748	0.06
2.5	-1.280	-1.281	0.08
3.0	-0.887	-0.888	0.11
3.5	-0.683	-0.683	0.00
4.0	-0.566	-0.566	0.00

**Tabla 5:** Valores de  $\langle e \rangle$  para diferentes temperaturas  $T$ .

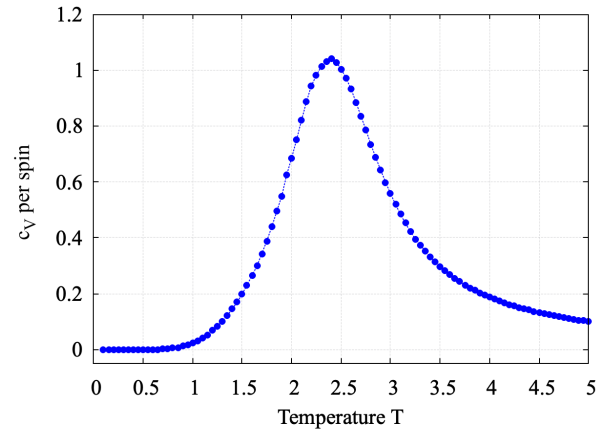
$T$	$c_v$ exacto	$c_v$ obtenido	$\epsilon$ relativo (%)
0.5	0.00003	0.00005	66.7
1.0	0.02338	0.02307	1.33
1.5	0.19758	0.19760	0.01
2.0	0.68592	0.68487	0.15
2.5	1.00623	1.00413	0.21
3.0	0.55665	0.55784	0.21
3.5	0.29617	0.29683	0.22
4.0	0.18704	0.18783	0.42

**Tabla 6:** Valores de  $c_v$  para diferentes temperaturas  $T$ .

Los datos anteriores se obtuvieron a partir de  $10^6$  samples, y son comparados según las cifras significativas disponibles de los datos exactos. En general, se observan resultados muy cercanos a los exactos para la energía, siendo 0,11 % el error relativo más grande obtenido. En el caso del calor específico, a excepción del error de 66,7 % para una temperatura de 0,5 (debido a lo pequeño del valor del calor específico), los errores también son pequeños ( $\sim 0,2$  %). Los resultados también fueron graficados para estudiar el comportamiento de las variables en el rango de temperatura 0 – 5.



(a) Energía promedio por spin en función de la temperatura.

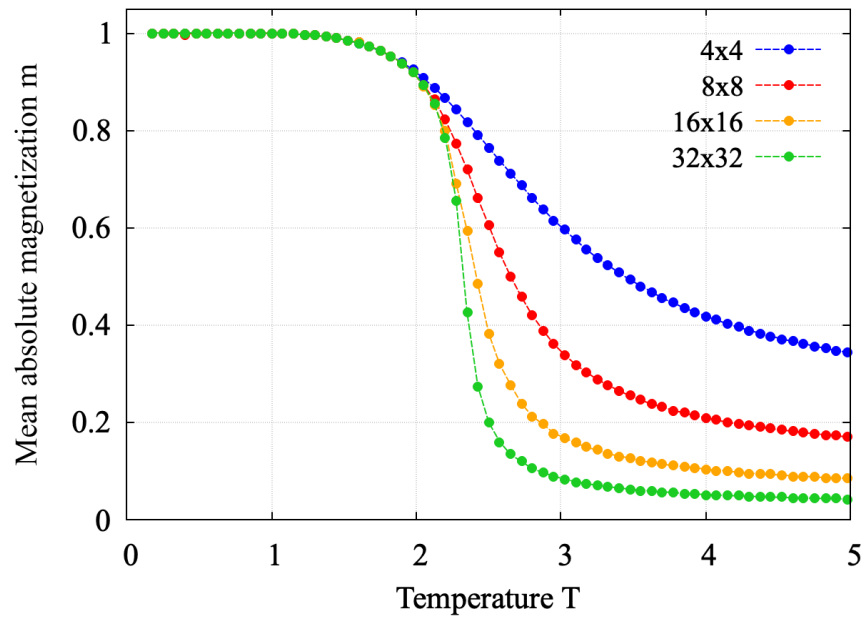


(b) Calor específico por spin en función de la temperatura.

**Figura 9:** Resultados con markov-ising para una red de  $6 \times 6$ .

El algoritmo también se utilizó para obtener la magnetización absoluta promedio en función de

la temperatura. Los resultados se guardaron en el archivo *data/magnetization.txt*, y se presentan además en la Figura 10.



