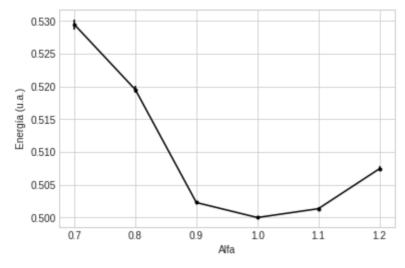
```
In [41]: from math import exp, sqrt
         from random import random, seed
         import numpy as np
         import matplotlib.pyplot as plt
         from matplotlib.ticker import LinearLocator, FormatStrFormatter
         import sys
         #FUncion prueba
         def WF(r,alfa):
              r1 = r[0,0]**2# + r[0,1]**2
              return exp(-alfa*r1/2.0)
         #Energía local
         def ELocal(r,alfa):
              r1 = r[0,0]**2# + r[0,1]**2
              return 0.5*(r1*(-alfa*alfa+1)+alfa)
         # Monte Carlo
         def MonteCarlo():
             Nciclos= 202500
             Paso = 1
              # posiciones
              PosicionVieja = np.zeros((NW,Dimension), np.double)
              PsocionNueva = np.zeros((NW,Dimension), np.double)
             seed()
              # Parametro variacional
             alfa = 0.6
              for ia in range(Variaciones):
                 alfa += .1
                  alfaValues[ia] = alfa
                 energia = 0.0
                 energia2 = 0.0
                 DeltaE = 0.0
                  #Posiciones inicales
                 for i in range(NW):
                      for j in range(Dimension):
                          PosicionVieja[i,j] = Paso*(random() - .5)
                 wfold = WF(PosicionVieja,alfa)
                  for MCci in range(Nciclos):
                      if (MCci<Nciclos/2): #termalizacion</pre>
                          energia=0.0
                          energia2=0.0
                          aux=0
                      aux=aux+1
                      for i in range(NW):
                          for j in range(Dimension):
                              PsocionNueva[i,j] = PosicionVieja[i,j]+Paso*
         (random()-.5)
                      wfnew = WF(PsocionNueva,alfa)
                      #Metropolis
                      if random() < wfnew**2/wfold**2:</pre>
                          PosicionVieja= PsocionNueva.copy()
```

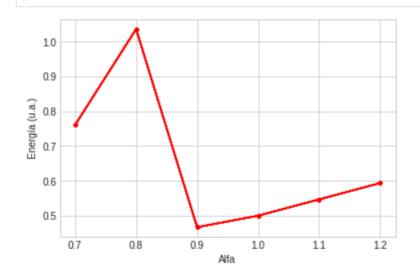
```
wfold = wfnew
            DeltaE = ELocal(PosicionVieja,alfa)
            energia += DeltaE
            energia2 += DeltaE**2
        #Media, varianza, error
        energia /= aux
        energia2 /= aux
        varianza = energia2-energia**2
        error[ia] = sqrt(varianza/aux)
        Energias[ia] = energia
    return Energias, alfaValues, PosicionVieja, error
NParticulas = 1
NW=500
Dimension = 1
Variaciones = 6
Energias = np.zeros((Variaciones, Variaciones))
alfaValues = np.zeros(Variaciones)
error = np.zeros(Variaciones)
(Energias, alfaValues,PosicionVieja,error) = MonteCarlo()
#ploteamos
plt.plot(alfaValues, Energias, '.-r')
plt.show()
0.530
0.525
0.520
0.515
0.510
0.505
0.500
      0.7
              0.8
                      0.9
                             1.0
                                     1.1
                                             1.2
```

```
In [59]: fig = plt.figure()
   plt.style.use('seaborn-whitegrid')
   plt.errorbar(AlphaValues, Energiess, yerr=error, fmt='.-k')
   plt.xlabel("Alfa")
   plt.ylabel("Energía (u.a.)")
   plt.savefig('Ealga.png')
   plt.show()
```



```
In [ ]: from math import exp, sqrt
        from random import random, seed
        import numpy as np
        import matplotlib.pyplot as plt
        from mpl toolkits.mplot3d import Axes3D
        from matplotlib import cm
        from matplotlib.ticker import LinearLocator, FormatStrFormatter
        import sys
        #FUncion prueba
        def WF(r.alfa):
            r1 = r[0,0]**2# + r[0,1]**2
            return exp(-alfa*r1/2.0)
        #Energía local
        def ELocal(r,alfa):
            r1 = r[0,0]**2# + r[0,1]**2
            return 0.5*(r1*(-alfa*alfa+1)+alfa)
        def BoxMuller(u1,u2,sigma,mu):
            z1 = np.sqrt(-2*np.log(u1))*np.cos(2*np.pi*u2)
            z2 = np.sqrt(-2*np.log(u1))*np.sin(2*np.pi*u2)
            #Devolvemos z1 por ejemplo en su forma general
            return z1*sigma+mu
        # Monte Carlo
        def MonteCarlo():
            Nciclos= 202500
            Paso = 1
            # posiciones
            PosicionVieja = np.zeros((NW,Dimension), np.double)
            PsocionNueva = np.zeros((NW,Dimension), np.double)
            seed()
            # Parametro variacional
            alfa = 0.6
            for ia in range(Variaciones):
                alfa += .1
                 alfaValues[ia] = alfa
                energia = 0.0
                energia2 = 0.0
                DeltaE = 0.0
                 #Posiciones inicales
                 for i in range(NW):
                     for j in range(Dimension):
                         PosicionVieja[i,j] = BoxMuller(u1,u2,1,0)
                wfold = WF(PosicionVieja,alfa)
                 for MCci in range(Nciclos):
                     if (MCci<Nciclos/2): #termalizacion</pre>
                         energia=0.0
                         energia2=0.0
                         aux=0
                     aux=aux+1
                     for i in range(NW):
                         for j in range(Dimension):
                             PsocionNueva[i,j] = PosicionVieja[i,j]+BoxMul
        ler(u1,u2,1,0)
                     wfnew = WF(PsocionNueva,alfa)
```

```
DeltaE = ELocal(PosicionVieja,alfa)
                      energia += DeltaE
                      energia2 += DeltaE**2
                  #Media, varianza, error
                 energia /= aux
                 energia2 /= aux
                 varianza = energia2-energia**2
                 error[ia] = sqrt(varianza/aux)
                  Energias[ia] = energia
              return Energias, alfaValues, PosicionVieja, error
         NParticulas = 1
         NW=500
         Dimension = 1
         Variaciones = 6
         Energias = np.zeros((Variaciones, Variaciones))
         alfaValues = np.zeros(Variaciones)
         error = np.zeros(Variaciones)
         (Energias, alfaValues, PosicionVieja, error) = MonteCarlo()
         #ploteamos
         plt.plot(alfaValues, Energias, '.-r')
         plt.show()
In [29]: | fig = plt.figure()
         plt.style.use('seaborn-whitegrid')
```



plt.plot(AlphaValues, Energies, '.-r')

plt.ylabel("Energía (u.a.)")
plt.savefig('Ealga2.png')

plt.xlabel("Alfa")

plt.show()

```
In [34]: plt.hist(PositionOld, density=1, bins=200, histtype='bar', faceco
lor='r')
   plt.xlabel("Posición (u.a.)")
   plt.ylabel("Frecuencia relativa")
   plt.title("Muestreo de la función de onda para $a=1$, $N=1$, $d=
    1$ y 5000 caminantes")
   plt.savefig("MC-histo.png")
```

Muestreo de la función de onda para a = 1, N = 1, d = 1 y 5000 caminantes 0.0035 0.0030 Frecuencia relativa 0.0025 0.0020 0.0015 0.0010 0.0005 0.0000 -400 -200 0 200 400 Posición (u.a.)

```
In [13]: import sympy as sp
a,x = sp.symbols('a,x', positive=True)
def f(x):
    return ((a/sp.pi)**(1/4)*sp.exp(-0.5*a*x**2))**2*0.5*(x**2*
    (1-a**2)+a)
d=sp.integrate(f(x),(x,-sp.oo,sp.oo))
```

In [14]:

Out[14]: $0.25a^{1.0} + \frac{0.25}{a}$