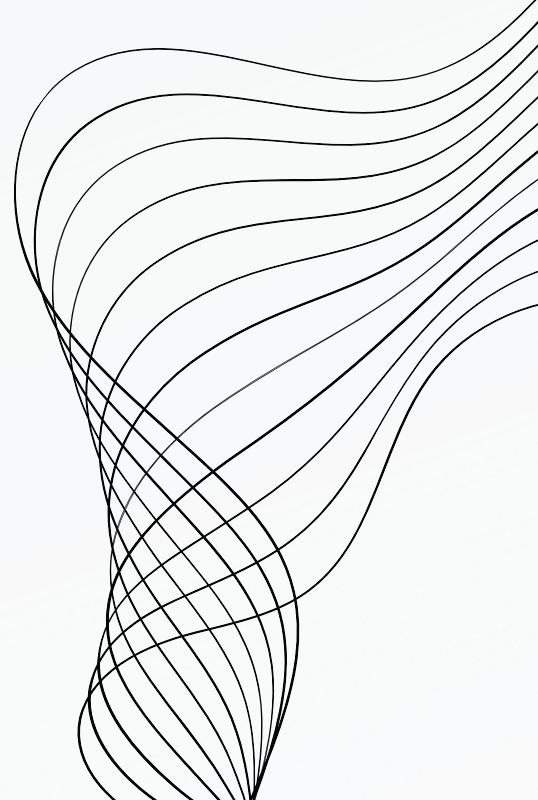


SIMULACIÓN MONTE CARLO - ALGORITMO METRÓPOLIS
COMPUTACIÓN CIENTÍFICA AVANZADA



**POZOS DE POTENCIAL
CON RESERVORIO
TÉRMICO**

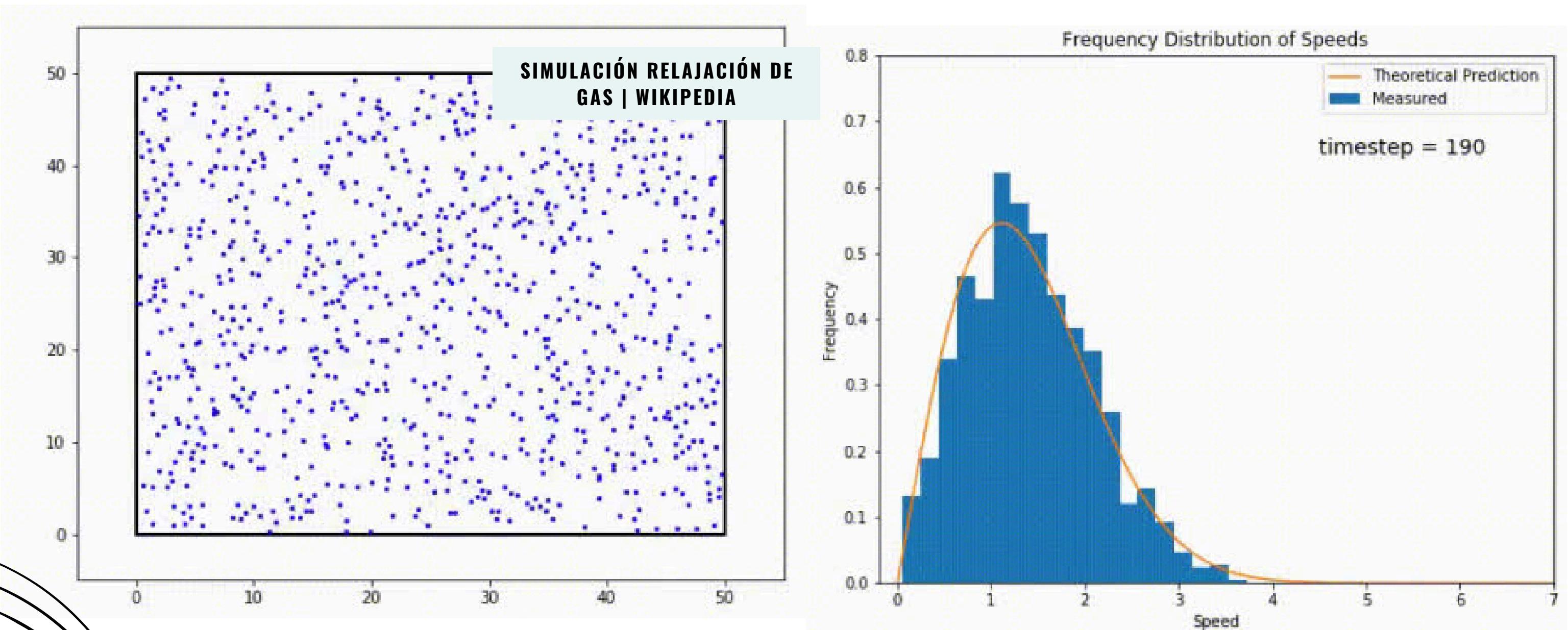
**SAMUEL QUITIAN GALLEG
ANA SOFIA MARULANDA DUQUE**

**MARZO, 2024
MEDELLIN, COLOMBIA**

SISTEMAS TÉRMICOS

AL AUMENTAR EL NÚMERO DE PARTÍCULAS INTERACTUANTES, EL NÚMERO DE CONFIGURACIONES POSIBLES AUMENTA SIGNIFICATIVAMENTE, LO CUAL DIFICULTA LA OBTENCIÓN DE SOLUCIONES ANALÍTICAS.

MÉTODOS COMPUTACIONALES: SIMULAR LA DINÁMICA DE INTERACCIÓN DE LAS PARTÍCULAS PERMITE OBTENER LAS PROPIEDADES DE DICHOS SISTEMAS, MACRO Y MICROSCÓPICAMENTE.



SISTEMA

EXPERIMENTAR CON
EL SISTEMA REAL

EXPERIMENTAR CON UN MODELO
DEL SISTEMA

MODELO FÍSICO

MODELO MATEMÁTICO

MODELO ANALÍTICO

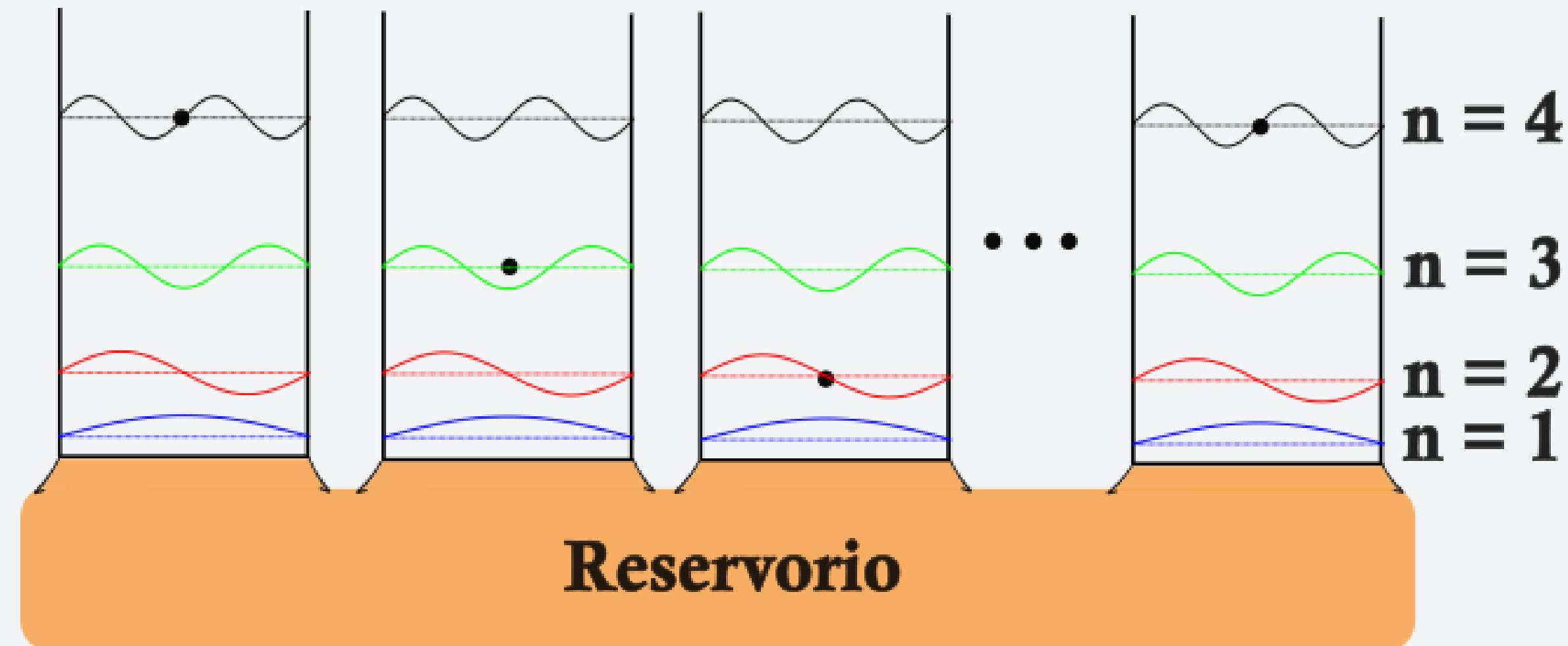
MODELO SIMULACIÓN

LO QUE BUSCAMOS!