**Figura 10:** Magnetización absoluta promedio por spin en función de la temperatura para redes de distintos tamaños.

## Problema 4

El algoritmo cluster-ising está implementado en el archivo *cluster\_ising.cpp*. Este se utilizó, inicialmente, para medir la energía y el calor específico de una red de  $6 \times 6$  con condiciones de borde periódicas. Los resultados se encuentran en el archivo *data/energy.txt*, y se presentan también en las tablas a continuación, comparando con los resultados exactos:

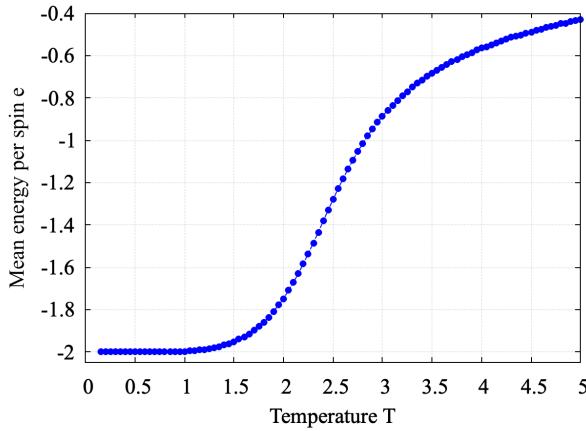
$T$	$\langle e \rangle$ exacto	$\langle e \rangle$ obtenido	$\epsilon$ relativo (%)
0.5	-1.999	-2.000	0.05
1.0	-1.997	-1.997	0.00
1.5	-1.951	-1.951	0.00
2.0	-1.747	-1.748	0.06
2.5	-1.280	-1.280	0.00
3.0	-0.887	-0.886	0.11
3.5	-0.683	-0.682	0.15
4.0	-0.566	-0.565	0.18

**Tabla 7:** Valores de  $\langle e \rangle$  para diferentes temperaturas  $T$ .

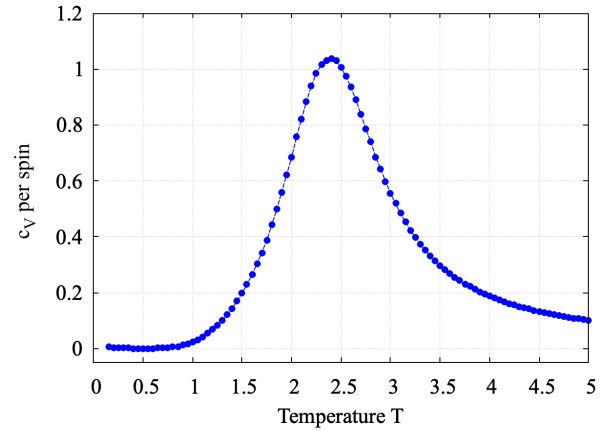
$T$	$c_v$ exacto	$c_v$ obtenido	$\epsilon$ relativo (%)
0.5	0.00003	0.00070	2200
1.0	0.02338	0.02360	0.94
1.5	0.19758	0.19779	0.11
2.0	0.68592	0.68431	0.24
2.5	1.00623	1.00478	0.14
3.0	0.55665	0.55608	0.10
3.5	0.29617	0.29781	0.55
4.0	0.18704	0.18741	0.20

**Tabla 8:** Valores de  $c_v$  para diferentes temperaturas  $T$ .

Los datos anteriores se obtuvieron a partir de  $10^6$  samples, y son comparados según las cifras significativas disponibles de los datos exactos. Nuevamente observamos errores relativos pequeños, menos para la temperatura de 0,5. Graficando estas variables obtenemos resultados cualitativos iguales a los de la pregunta 3:



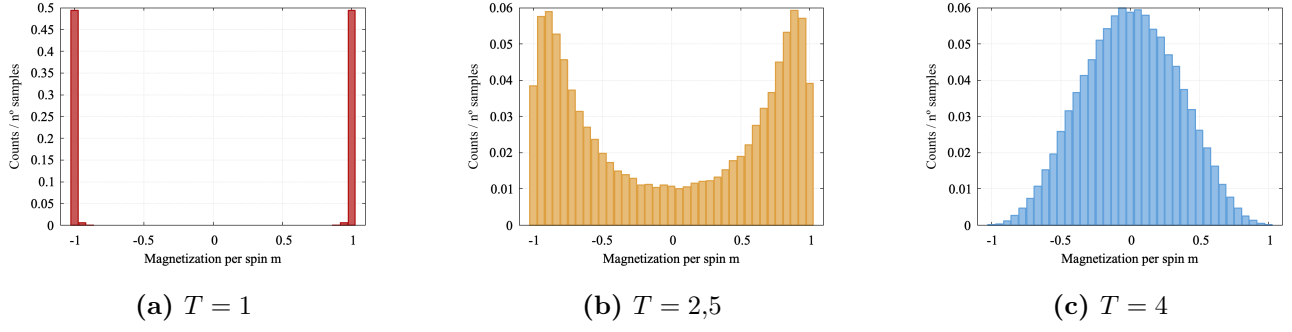
(a) Energía promedio por spin en función de la temperatura.



