MONTE CARLO

December 8, 2017

1 Oscilador armónico unidimesional con el Método de Monte Carlo

1.1 Modelo

Consideramos un oscilador armónico de una dimensión con un espectro de energía dado por:
$E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$

Para su resolución se utilizará el proceso de Markov que considera que cada estado microscópico sólo depende del último estado y no de los visitados anteriormente. Adicionalmente, se tiene la Condición de Balance Detallado (CBR) descrita a continuación.
$W(q' \to q)P_{eq}(q') - W(q \to q')P_{eq}(q) = 0$

A partir de esto, podemos utilizar el algoritmo de Metrópolis para aplicar el método de Monte Carlo a nuestro sistema.

1.2 Aplicación

Definimos librerías a utilizar

```
In [1]: #######################################################
        import numpy as np                       # Libreria numpy ##
        from numba import jit, njit, prange # Libreria numba ##
        from math import exp                     # importar exp ####
        #######################################################
```

definición de la función que moverá nuestro estado adelante o atrás $n \to n' = \pm 1$ con probabilidad uniforme.

```
In [2]: @jit
        def E(it, beta, n, hw, cont):
            En = hw*(n + 0.5) #energia inicial
            E = np.zeros(it)
            for i in range (it):
                nprima = n + np.random.choice([-1,1]) #estado n'

                if nprima < 0:
                    nprima = n + 1.
                else:
                    nprima = nprima
```

```
            Enp = hw*(nprima + 0.5) #energia para estado n'
            DE = Enp - En #delta de energia
            if DE <= 0:
                n = nprima
                En = Enp

            elif DE > 0:
                zeta = np.random.random_sample() #numero random entre 0,1
                alfa = zeta - np.exp(-beta*DE)
                if alfa >= 0:
                    n = n
                elif alfa < 0:
                    n = nprima
                    En = Enp

            E[i] = En
#            if i%200000 == 0:
#                print ('van', i  ,'iteraciones')

        return E
```

Definición de la variables a utilizar

```
In [3]: hw = 1.
        k = 1.
        T = 100. #Temperatura
        beta = 1./(k*T)
        n = 50. #estado inicial
        it = 2500000 #numero de iteraciones
        cont = 0
        Energy = E(it, beta, n, hw, cont) #array con las energias en cada monte ca
```

Cálculo de la energía promedio y fluctuación

```
In [4]: @njit(parallel=True)
        def Mean12_Evaluate(arr): #funcion que toma la energia promedio HASTA cada
        #    print len(arr)
            Resultado1 = np.zeros(len(arr))
            Resultado2 = np.zeros(len(arr))
            Resultado = np.zeros((2,len(arr)))
            arr2 = np.zeros(len(arr))

            arr2[:] = arr[:]**2
            for ii in prange (1,len(arr)):
                Resultado1[ii] = np.mean(arr[:ii])
                Resultado2[ii] = np.mean(arr2[:ii])
        #        if ii%100000 == 0:
        #            print 'van', ii, 'iteraciones'
            Resultado[0,:] = Resultado1[:]
```

```
            Resultado[1,:] = Resultado2[:]
            return Resultado
```

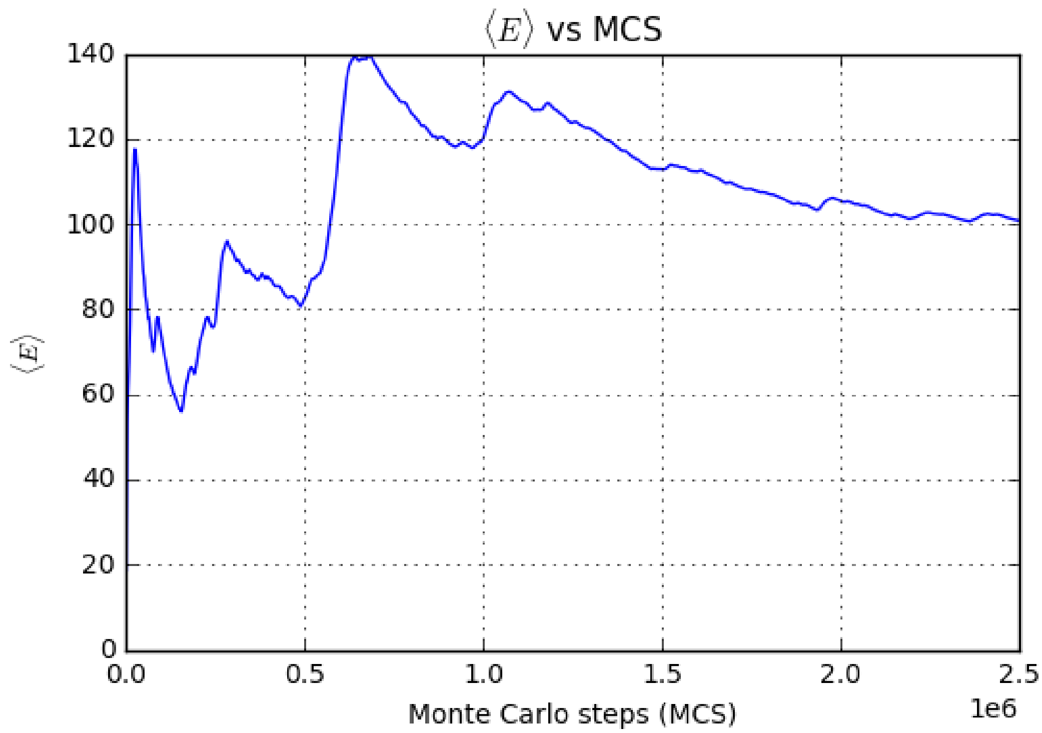
```
In [5]: #Definicion de arrays
        E2 = np.zeros(it)
        Eprom = np.zeros(it)
        E2prom = np.zeros(it)
        Eprom2 = np.zeros(it)
        Sigma = np.zeros(it)

        #calculo de promedios y fluctuaciones
        Variables = Mean12_Evaluate(Energy)
        Eprom[:] = Variables[0,:]        #energia promedio hasta cada MCS
        E2prom[:] = Variables[1,:]       #energia al cuadrado promedio hasta cada MC
        Eprom2[:] = Eprom[:]**2          #energia promedio hasta cada MCS al cuadrad
        Sigma[:] = E2prom[:]-Eprom2[:]   #fluctuacion
```

