MONTE_CARLO

December 26, 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)
            E2  = np.zeros(it)
            Eprom = np.zeros(it)
            E2prom = np.zeros(it)
            Eprom2 = np.zeros(it)
            Sigma = np.zeros(it)
            narr = np.zeros(it)
            for i in range (it):
                nprima = n + np.random.choice([-1,1]) #estado n'
```

```
            if nprima < 0:
                nprima = n
            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                       #energia
            E2[i] = E[i]**2                 #energia cuadrado
            narr[i] = n                     #nivel
            Eprom [i] = np.mean(E[:i])   #energia promedio
            E2prom [i] = np.mean(E2[:i])   #energia cuadrado promedio

        Eprom2[:] = Eprom[:]**2         #energia promedio hasta cada MCS al cua
        Sigma[:] = E2prom[:]-Eprom2[:]  #fluctuacion

        return Eprom, Sigma
```

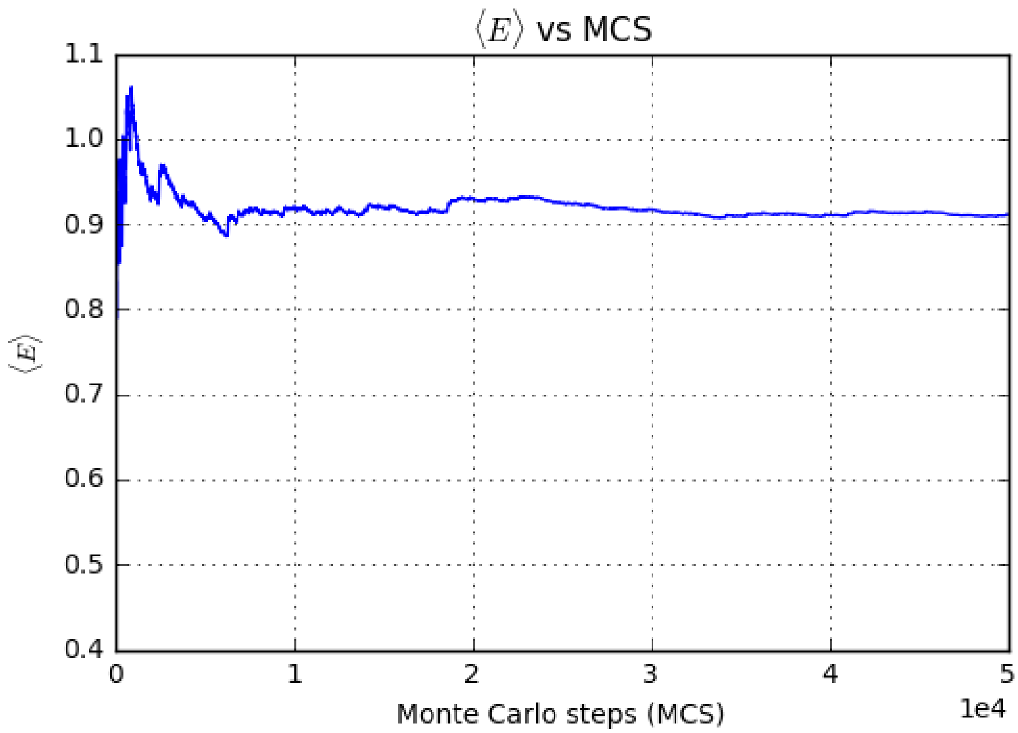
Definición de la variables a utilizar y cálculo de la enegía promedio

```
In [20]: hw = 1.
         k = 1.
         T = .8 #Temperatura
         beta = 1./(k*T)
         n = 1. #estado inicial
         it = 50000 #numero de iteraciones
         cont = 0
         Epromedio, Fluctuacion = E(it, beta, n, hw, cont) #array con las energias
```

1.2.1 Gráficos

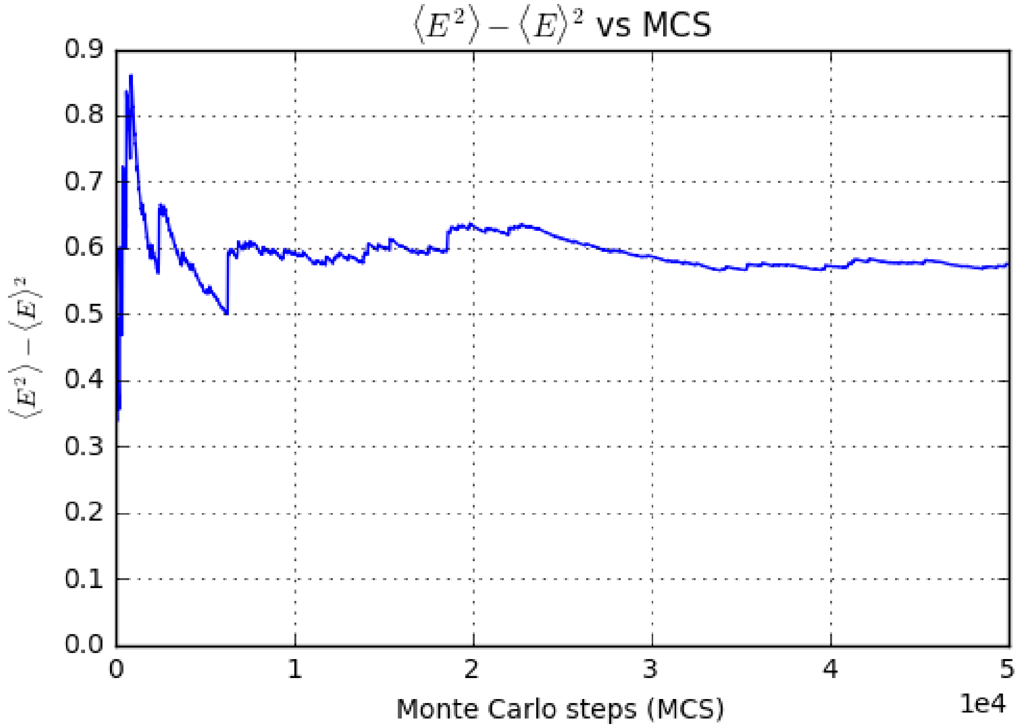
```
In [21]: import matplotlib.pyplot as plt
         from pylab import rcParams
         rcParams['figure.figsize'] = 6, 4
```

```
plt.ticklabel_format(style='sci', axis='x', scilimits=(0,0))
plt.plot(np.linspace(0,len(Epromedio[:]),len(Epromedio[:])), Epromedio[:])
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 Epromedio[-1:]
```




```
[ 0.91114822]
```

```
In [22]: plt.ticklabel_format(style='sci', axis='x', scilimits=(0,0))
         plt.plot(np.linspace(0,len(Fluctuacion[:]),len(Fluctuacion[:])), Fluctuaci
         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 Fluctuacion[-1:]
```



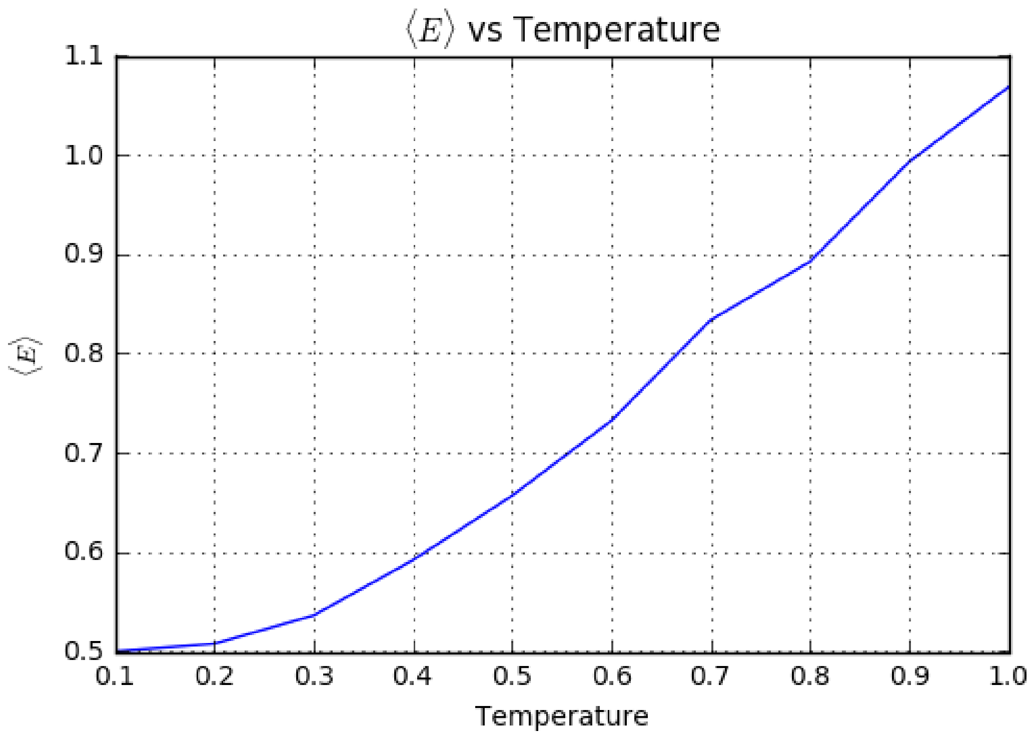

```
[ 0.57491202]
```

1.3 Dependencia de la temperatura

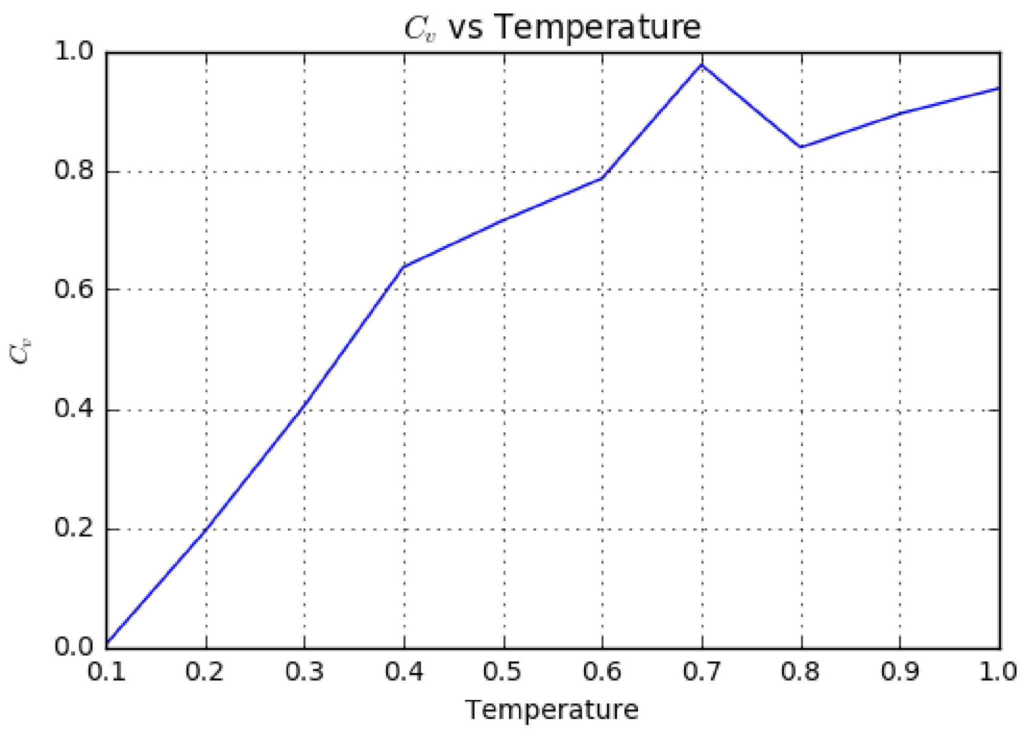
```
In [6]: R = 10
        Temp_max = 1
        U_prev = np.zeros((R,it))
        F = np.zeros((R,it))
        b = np.zeros(R)
        Cv_prev = np.zeros((R,it))
        U = np.zeros(R)
        Cv = np.zeros(R)
        Temp = np.linspace(.1, Temp_max, R)
        b[:] = 1./(k*Temp[:])
        for i in range(R):
            U_prev[i][:], F[i][:] = E(it, b[i], n, hw, cont)
            Cv_prev[i][:] = F[i][:]/(Temp[i]**2)
            U[i] = np.mean(U_prev[i][int(3e4):])
            Cv[i] = np.mean(Cv_prev[i][int(3e4):])
```

```
In [7]: #plt.ticklabel_format(style='plain', axis='x', scilimits=(0,0))
        plt.plot(Temp, U, c='blue')
```

```
plt.ylabel(r'$\langle E \rangle$')
plt.xlabel('Temperature')
plt.title(r'$\langle E \rangle$ vs Temperature')
plt.grid(True)
plt.show()
```



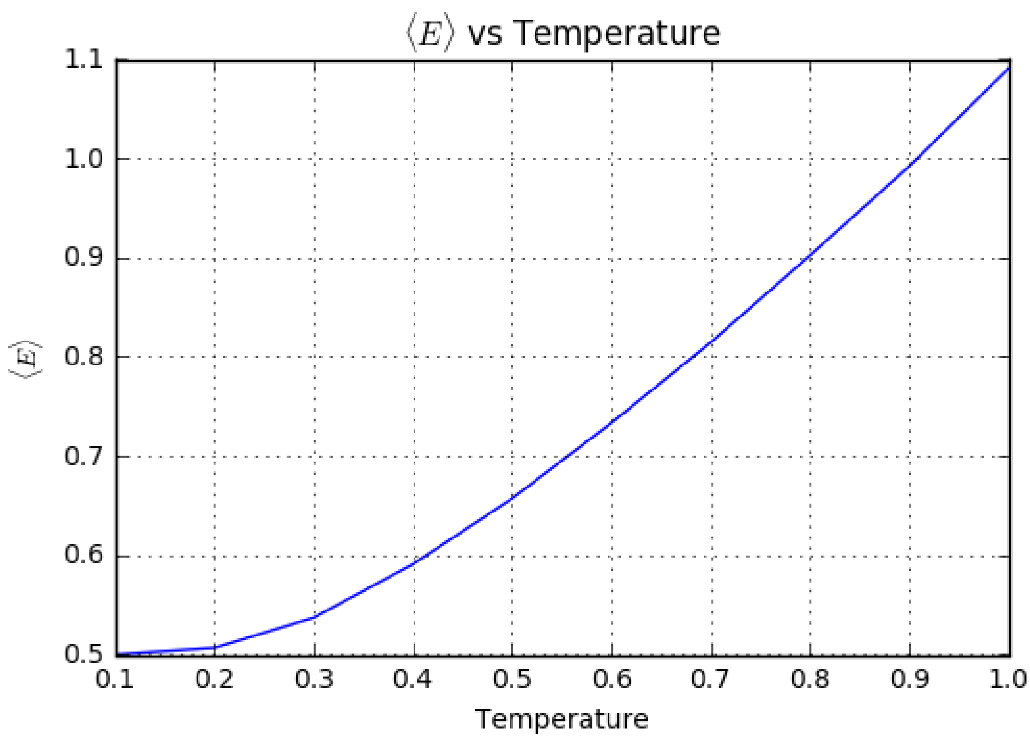

```
In [8]: #plt.ticklabel_format(style='sci', axis='x', scilimits=(0,0))
        plt.plot(Temp, Cv, c='blue')
        plt.ylabel(r'$C_v$')
        plt.xlabel('Temperature')
        plt.title(r'$C_v$ vs Temperature')
        plt.grid(True)
        plt.show()
```



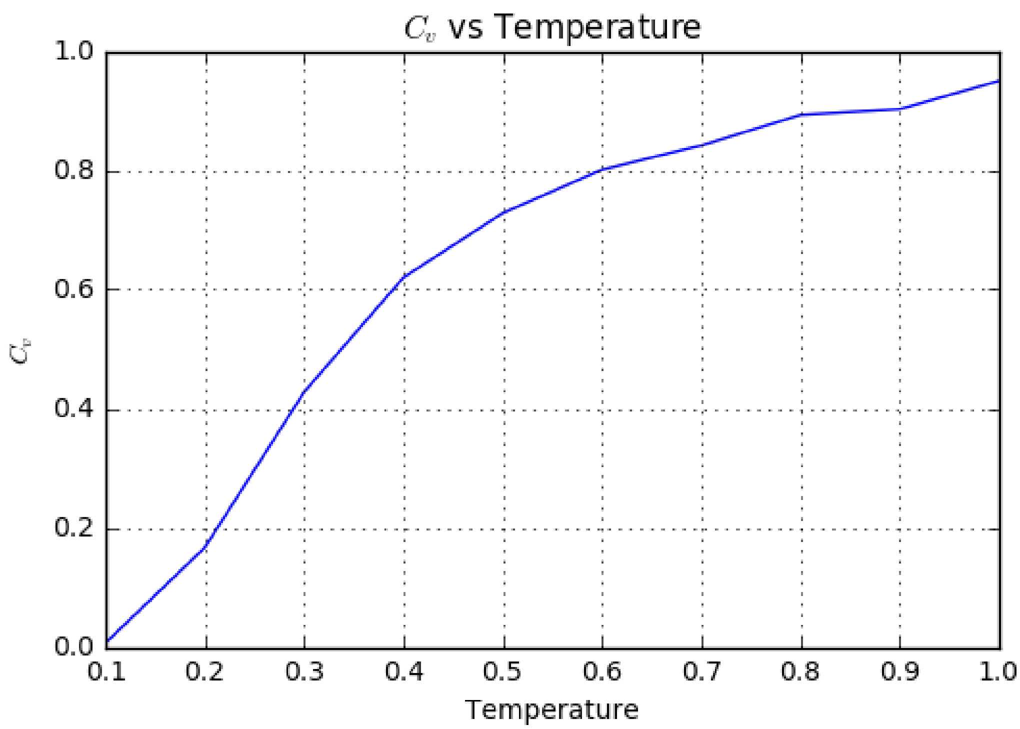
1.4 Promedio de la dependencia de la temperatura

In [9]:
```
Iteraciones = 20
R = 10
Temp_max = 1
U_prev = np.zeros((R,it))
F = np.zeros((R,it))
b = np.zeros(R)
Cv_prev = np.zeros((R,it))
U = np.zeros(R)
Cv = np.zeros(R)
Temp = np.linspace(.1, Temp_max, R)
b[:] = 1./(k*Temp[:])
Uprom = np.zeros((R,Iteraciones))
Cvprom = np.zeros((R,Iteraciones))
for j in range(Iteraciones):
    for i in range(R):
        U_prev[i][:], F[i][:] = E(it, b[i], n, hw, cont)
        Cv_prev[i][:] = F[i][:]/Temp[i]**2
        U[i] = np.mean(U_prev[i][int(3e4):])
        Cv[i] = np.mean(Cv_prev[i][int(3e4):])
        Uprom[i][j] = U[i]
        Cvprom[i][j] = Cv[i]
```

In [10]:
```python
#plt.ticklabel_format(style='sci', axis='x', scilimits=(0,0))
Upprom = np.zeros(R)
for i in range(R):
    Upprom[i] = np.mean(Uprom[i][:])
plt.plot(Temp, Upprom)
plt.ylabel(r'$\langle E \rangle$')
plt.xlabel('Temperature')
plt.title(r'$\langle E \rangle$ vs Temperature')
plt.grid(True)
plt.show()
```



In [11]:
```python
#plt.ticklabel_format(style='sci', axis='x', scilimits=(0,0))
Cvpprom = np.zeros(R)
for i in range(R):
    Cvpprom[i] = np.mean(Cvprom[i][:])
plt.plot(Temp, Cvpprom)
plt.ylabel(r'$C_v$')
plt.xlabel('Temperature')
plt.title(r'$C_v$ vs Temperature')
plt.grid(True)
plt.show()
```



1.5 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 [12]: e = hw*((1/(exp(hw*beta)-1))+0.5)
         print 'El valor exacto es =', e
```

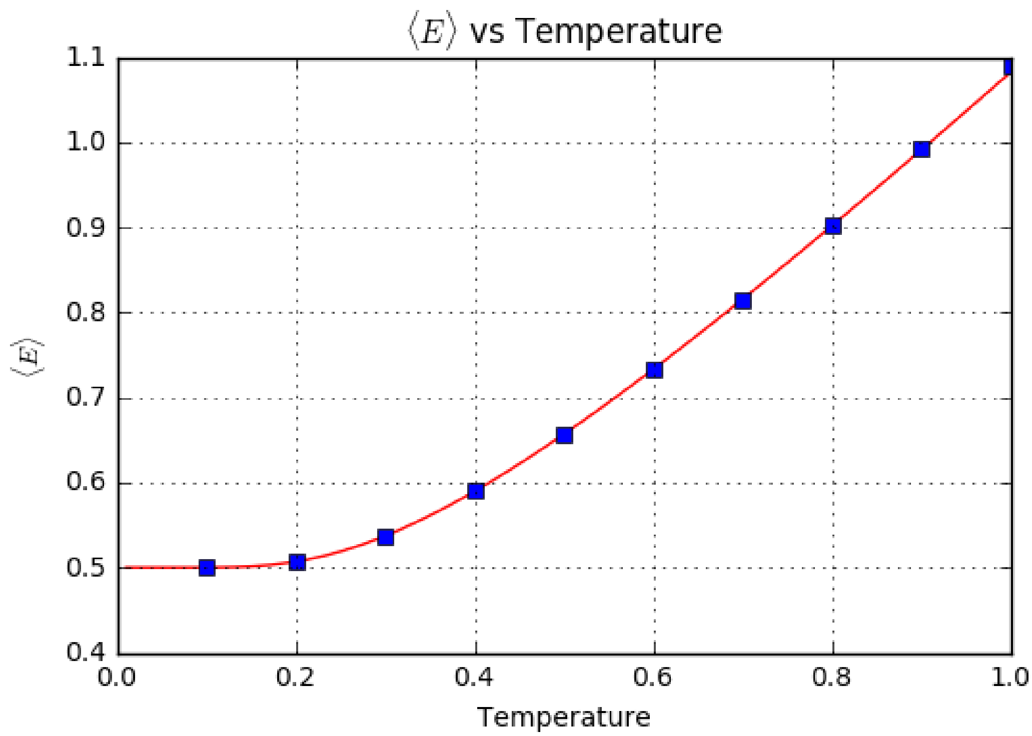
```
El valor exacto es = 1.08197670687
```

Podemos calcular además,
$\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = kT^2 C_v$
$\frac{C_v}{N} = k \left(\frac{\hbar\omega}{kT} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega/kT}}{\left(e^{\beta\hbar\omega} - 1 \right)^2}$

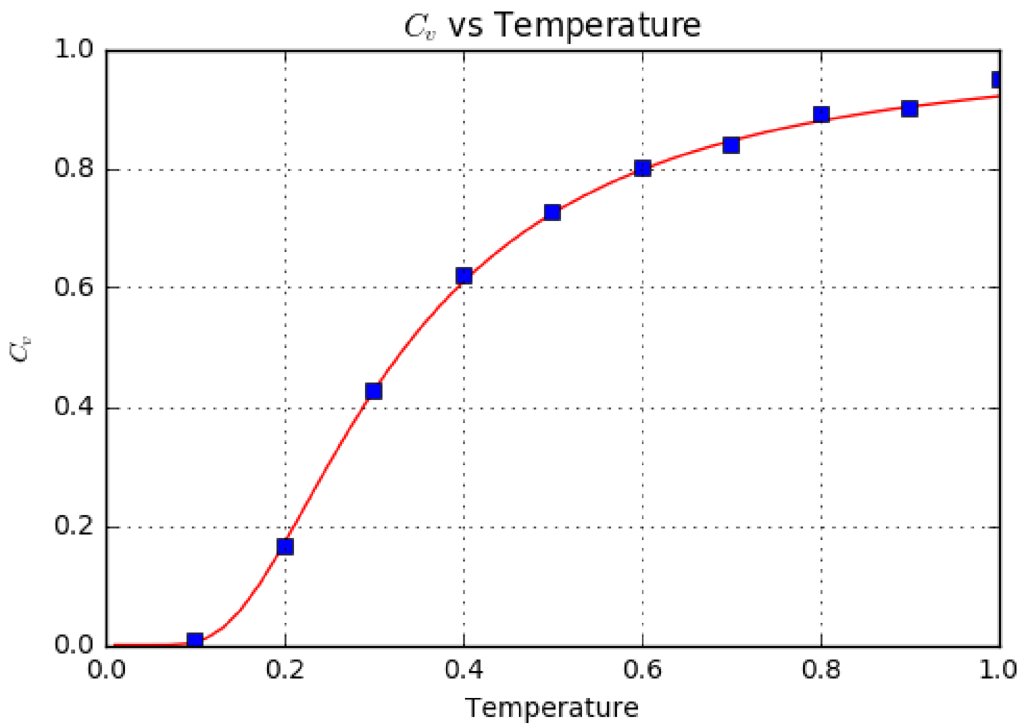
```
In [13]: Cv = k*(hw*beta)**2 *exp(hw*beta)/((exp(hw*beta)-1)**2)
         DeltaE = Cv*k*T**2
         print r'El valor exacto de $C_v$ es =', Cv
         print r'El valor exacto de $\DeltaE$ es =', DeltaE
```

```
El valor exacto de $C_v$ es = 0.920673594208
El valor exacto de $\DeltaE$ es = 0.920673594208
```

```
In [14]: Rex = 1
         bex = np.zeros(50)
         Tempex = np.linspace(.01, Rex)
         bex[:] = 1./(k*Tempex[:])
         en = np.zeros(50)
         en[:] = hw*((1/(np.exp(hw*bex[:])-1))+0.5)
         plt.plot(Tempex, en, c='red')
         plt.plot(Temp, Upprom, marker = 's', ls='None', c='blue')
         plt.ylabel(r'$\langle E \rangle$')
         plt.xlabel('Temperature')
         plt.title(r'$\langle E \rangle$ vs Temperature')
         plt.grid(True)
         plt.show()
```




```
In [15]: Cvex = np.zeros(50)
         Cvex[:] = k*(hw*bex[:])**2 *np.exp(hw*bex[:])/((np.exp(hw*bex[:])-1)**2)
         plt.plot(Tempex, Cvex, c='red')
         plt.plot(Temp, Cvpprom, marker = 's', ls='None', c='blue')
         plt.ylabel(r'$C_v$')
         plt.xlabel('Temperature')
         plt.title(r'$C_v$ vs Temperature')
         plt.grid(True)
         plt.show()
```