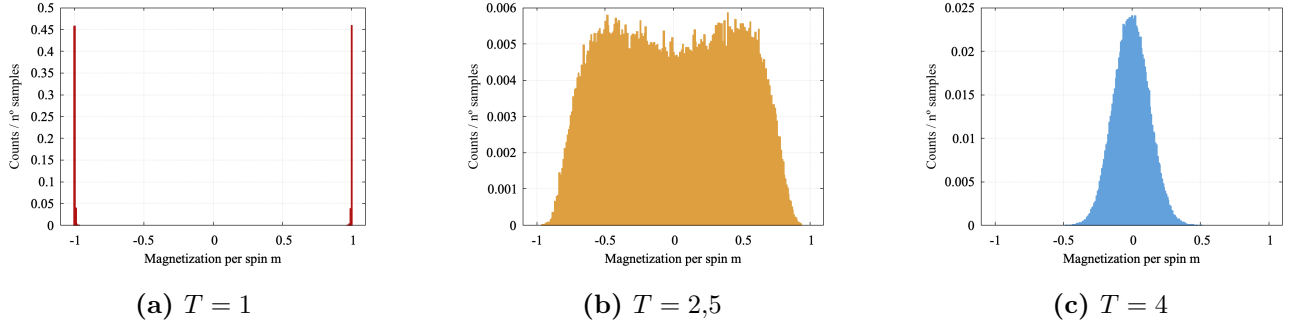
(b) Calor específico por spin en función de la temperatura.

**Figura 11:** Resultados con cluster-ising para una red de  $6 \times 6$ .

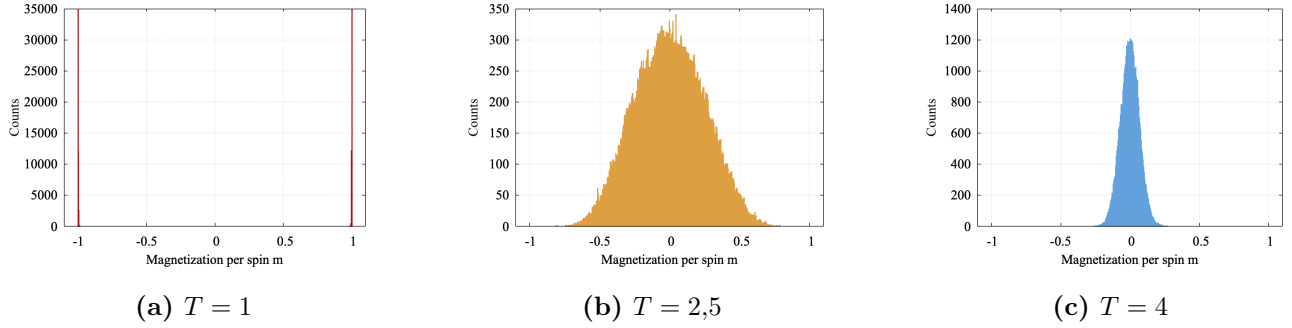
En este caso se graficaron histogramas para la magnetización. Los datos se encuentran en el archivo *data/magnetization\_counts.txt*, y se presentan además en los gráficos a continuación:



