Física Teórica 3 – 2do cuatrimestre de 2020

Guía 9: *Modelo de Ising: Solución numérica*

Se propone resolver el problema del Modelo de Ising en 2D utilizando una simulación Monte Carlo implementando el algoritmo de Metropolis. En grupos de hasta 3 personas se deberá entregar un informe donde se presenten y discutan los resultados numéricos obtenidos, junto con el codigo fuente del programa/script utilizado.

1) Preliminares

a) Partiendo del programa provisto en clase, deberá escribir el código que realiza la simulación numérica. En líneas generales es buena práctica diagramar en papel un esquema de la estructura del programa que se desea implementar (por ejemplo, cómo podría hacer para calcular fluctuaciones cuadráticas de observables o coómo implementar condiciones de controno peródicas) antes de sentarse frente a la computadora.

b) A lo largo de este trabajo estudiaremos básicamente cuatro observables del sistema. La magnetización por sito, m, la energía por sitio, e, y sus respectivas fluctuaciones $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$. Su código de simulación debe reportar el valor de dichos observables a lo largo de la cadena de Markov generada.

2) Preequilibrio y tiempos de relajación

a) Discuta cómo implementar la condición inicial del sistema en su algoritmo.

b) La configuración inicial que haya elegido para comenzar el algoritmo, pone al sistema en un punto del espacio de fases que generalmente tiene poco que ver con configuraciones típicas exploradas por el sistema en equilibrio para valores dados de T. Analice, a partir de la evolución de los observables del item (1.a) el número de pasos de Markov necesarios para considerar al sitema "termalizado". Realice esta estimación para diferentes temperaturas, en particular para temperaturas mayores, menores y cercanas a la T_c. Este análisis le debe servir para estimar el número de configuraciones iniciales que debe ser descartado para el calculo de valores medios en equilibrio.

3) Magnetización y Energía Media

a) Estime, como función de la temperatura $\langle m(T, H = 0) \rangle$ y $\langle e(T, H = 0) \rangle$. Para ello utilice una red de spines cuadrada de lado $L = 32$, y realice un barrido entre $T = 0$ y $T = 4$. Para la región de $T \sim T_c$ aumente la resolución del sampleo. Compare lo obtenido con el resultado que se obtiene bajo la aproximación de campo medio. Discuta sobre el origen de las posibles diferencias.

b) De manera similar, analice el comportamiento de las fluctuaciones de e y m en función de la temperatura . ¿Con qué cantidades físicas conocidas se relacionan dichas fluctuaciones?

c) A partir de lo obtenido en 3.a) y 3.b) obtenga una estimación para la temperatura crítica T_c

4) Exponentes críticos Con el valor de T_c, encuentre el exponenente crítico β tal que $m \sim (T - T_c)^\beta$. Compare con los resultados exactos y de campo medio. Repita el análisis para el exponente γ de la susceptibilidad magnética.

5*) Efectos de tamaño finito

Discuta los efectos del tamaño finito del sistema en la estimación de observables definidos en el límite termodinámico. Encuentre estimaciones de T_c para redes de diferente tamaño (por ejemplo $L = 8, 16, 64, 128, 256$). ¿Qué tendencia observa? ¿Es posible extrapolar lo encontrado para $L \to \infty$?