NUESTRO PROBLEMA:

POZOS INFINITOS DE POTENCIAL



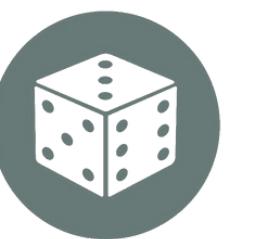
$$\vec{n} = (4, 3, 2, \dots, 4)$$

OBJETIVOS

Implementar y optimizar el algoritmo Metropolis para simular la distribución de partículas en los pozos de potenciales

Explorar aplicaciones potenciales de la simulación de Monte Carlo en la predicción y modelado de sistemas térmicos complejos

Estudiar cómo varía la distribución de energía en función de la temperatura y el tamaño del pozo



SIMULACIÓN MONTE CARLO

MÉTODO ESTOCÁSTICO PARA LA INTEGRACIÓN NUMÉRICA

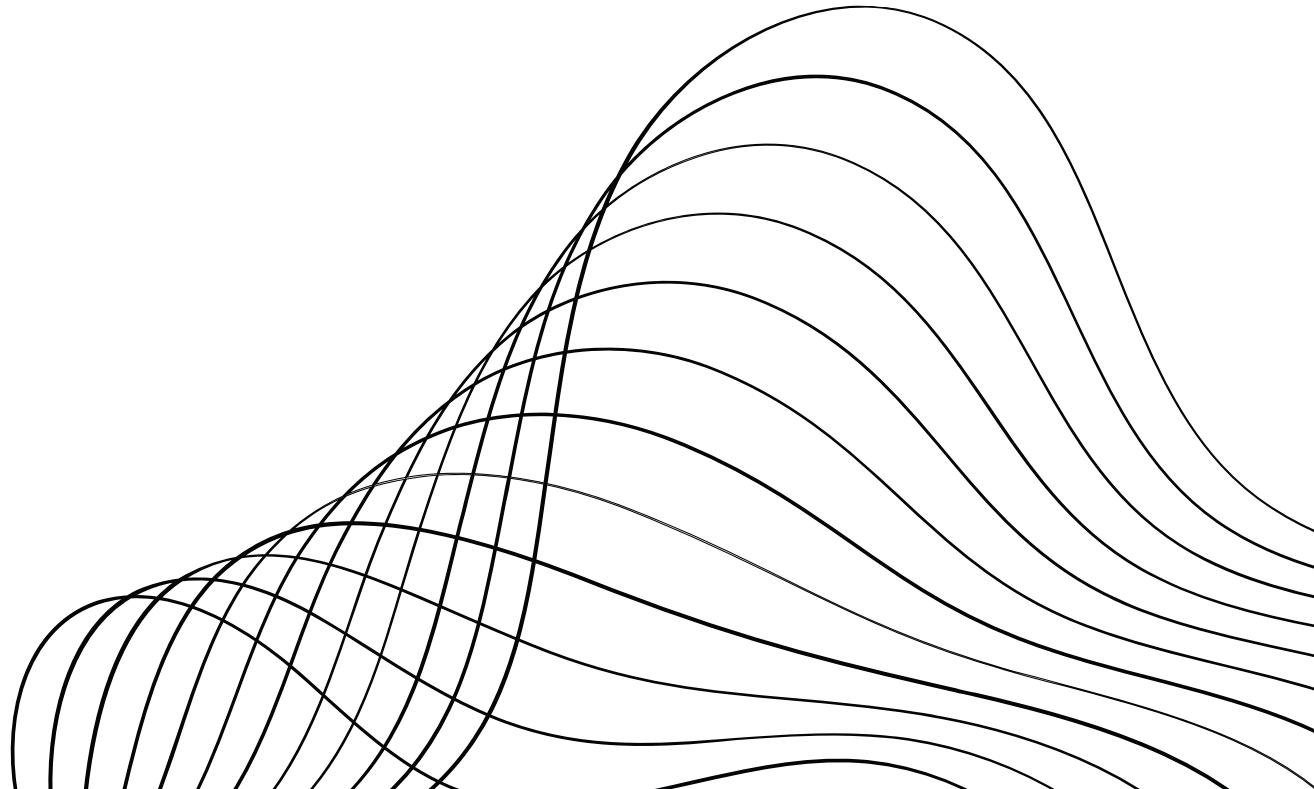
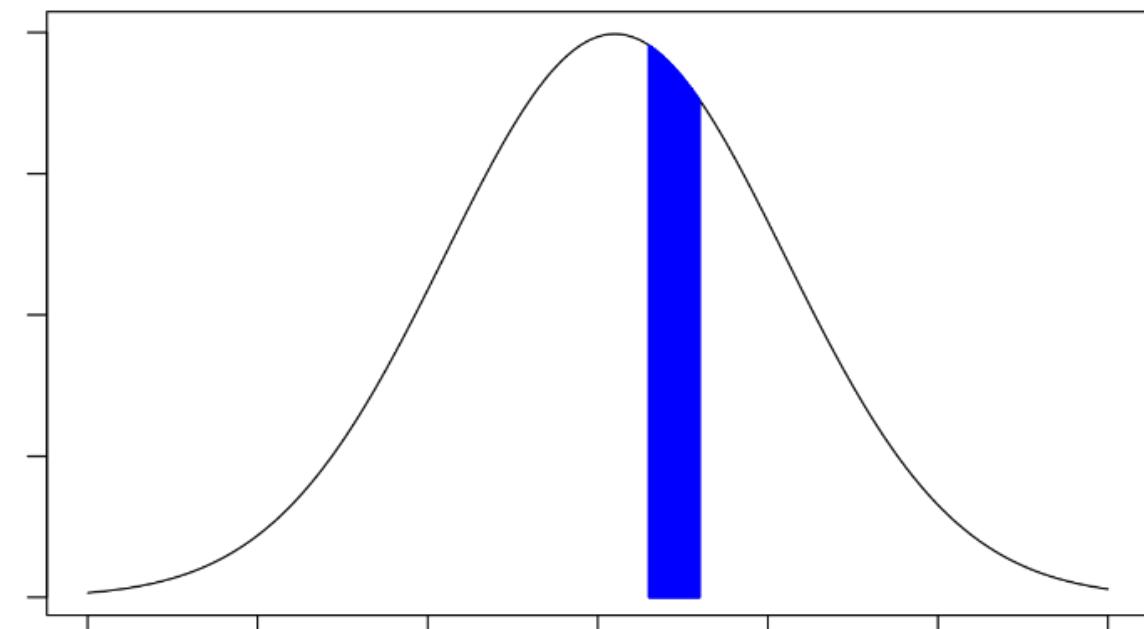
$$E_{mc} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N F(X_n) \longrightarrow I = \int_{X_0}^{X_1} f(x) dx$$

$$S_{mc}^2 = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N (f(X_n))^2 - (E_{mc})^2$$

EL ERROR DISMINUYE COMO $1/\sqrt{N}$, INDEPENDIENTEMENTE DE LA DIMENSIÓN DE LA INTEGRAL

SE ROMPE LA Maldición DE LA DIMENSIONALIDAD

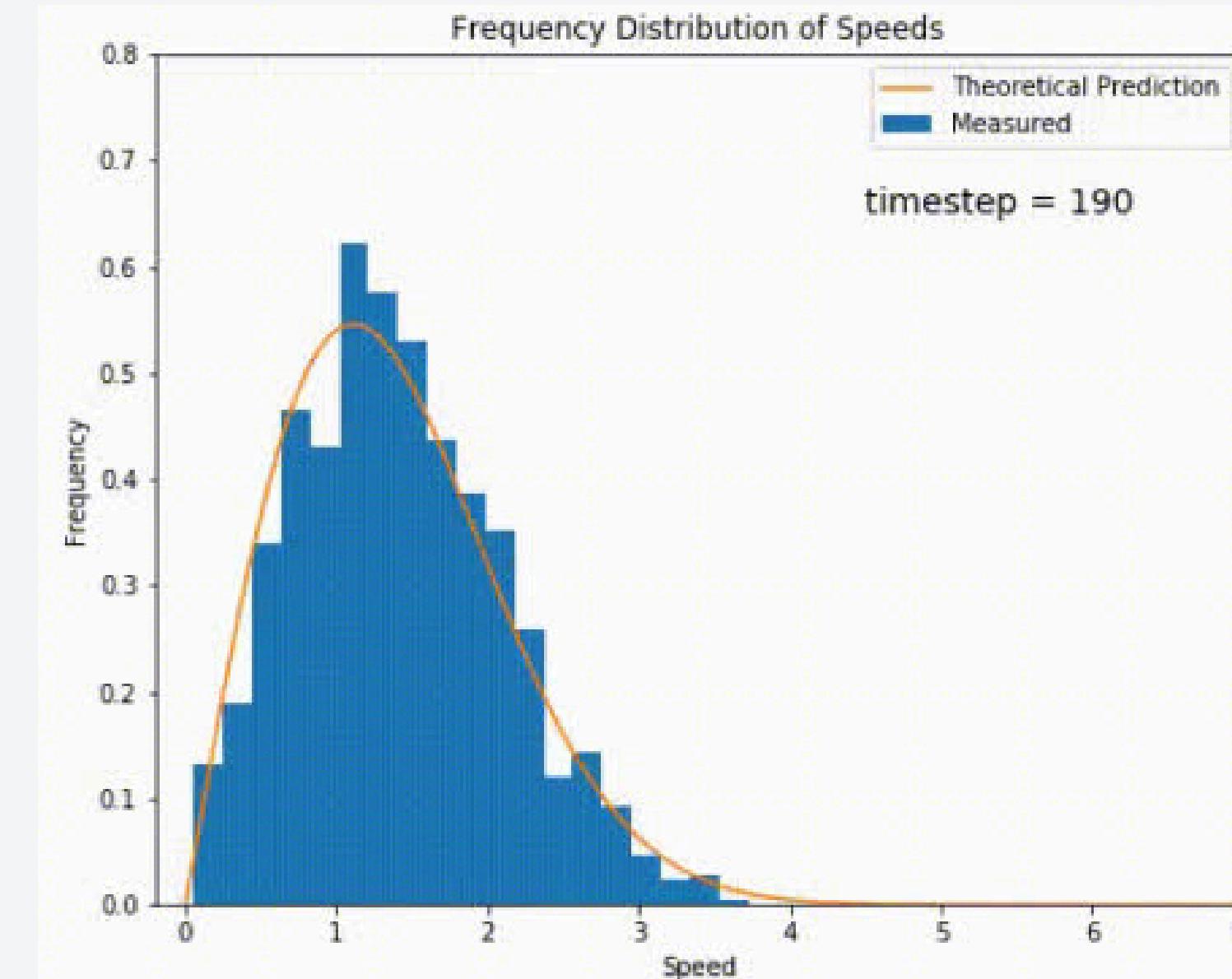
EL TIEMPO COMPUTACIONAL DE LA SIMULACIÓN PUEDE SER MEJORADO CON OTRAS
TÉCNICAS, COMO EL MUESTREO POR IMPORTANCIA



ALGORITMO DE METROPOLIS

CONSISTE EN REALIZAR UN RECORRIDO ALEATORIO EN EL ESPACIO DE LAS CONFIGURACIONES DEL SISTEMA, PASANDO DE UN ESTADO A OTRO MEDIANTE UNA “PROBABILIDAD” DE TRANSICIÓN.

$$\vec{n}_0 \rightarrow \vec{n}_1 \rightarrow \vec{n}_2 \rightarrow \dots \rightarrow \vec{n}_n$$



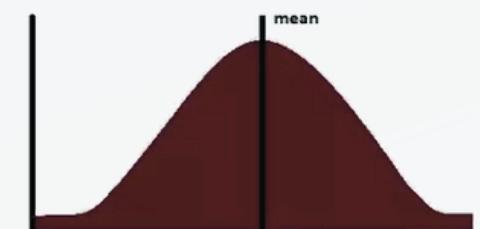
ALGORITMO METROPOLIS

MONTE CARLO ESTRATIFICADO

TRADICIONAL

INEFICIENTE

CONSIDERAR LA DISTRIBUCIÓN DE
PROBABILIDAD DE LA MUESTRA PARA
VALORAR LAS CONTRIBUCIONES MÁS
IMPORTANTES.



GENERAR CANDIDATO ALEATORIO Φ'

CALCULAR $\Delta S = -\ln(P(\Phi')/P(\Phi_1))$

SI $\Delta S < 0$ HACER NUEVO ESTADO $\Phi' = \Phi_2$

SI $\Delta S > 0$ ACEPTAR EL NUEVO CANDIDATO CON $P(\Phi')/P(\Phi_1)$

SI NO SE CUMPLE
RETENER Φ_1

SIGUIENTE ITERACION

ALGORITMO METROPOLIS

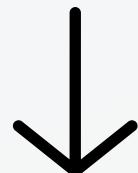
$$P_s = \frac{1}{Z} e^{-E_s/k_B T},$$

PROBABILIDAD DE BOLTZMANN

$$W' = P(n_i \rightarrow n_j) = \frac{p(E_{n_j})}{p(E_{n_i})} = \frac{e^{-\beta E_{n_j}}/Z}{e^{-\beta E_{n_i}}/Z} = e^{\beta(E_{n_j} - E_{n_i})},$$

PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN

$r : \text{random.uniform()} < 0.5,$

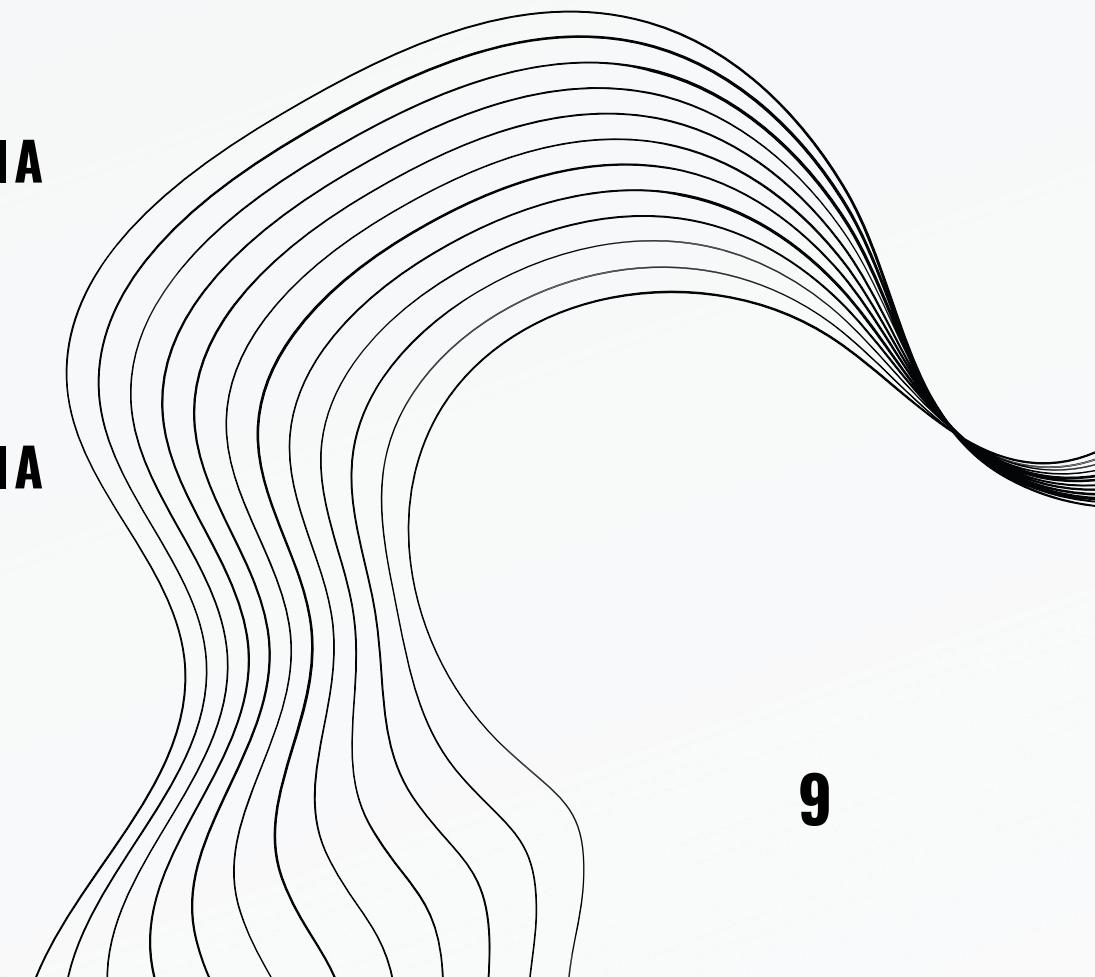


$r' : \text{random.uniform()} < W',$

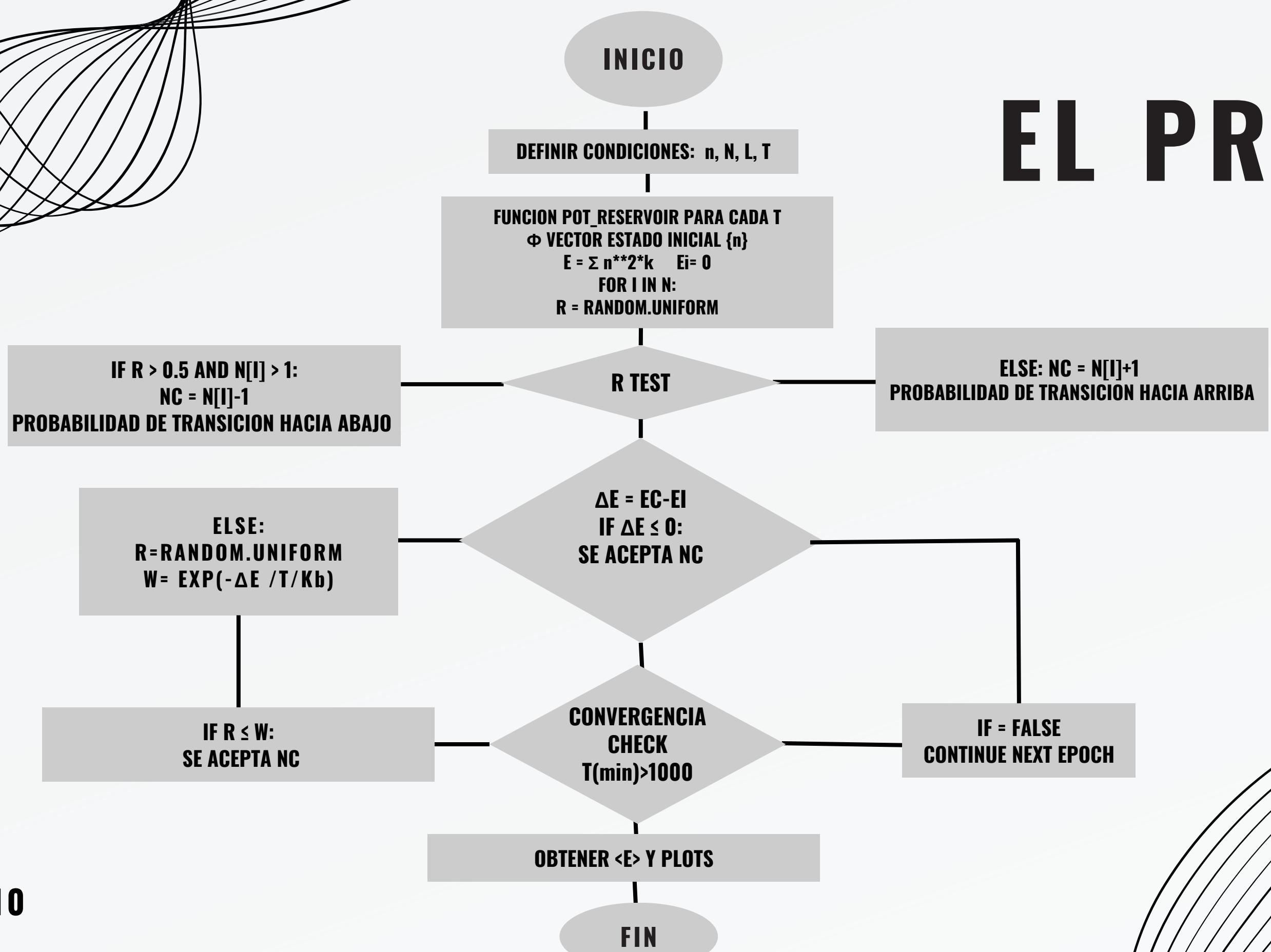
**“PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN HACIA
ABAJO”**

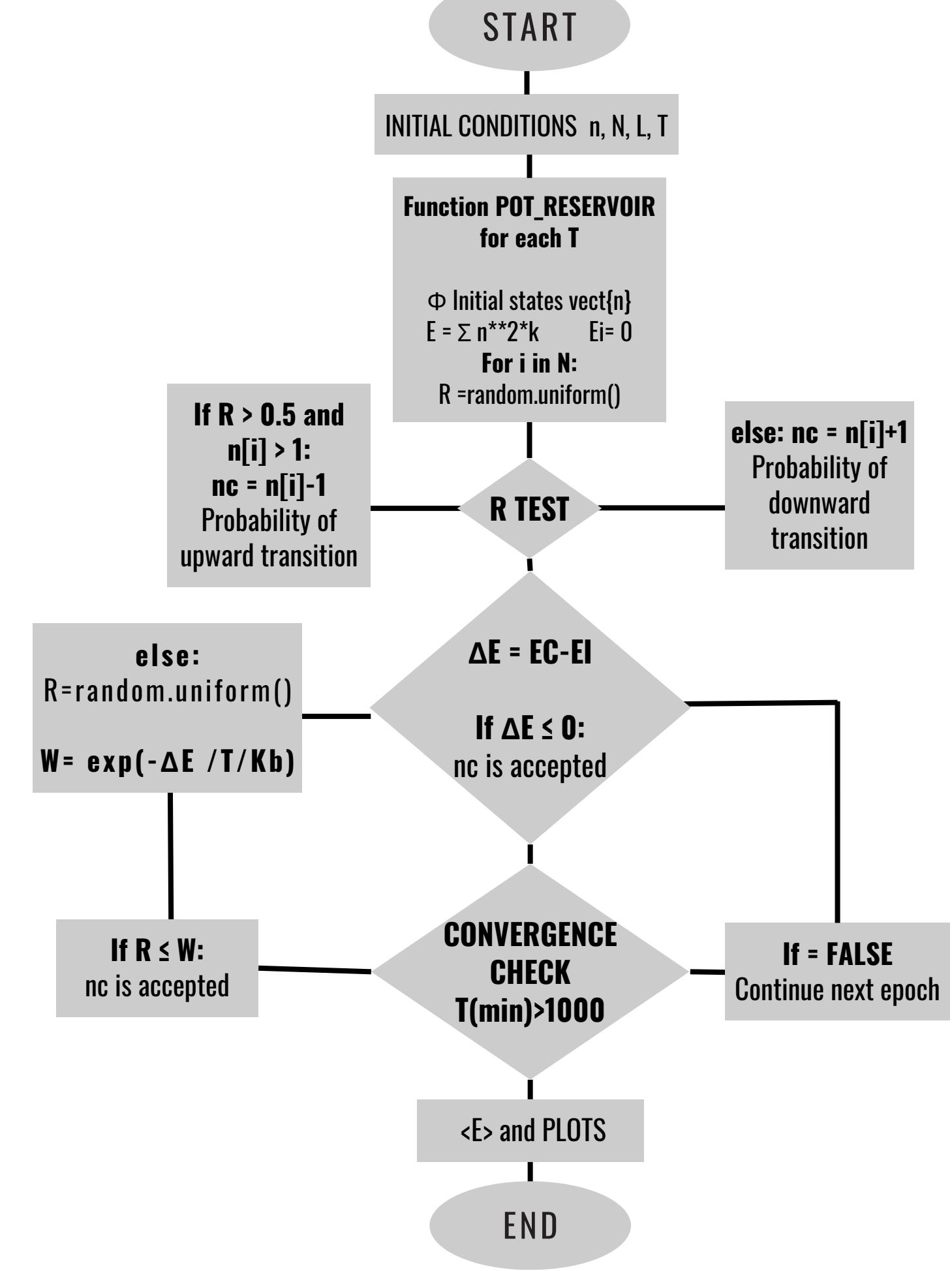
**“PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN HACIA
ARRIBA”**

**AL FINAL SE PRODUCE LA DISTRIBUCIÓN DE BOLTZMANN DESPUÉS DE UN NÚMERO
SUFICIENTE DE CICLOS**

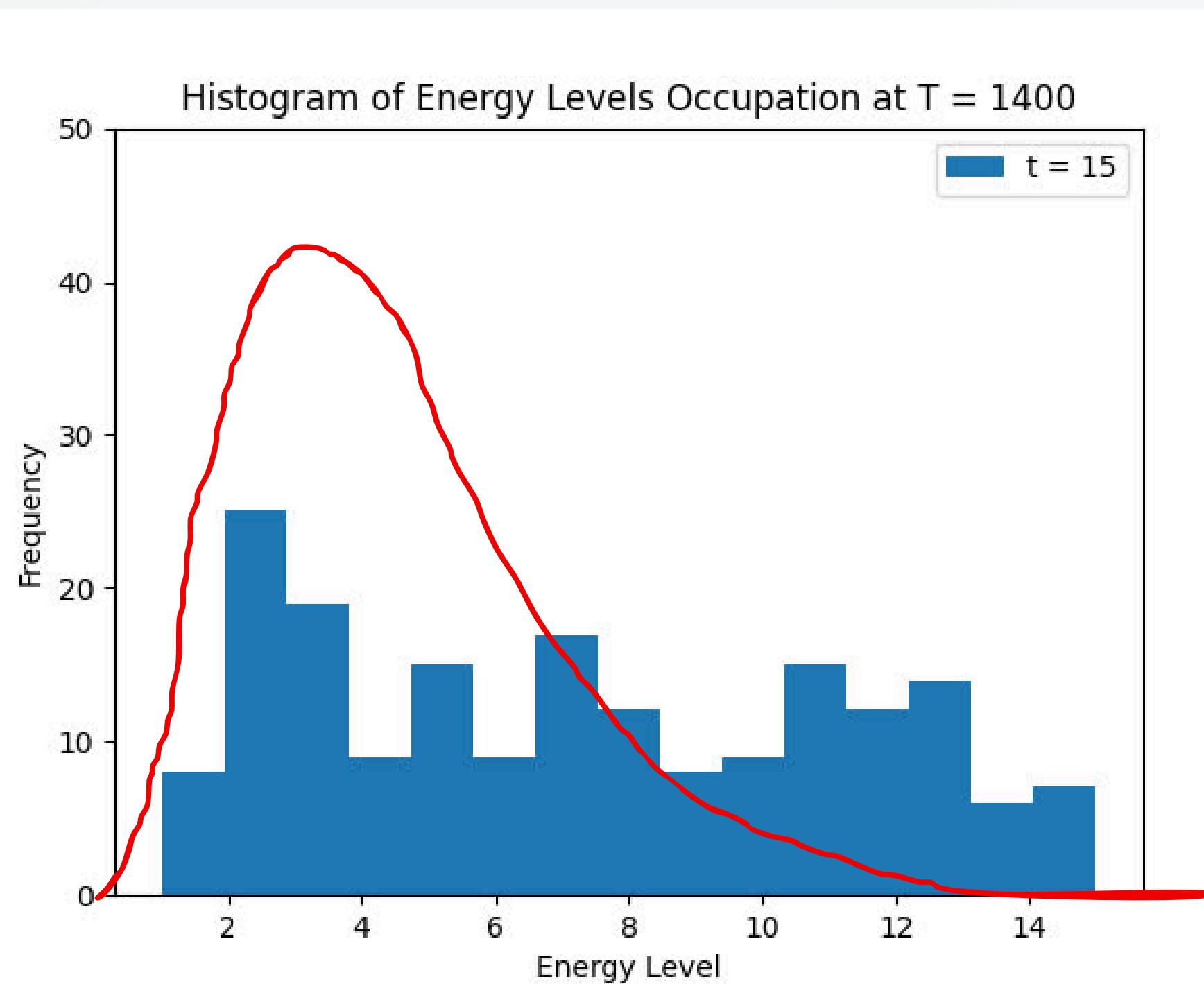


EL PROGRAMA



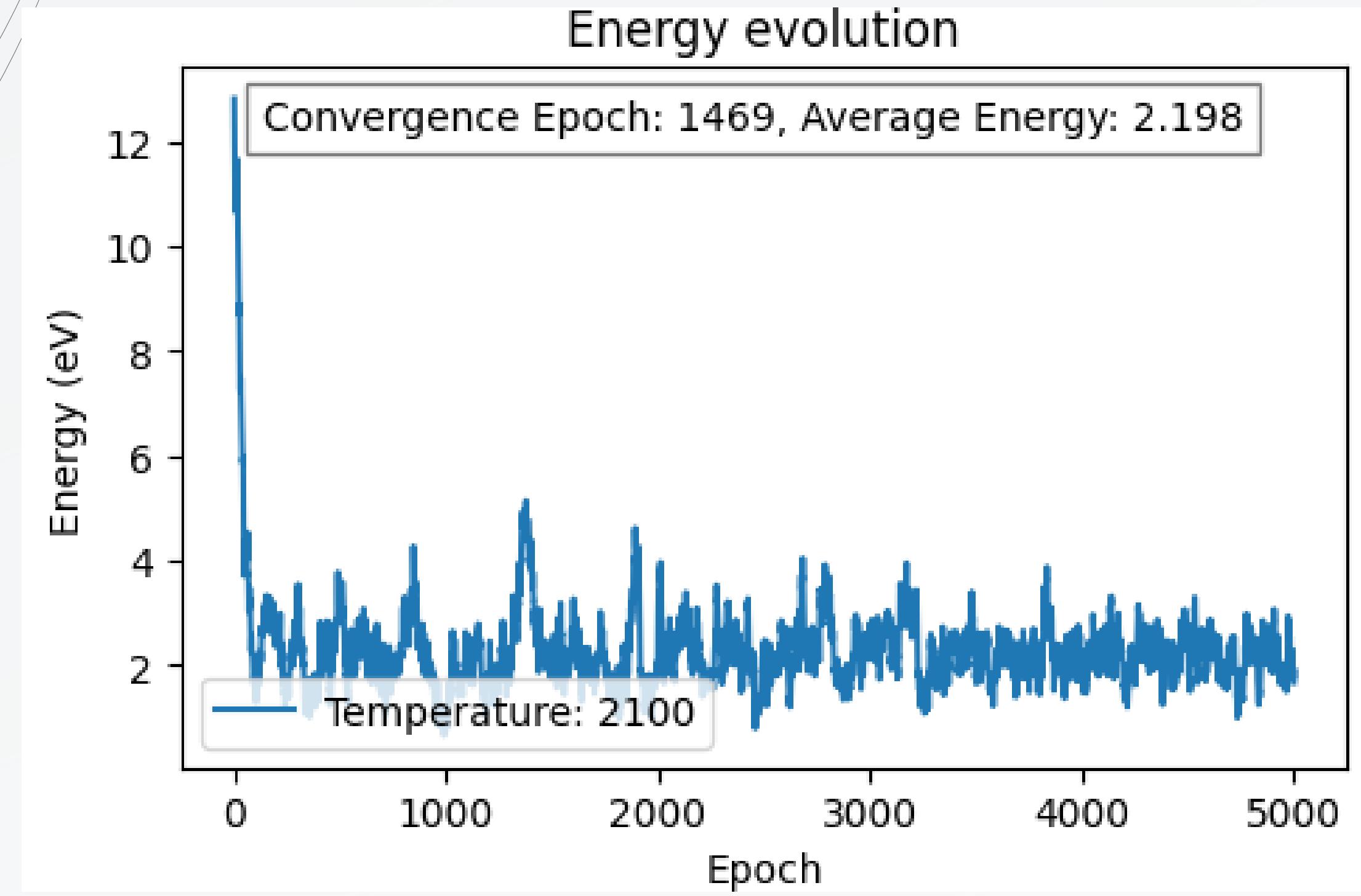


RESULTADOS



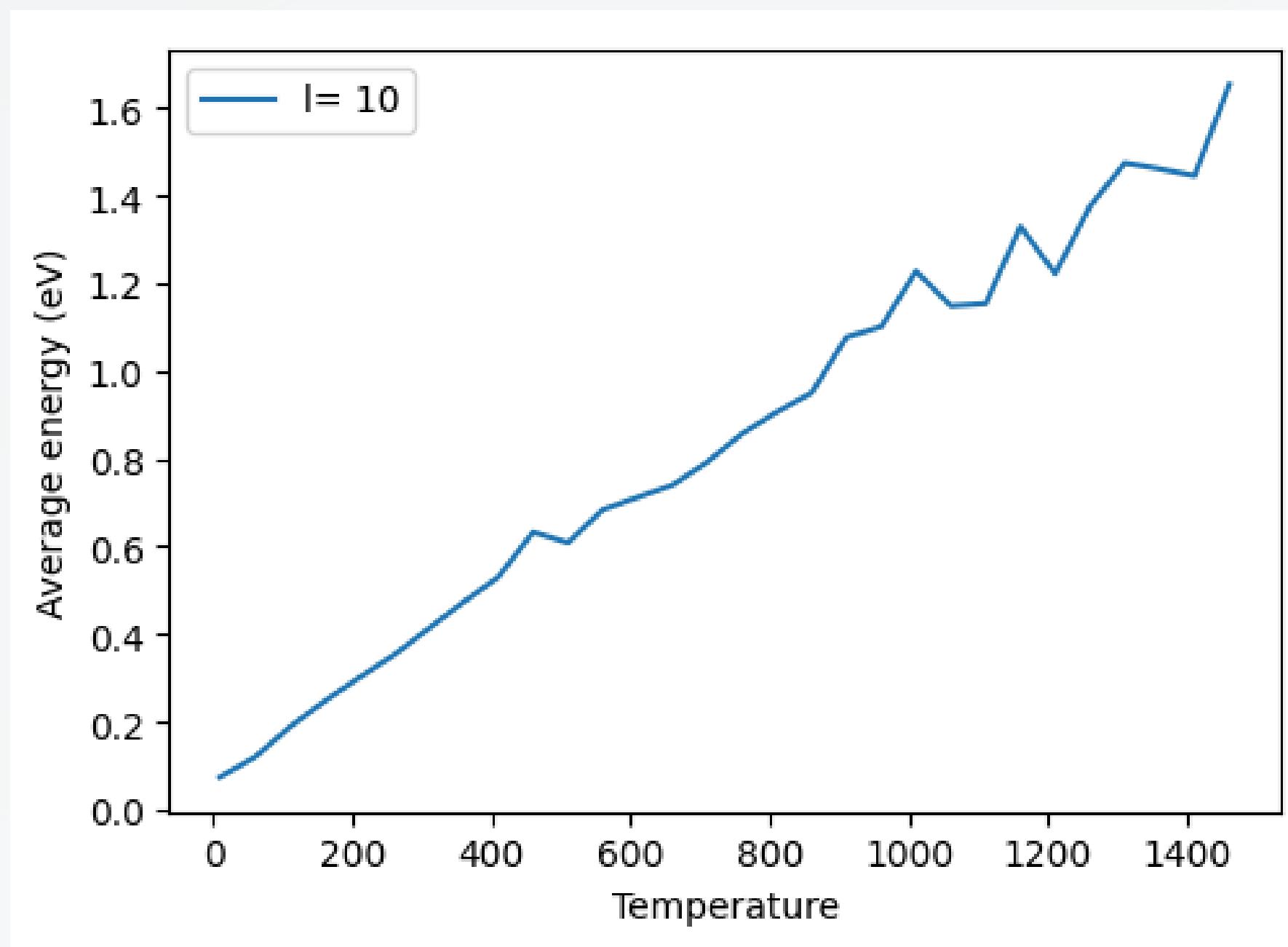
CONFORME EL SISTEMA
EVOLUCIONA Y SE ACERCA AL
EQUILIBRIO, LA DISTRIBUCIÓN