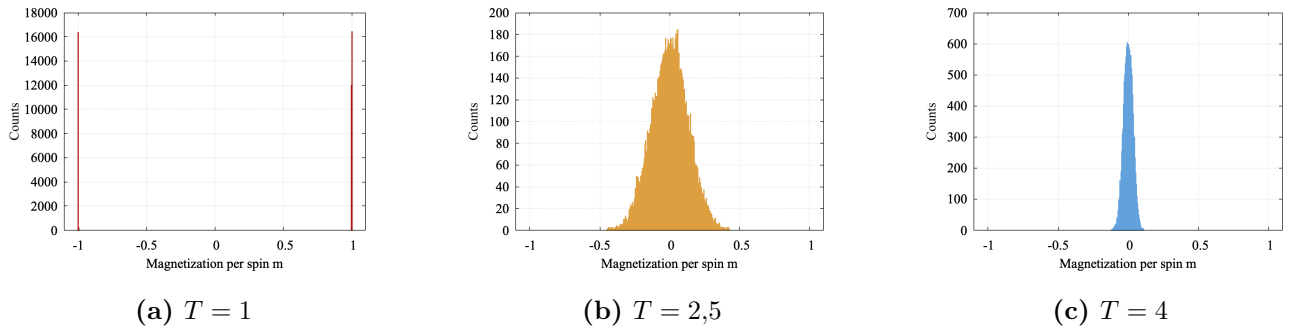
**Figura 12:** Histogramas de magnetización para el sistema  $6 \times 6$  para distintas temperaturas.



**Figura 13:** Histogramas de magnetización para el sistema  $16 \times 16$  para distintas temperaturas.

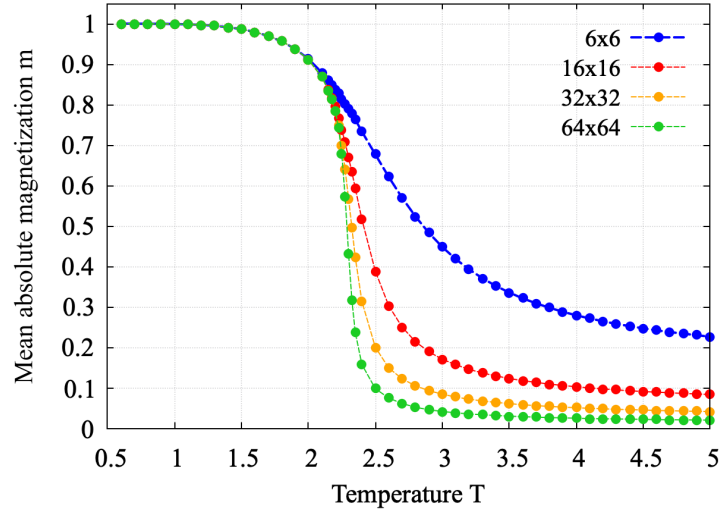


**Figura 14:** Histogramas de magnetización para el sistema  $32 \times 32$  para distintas temperaturas.



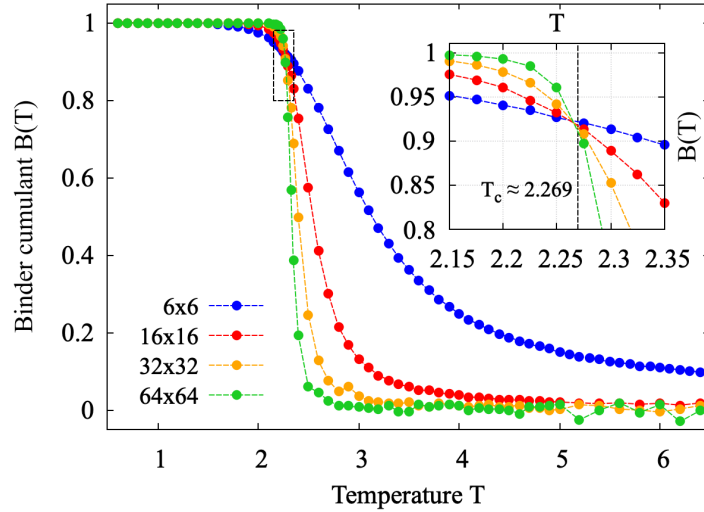
**Figura 15:** Histogramas de magnetización para el sistema  $64 \times 64$  para distintas temperaturas.

Los histogramas presentan el comportamiento esperado según lo observado y comentado en el problema 2. Podemos observar también el comportamiento de la magnetización a partir de la Figura 16:



**Figura 16:** Magnetización absoluta promedio por spin en función de la temperatura para redes de distintos tamaños.

Y observamos el mismo comportamiento que en el problema 3. Por último, en el archivo *data/magnetization.txt* se encuentran los datos para los binder cumulants, que también se muestran en el gráfico a continuación:



**Figura 17:** Binder cumulant para las redes de  $6 \times 6$ ,  $16 \times 16$ ,  $32 \times 32$  y  $64 \times 64$ .

En este caso observamos que los binder cumulants se intersectan mucho más cerca de  $T_c$ , en  $\sim 2,265$ , teniendo un error relativo del 0,2 %.