1.2.1 Gráficos

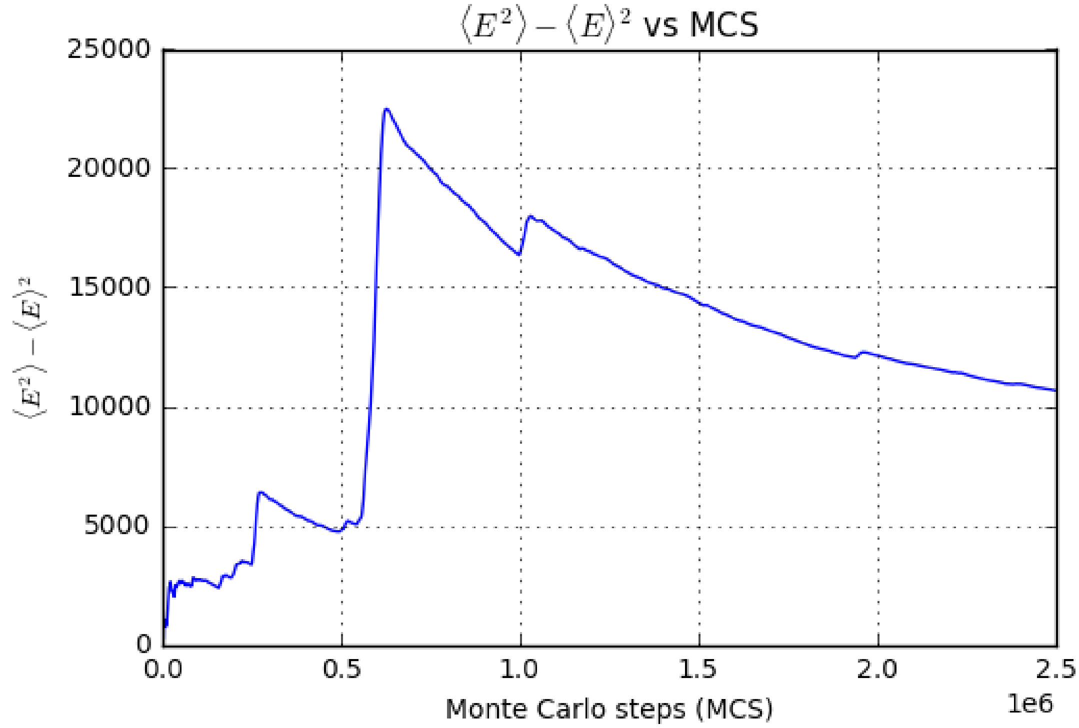
```
In [18]: import matplotlib.pyplot as plt

         plt.ticklabel_format(style='sci', axis='x', scilimits=(0,0))
         plt.plot(np.linspace(0,len(Eprom[:]),len(Eprom[:])), Eprom[:])
         plt.ylabel(r'$\langle E \rangle$')
         plt.xlabel('Monte Carlo steps (MCS)')
         plt.title(r'$\langle E \rangle$ vs MCS')
         plt.grid(True)
         plt.show()
         print 'El valor del ultimo MCS es:', Eprom[-1:][0]
```




```
El valor del ultimo MCS es: 100.835010134
```

```
In [19]: plt.ticklabel_format(style='sci', axis='x', scilimits=(0,0))
         plt.plot(np.linspace(0,len(Sigma[:]),len(Sigma[:])), Sigma[:])
         plt.ylabel(r'$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$')
         plt.xlabel('Monte Carlo steps (MCS)')
         plt.title(r'$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2$ vs MCS')
         plt.grid(True)
         plt.show()
         print 'El valor del ultimo MCS es:', Sigma[-1:][0]
```




```
El valor del ultimo MCS es: 10659.7000133
```

1.3 Comparación con valor "exacto"

Ahora compararemos nuestro resultado con el valor exacto dado por el ensemble canónico

$$\langle\epsilon\rangle = \hbar\omega\left(\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1}+\frac{1}{2}\right)$$

```
In [8]: e = hw*((1/(exp(hw*beta)-1))+0.5)
        print 'El valor exacto es =', e
```

```
El valor exacto es = 100.000833332
```

Podemos calcular además,

$$\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2 = kT^2C_v$$

$$C_v = k\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right)^2\frac{e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2}$$

```
In [9]: Cv = k*(hw*beta)**2 *exp(hw*beta)/((exp(hw*beta)-1)**2)
        DeltaE = Cv*k*T**2
        print r'El valor exacto de $\DeltaE$ es =', DeltaE
```

```
El valor exacto de $\DeltaE$ es = 9999.91666708
```

In [ ]: