"Simulaciones Computacionales en Física" Curso 2023

PRACTICA 4: Simulaciones Montecarlo (MCMC). Algoritmo de Metrópolis. Modelo de Ising.

1) Pruebe que si la probabilidad de transición entre los estados μ y ν, $P_{\mu\to\nu} = g_{\mu\to\nu} A_{\mu\to\nu}$, con $g_{\mu\to\nu}$ simétrica y $A_{\mu\to\nu}$ dada por:

$$A_{\mu\to\nu} = \begin{cases} 1 & \text{si } E_\nu \leq E_\mu \\ e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)} & \text{si } E_\nu > E_\mu \end{cases}$$

entonces, $P_{\mu\to\nu}$ cumple con la condición de balance detallado:

$$p_\mu P_{\mu\to\nu} = p_\nu P_{\nu\to\mu}$$

donde p_μ es la distribución de Boltzmann

2) Haga un programa para simular con el algoritmo de Metrópolis el modelo de Ising en D=2. Realice las siguientes simulaciones para una red de lado L=50 sitios con condiciones de contorno periódicas:
a) Partiendo de una condición inicial con magnetización M=1, simule el comportamiento del sistema a la temperatura T=1.7 para t=50000 pasos Montecarlo. (Consideramos 1 paso Montecarlo la actualización de L^2 espines). Obtenga la magnetización en función de t, M(t) y (con el objeto de verificar que su programa funciona correctamente) observe si M(t) fluctúa en torno al valor esperado.
b) Partiendo de la misma condición inicial del ítem anterior (M=1) simule el comportamiento del sistema para las temperaturas: T=1, T=1.5, T=2, T=2.1, T=2.3, T=3, T=5. Analice cualitativamente la evolución del sistema para cada T: (i) el comportamiento de M(t), (ii) la configuración de los espines en diferentes escalas de tiempo.
c) Partiendo de una condición inicial M=0 en la que la orientación de los espines es aleatoria en toda la red, simule el comportamiento del sistema para la temperatura T=1.5. La idea es que observe la evolución de la red para una secuencia de tiempos del tipo: 1, 2, 3, 4, 5, 50, 100, 150, 200, 1000, 2000, 3000, 4000, 10000, 20000, 30000, 40000, 50000 con el objeto de analizar qué sucede cualitativamente en distintas escalas de tiempo. Repita la simulación 3 veces para la misma condición inicial pero donde la evolución temporal está dada por otros conjuntos de números aleatorios.

3) Utilice los resultados de las simulaciones realizadas en 1a) y 1b) para obtener estimaciones de la magnetización media en función de la temperatura $\langle M(T)\rangle$, de $\langle M^2(T)\rangle$ y de $\langle \sigma_M^2(T)\rangle$. Indique cuál es el error aproximado en la estimación de $\langle M(T)\rangle$ para cada temperatura. NOTA: para obtener el error deberá estimar la función de auto-correlación de M(t) en el equilibrio y estimar el tiempo típico τ de correlación entre los valores de M(t).

<u>OPCIONAL:</u>

4) Simule una red bidimensional con L=512 para varias temperaturas T>Tc (T=2.42, 2.37, 2.32 y 2.29), partiendo de una condición inicial donde la orientación de los espines es aleatoria (M=0) y calcule la correlación entre espines:

$$c(r,t) = \langle s_i(t).s_j(t) \rangle - \langle s_i(t) \rangle \langle s_j(t) \rangle$$

donde $r=|x_i-x_j|$ y x_i *y* x_j las posiciones de los espines s_i y s_j respectivamente, t es el número de pasos Montecarlo realizados a partir de la condición inicial y los promedios: $\langle \ldots \rangle$ son realizados sobre todos los espines de la red y sobre distintas muestras.

a) Calcule las *c(r,t)* en función de *r* para distintos "*t*" y observe cuánto tiempo le lleva al sistema equilibrar para distintas temperaturas.
b) Una vez que equilibró, calcule $c_{eq}(r)=c(r,t)$ ($t>t_{eq}$) y obtenga la longitud de correlación ξ, para cada temperatura, haciendo un ajuste de $c_{eq}(r)$ al comportamiento asintótico esperado.
c) Grafique el comportamiento de $\xi(T)$ y compare con el resultado esperado. Estime Tc.