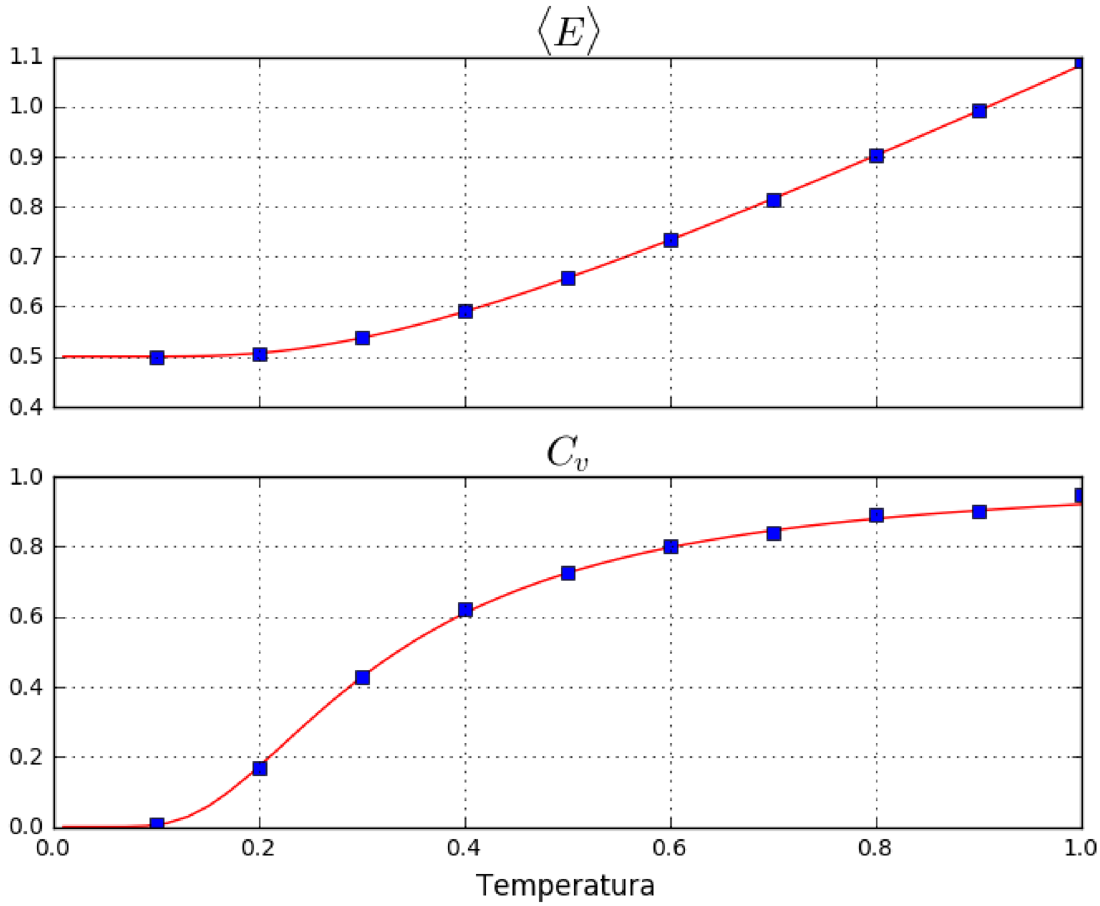



```
In [27]: rcParams['figure.figsize'] = 8, 6
         f, axarr = plt.subplots(2, sharex=True)

         axarr[0].set_title(r'$\langle E \rangle$', fontsize=18)
         axarr[0].plot(Tempex, en, c='red')
         axarr[0].plot(Temp, Upprom, marker = 's', ls='None', c='blue')
         axarr[0].grid()

         axarr[1].set_title(r'$C_v$', fontsize=18)
         axarr[1].plot(Tempex, Cvex, c='red')
         axarr[1].plot(Temp, Cvpprom, marker = 's', ls='None', c='blue')
         axarr[1].grid()

         plt.xlabel('Temperatura', fontsize=12)
         plt.show()
```



$\langle E \rangle$
1.1
1.0
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
C_v
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
0.0
0.2
0.4
0.6
0.8
1.0
Temperatura


```
In [ ]:
```