Simulaciones computacionales

Año 2019

Prof: T. S. Grigera
JTP: Arles Gil Rebaza

Práctica 3 — Monte Carlo en el retículo

Estimación de errores

Bibliografía: Schmidt (2010), Sokal (1997), Newman y Barkema (1999, Cap. 3), Krauth (2006, Sec. 1.3)

Ejercicio 1. Considere un sistema de dos niveles (puede ser por ejemplo un paramagneto ideal, o sea de espines no interactuantes), tal que $E_0 = 0$ y $E_1 = E$.

a) Escriba la matriz de transiciones W_{ij} de una dinámica Monte Carlo de Metropolis para este sistema. Verifique que el estado de Boltzmann es autovector a izquierda. Calcule los autovalores y el tiempo de correlación.

b) Implemente la dinámica numéricamente. Calcule la función de autocorrelación temporal de la energía y calcule el tiempo de correlación. Compare con el resultado analítico.

Ejercicio 2. Implemente una simulación Monte Carlo del modelo de Ising,

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i, \qquad S_i = \pm 1, \tag{3.1}$$

en un retículo cuadrado con condiciones periódicas de contorno. Utilice el algoritmo de Metropolis con inversión de un spin por intento y tamaños de red de 30×30 y 100×100.

a) Calcule la energía y el calor específico como función de la temperatura.

b) Calcule la magnetización y la susceptibilidad magnética como función de la temperatura.

c) Calcule el tiempo de autocorrelación de la magnetización como función de la temperatura.

En todos los casos tenga cuidado de utilizar series temporales adecuadamente equilibradas y dé una estimación de los errores. Tenga en cuenta que el resultado analítico de Onsager para la temperatura crítica del modelo en 2-d es $T_c = 2J/[k_B \ln(1+\sqrt{2})]$.