

Física Estadística Computacional

Muestreo Metropolis Montecarlo - 2º cuatrimestre 2012

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

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

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

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

- (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 $g = \exp[2(Jf+B)]$. Verifique que este algoritmo es equivalente al algoritmo de Glauber con probabilidad de transición

$$T(S \rightarrow S') = \frac{\omega(S')}{\omega(S') + \omega(S)} = \frac{1}{1 + \exp(\beta \Delta E)} \quad (3)$$

y por lo tanto produce un buen muestreo de configuraciones.

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