DE LOS NIVELES DE OCUPACIÓN
TIENDE A UNA DISTRIBUCIÓN
DE MAXWELL-BOLTZMAN

RESULTADOS



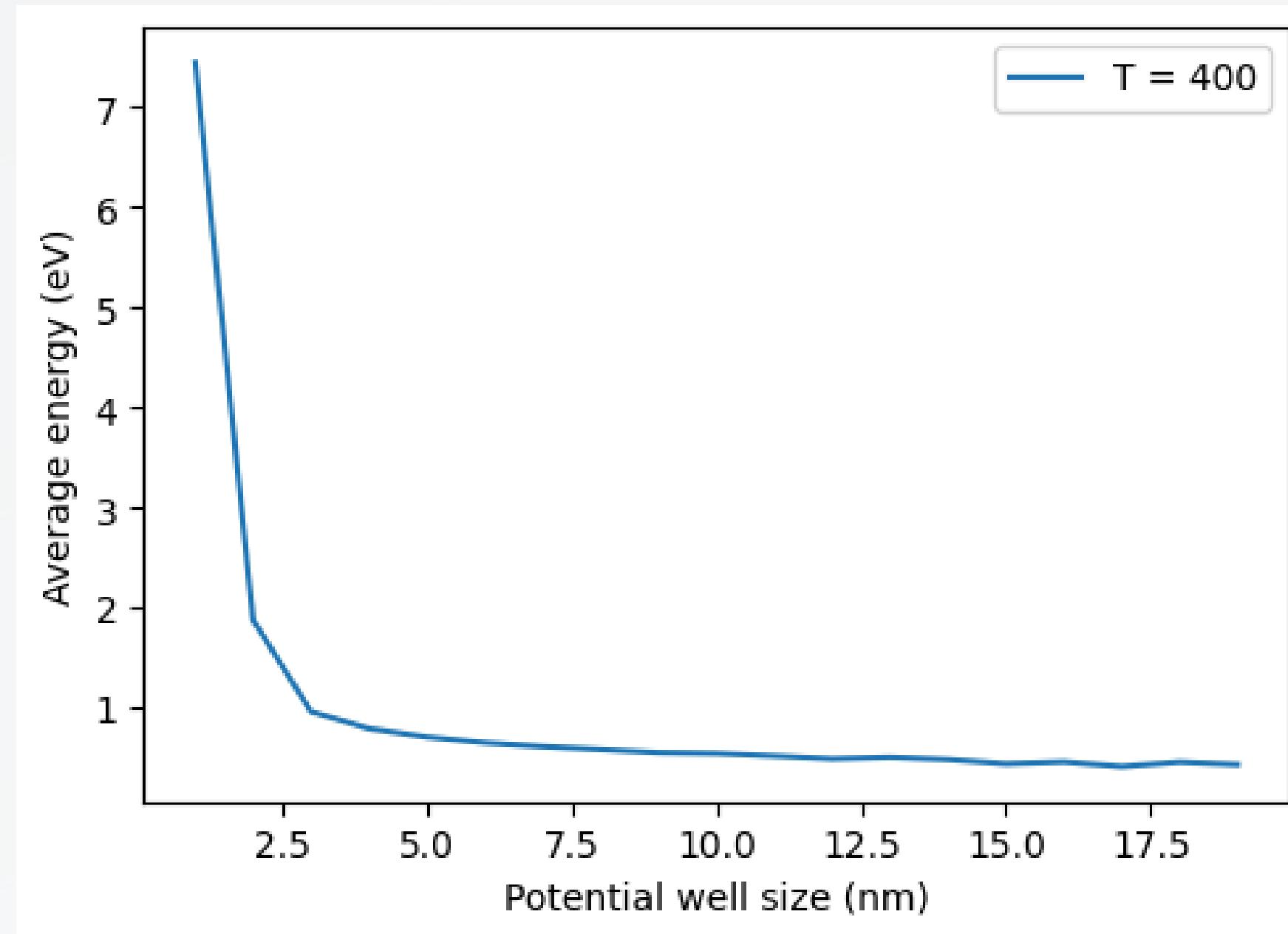
DESPUÉS DE EVOLUCIONAR
DURANTE UNAS EPOCAS, EL
SISTEMA DECAE A LO QUE
PARECIERA SER SU ESTADO
ESTACIONARIO Y LA ENERGÍA
OSCILA ALREDEDOR DE UN VALOR.
ESTA OSCILACIÓN ES MAYOR PARA
ALTAS TEMPERATURAS

