Física Estadística Computacional

Muestreo Metropolis Montecarlo - 1° cuatrimestre 2017

Problema 1: Importance Sampling

(a) Utilice el algoritmo de Metropolis para muestrear la distribución normal en una dimensión. Estudie el porcentaje de aceptación de movimientos y la función correlación en función del tamaño del paso de exploración δ.

(b) Use el muestreo generado para calcular

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ x^2 e^{-x^2/2} \tag{1}$$

Estudie la dependencia del resultado con el tiempo de termalización y con el tamaño del muestreo.

Problema 2: Ising 2D por medio de Metropolis

Considere un arreglo cuadrangular de spines $s_i = \pm 1$ con condiciones periódicas de contorno. El hamiltoniano del sistema está dado por

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \tag{2}$$

(a) Si $J = 0$ el hamiltoniano se reduce a la interacción de espines independientes en un campo magnético externo. Obtenga las soluciones analíticas para las variables termodinámicas en este caso y compare con los resultados de las simulaciones.

(b) Estudie el comportamiento del sistema en una red de 32×32, para $B = 0$ y $J \in [0.1, 0.6]$. Estime en cada caso la frecuencia de sampleo adecuada para cada constante de acoplamiento empleada. Muestre que las correlaciones se hacen más importantes al acercarse al punto crítico.

(c) Estudie el comportamiento del sistema para diversos tamaños de red. Analice los efectos producidos por tamaño finito (use $B = 0$ y $J \in [0.1, 0.6]$).

(d) Explore la termodinámica del modelo para el caso antiferro ($J < 0$) con B finito.

(e) Haga lo propio para un modelo en el cual cada spin s_i interactúa ferromagnéticamente con sus primeros vecinos y antiferromagnéticamente con sus cuatro segundos vecinos (diagonales). Explique el fenómeno de *frustración*.

Problema 3: Ising 2D por medio de algoritmos alternativos

(a) El algoritmo *baño térmico* consiste en fijar un dado spin al valor $+1$ con probabilidad $(1+g)^{-1}$, y -1 con probabilidad $g(1+g)^{-1}$ con $g = \exp[2(J f + B)]$. Verifique que este algoritmo es equivalente al algoritmo de Glauber con probabilidad de transición

$$T(S \to S') = \frac{\omega(S')}{\omega(S') + \omega(S)} = \frac{1}{1 + \exp(\beta\, \Delta E)} \tag{3}$$

y por lo tanto produce un buen muestreo de configuraciones.

(b) Explique qué mejoras realiza el algoritmo de Swemsem-Wang para sobrellevar el problema de *critical slowing down*, presente cuando nos acercamos a T_c.