RESULTADOS

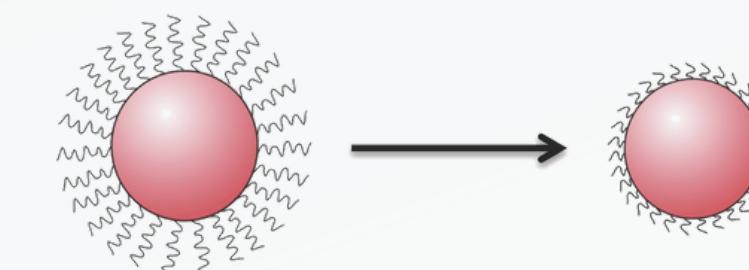


AL AUMENTAR LA TEMPERATURA DEL RESERVORIO, LA ENERGÍA TOTAL DEL SISTEMA SE ESTABILIZA EN VALORES CADA VEZ MÁS ALTOS, TENDIENDO LINEALMENTE SEGÚN LA SIMULACIÓN

RESULTADOS



A MEDIDA QUE EL TAMAÑO DE LOS POZOS POTENCIALES AUMENTA, LA ENERGÍA PARA LA CUAL SE ESTABILIZA EL SISTEMA DECRECE. ESTE RESULTADO PODRÍA SER APLICADO PARA EL CASO DE UN CONJUNTO DE PUNTOS CUÁNTICOS, LOS CUALES EMITEN MAYOR ENERGÍA CUANTO MÁS PEQUEÑOS SON.

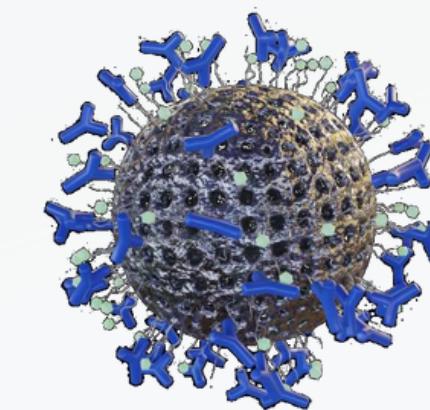


TRABAJO A FUTURO

ESTA METODOLOGIA PUEDE SER USADA PARA OBTENER LA CAPACIDAD CALORIFICA DEL SISTEMA EN FUNCION DEL TIEMPO, LO CUAL PERMITE HACER UN ESTUDIO DE LAS TRANSICIONES DE FASE DEL SISTEMA

ESTE ACERCAMIENTO ES UN PUNTO DE PARTIDA PARA ESTUDIAR DISTINTOS SISTEMAS TALES COMO PUNTOS CUANTICOS O GRUPOS DE MOLECULAS DESARROLLANDO UNA MEJOR DESCRIPCIÓN AL INTERCONECTAR LOS POZOS O DEFINIR MEJOR LAS PROBABILIDADES DE TRANSICIÓN

SE PLANEA A FUTURO, OPTIMIZAR EL CÓDIGO E IMPLEMENTAR DISTINTAS TÉCNICAS COMO PROGRAMACIÓN EN PARALELO PARA PRODUCIR MÁS DATOS Y LOGRAR UN ANÁLISIS ESTADÍSTICO PARA EL ESTUDIO DE LOS ERRORES ASOCIADOS



CONCLUSIONES

La implementación del algoritmo de metropolis permite el estudio de la energía del sistema y la relación con sus parametros de entrada sin necesidad de desarrollar calculos teoricos que en ciertos casos no pueden ser resueltos

En el futuro, se podría comparar los resultados de la simulación con datos experimentales o predicciones teóricas. Además, un análisis adicional podría implicar estudiar cómo el sistema responde a diferentes condiciones iniciales.

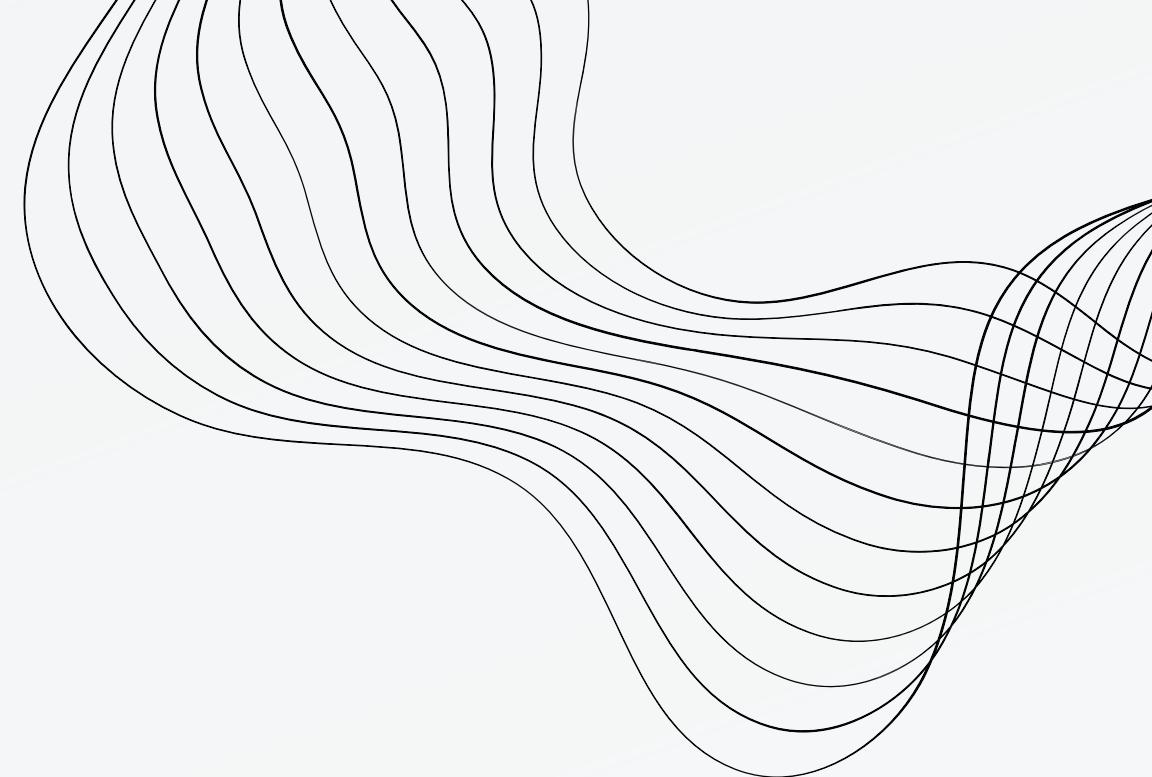
El estado estacionario se alcanza luego de varias épocas, indicando equilibrio, tardando mas a temperaturas elevadas, segun lo esperado en estos sistemas.

A mayor T, la ETOT se estabiliza en valores mas altos, siguiendo una tendencia lineal. Se alinea con los principios de la mecánica estadística.

MUCHAS GRACIAS!

Alguna pregunta?

ALGORITMO METROPOLIS

- 
1. ESTABLECER CONFIGURACIÓN INICIAL.
 2. VISITAR CADA POZO Y REALIZAR UNA TRANSICIÓN ALEATORIA DE PRUEBA EN LA CONFIGURACIÓN.
 3. CALCULAR ΔE DEBIDO AL CAMBIO DE PRUEBA.
 4. SI $\Delta E \leq 0$, ACEPTAR LA NUEVA CONFIGURACIÓN Y CONTINUAR CON (8).
 5. SI ΔE ES POSITIVO, CALCULAR LA "PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN" $\rightarrow W = e^{-\beta \Delta E}$.
 6. GENERAR R ALEATORIO EN EL INTERVALO $[0,1]$.
 7. SI $R \leq W$ ACEPTAR LA NUEVA CONFIGURACIÓN; DE LO CONTRARIO, CONSERVAR LA CONFIGURACIÓN ANTERIOR.
 8. REPETIR (2) A (7) PARA OBTENER UN NÚMERO SUFICIENTE DE CONFIGURACIONES O "ENSAYOS".
 9. CALCULAR PROMEDIOS SOBRE SUBARREGLOS DE DATOS Y COMPARAR PARA VER SI EL SISTEMA HA LLEGADO A UN EQUILIBRIO.
 10. CALCULAR UN PROMEDIO DE ENERGIA A PARTIR DEL CICLO DONDE SE HAYA IDENTIFICADO EL EQUILIBRIO.

ALGORITMO METROPOLIS

$$P_s = \frac{1}{Z} e^{-E_s/k_B T},$$

PROBABILIDAD DE BOLTZMANN

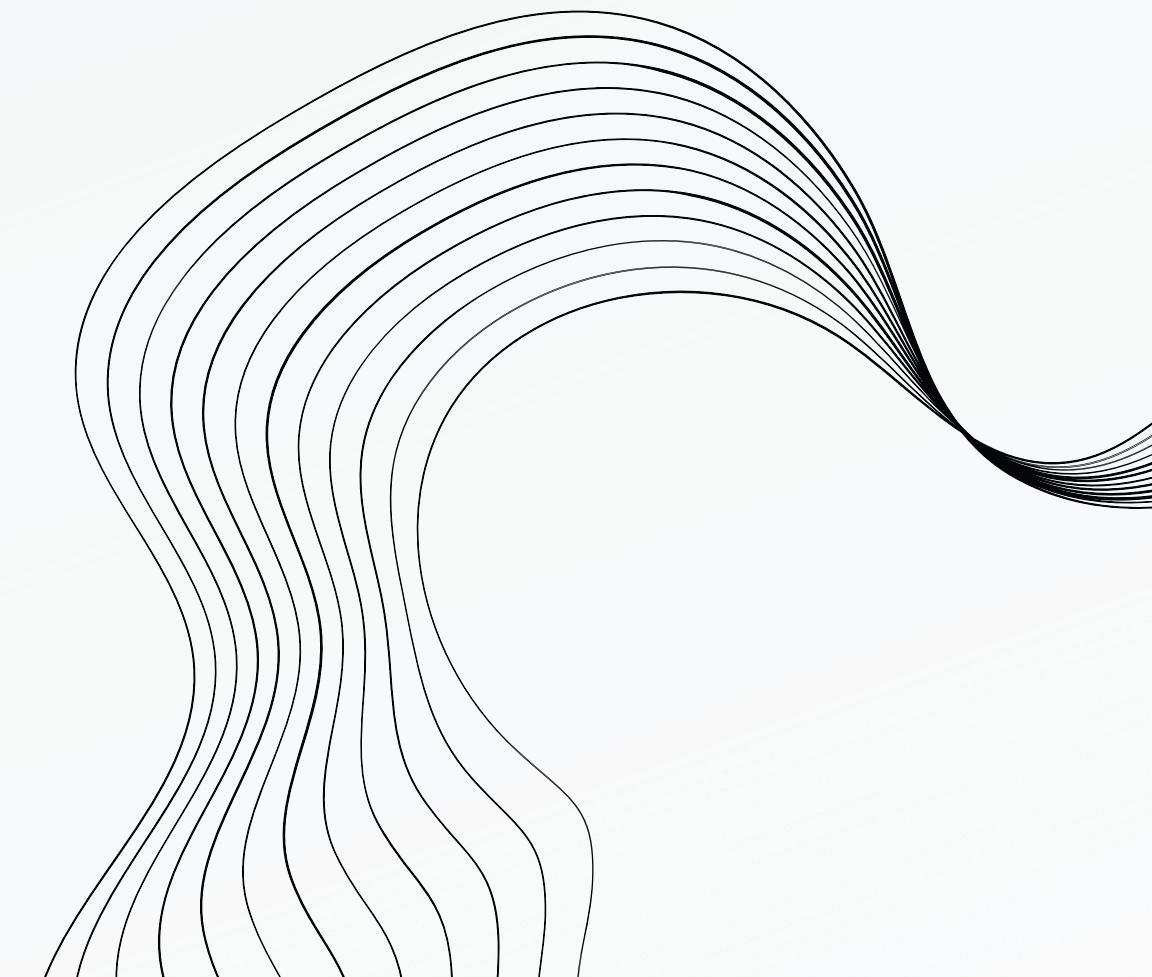
$$W' = P(n_i \rightarrow n_j) = \frac{p(E_{n_j})}{p(E_{n_i})} = \frac{e^{-\beta E_{n_j}}/Z}{e^{-\beta E_{n_i}}/Z} = e^{-\beta(E_{n_j} - E_{n_i})}$$

PROBABILIDAD DE TRANSICIÓN

$$W = \min \left(1, \frac{P_j}{P_i} \right). \quad W = \min \left(1, e^{-\beta(E_j - E_i)} \right).$$

$$W = e^{-\beta \Delta E}.$$

AL FINAL SE PRODUCE LA DISTRIBUCIÓN DE BOLTZMANN DESPUÉS DE UN NÚMERO SUFICIENTE DE CAMBIOS DE PRUEBA



REFERENCES

- [HTTPS://WEB.NORTHEASTERN.EDU/AFEIGUIN/PHYS5870/PHYS5870/NODE80.HTML](https://web.northeastern.edu/afeiguin/phys5870/phys5870/node80.html)
- STEFAN WEINZIERL. (2000). INTRODUCTION TO MONTE CARLO METHODS.
- R.K. PATHRIA, PAUL D. BEALE, 12 - PHASE TRANSITIONS: CRITICALITY, UNIVERSALITY, AND SCALING, EDITOR(S): R.K. PATHRIA, PAUL D. BEALE, STATISTICAL MECHANICS (THIRD EDITION), ACADEMIC PRESS, 2011,

ALGORITMO METROPOLIS

$$\langle E \rangle = \sum_s E_s P_s = \frac{1}{Z} \sum_s E_s e^{-\beta E_s}.$$

$$\langle A \rangle \approx A_m = \frac{\sum_{s=1}^m A_s e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^m e^{-\beta E_s}}.$$

$$A_m = \frac{\sum_{s=1}^m (A_s / \pi_s) e^{-\beta E_s} \pi_s}{\sum_{s=1}^m (1 / \pi_s) e^{-\beta E_s} \pi_s}.$$

$$A_m = \frac{\sum_{s=1}^m (A_s / \pi_s) e^{-\beta E_s}}{\sum_{s=1}^m (1 / \pi_s) e^{-\beta E_s}}.$$

ENERGIA MEDIA

VALOR MEDIO DE A

SE INTRODUCE π_s

SAMPLEO POR IMPORTANCIA

MONTE CARLO ESTRATIFICADO
TRADICIONAL
INEFICIENTE

CONSIDERAR LA DISTRIBUCIÓN DE
PROBABILIDAD DE LA MUESTRA PARA
VALORAR LAS CONTRIBUCIONES MÁS
IMPORTANTES.

