



Área Académica de Ingeniería Física

Física Computacional I

Tarea 5

Estudiante:
Ever Ortega Calderón

Fecha de entrega:
04 de junio de 2021

Profesores:
Álvaro Amador Jara
Jose Esteban Pérez Hidalgo

I Semestre 2021

Simulación de Monte Carlo

Pseudocódigo

- Se crea una función que calcula posiciones aleatorias, creando números aleatorios entre -1 y 1, estas posiciones se dividen entre la raíz cuadrada de cada una de ellas al cuadrado, para que así el desplazamiento sea 1 y se multiplican por el parámetro l , de esta forma el desplazamiento tendrá longitud l , se suma cada una de estas posiciones a la anterior para crear el movimiento del fotón y cada una de las coordenadas se agrega a un arreglo que almacena las posiciones.
- Se deben establecer los parámetros iniciales, el radio que debe alcanzar el fotón, la velocidad de la luz, la cantidad de veces que se correrá la simulación para eliminar fluctuaciones, el parámetro l , la cantidad de pasos acumulados y el tiempo del fotón recorriendo el camino estocástico.
- Por medio de un ciclo se calculan varios caminos estocásticos para promediar, en este ciclo se deberá correr la función creada al inicio hasta que el fotón alcance la distancia requerida, esto se hará comparando cada una de las coordenadas, si una de ellas alcanza el valor requerido entonces el fotón habrá recorrido la distancia deseada, en cada paso se suma el paso l al desplazamiento.
- Se calcula el tiempo que duró el fotón en el camino estocástico, dividiendo el tiempo entre la velocidad del fotón.
- Se hace la conversión, estando el tiempo en segundos, a años.
- Se promedia la cantidad de pasos acumulada con la cantidad de repeticiones que se realizaron.
- Se muestra al usuario los resultados de los pasos en promedio y el tiempo del recorrido.
- Se realiza el gráfico del camino del fotón
- Poner un contador en el código que indique la duración de la simulación, para poder estimar parámetros de la simulación a a partir de valores de radio más pequeños.

Código generado

<https://github.com/ever2706/FCI-Tarea5.git>

Análisis de resultados

Radio=1

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

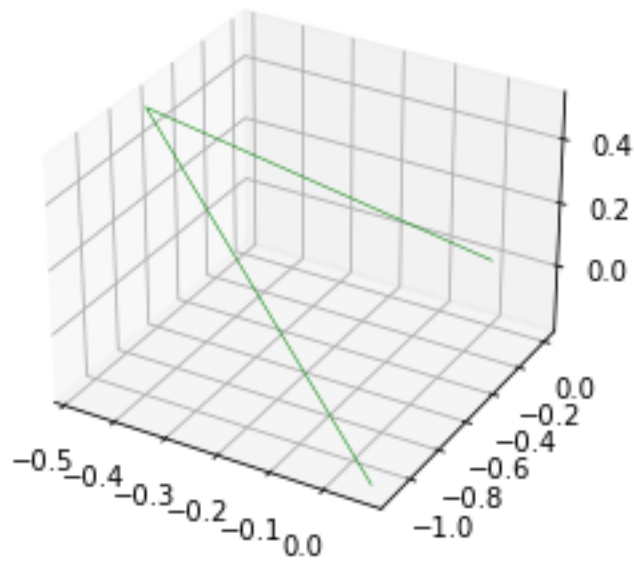


Fig 1. Camino aleatorio del fotón con Radio=1

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 2.4333333333333333

El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 1.286017681396615e-20 años

El tiempo de ejecución fue de 0.0750 segundos

Radio=5

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

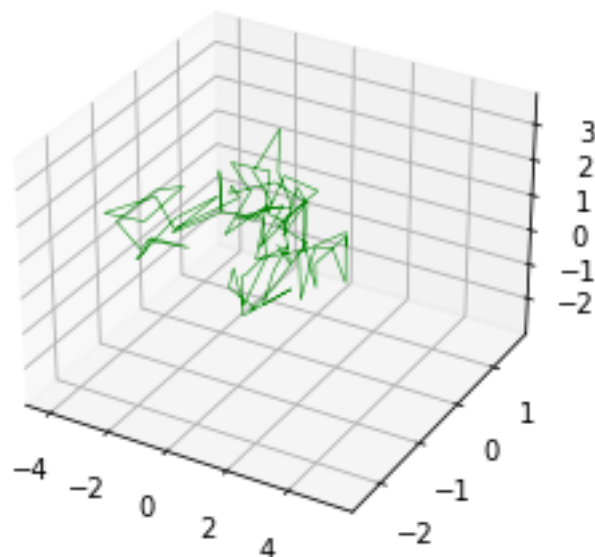


Fig 2. Camino aleatorio del fotón con Radio=5

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 41.0

El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 2.1668517097504608e-19 años

El tiempo de ejecución fue de 0.0821 segundos

Radio=10

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

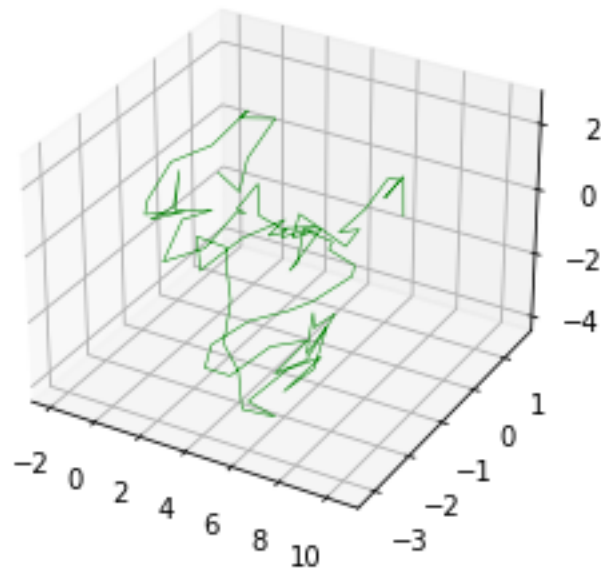


Fig 3. Camino aleatorio del fotón con Radio=10

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
177.66666666666666

El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
9.389690742252007e-19 años

El tiempo de ejecución fue de 0.1166 segundos

Radio=50

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

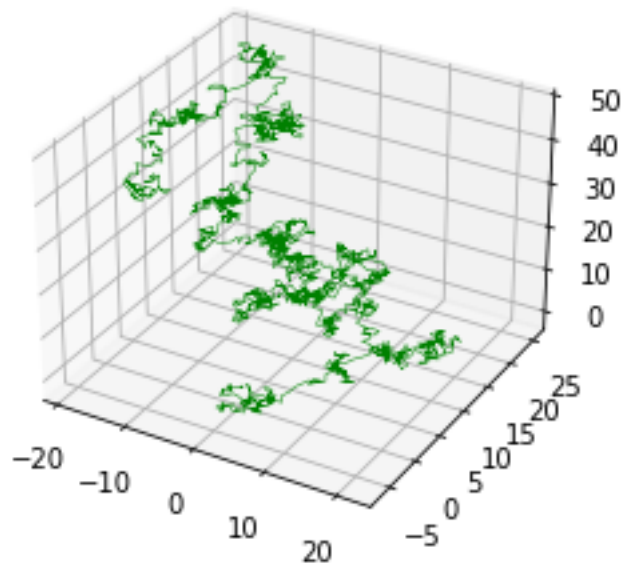


Fig 4. Camino aleatorio del fotón con Radio=50

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 3179.8333333333335

El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 1.6805432426962015e-17 años

El tiempo de ejecución fue de 0.8608 segundos

Radio=100

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

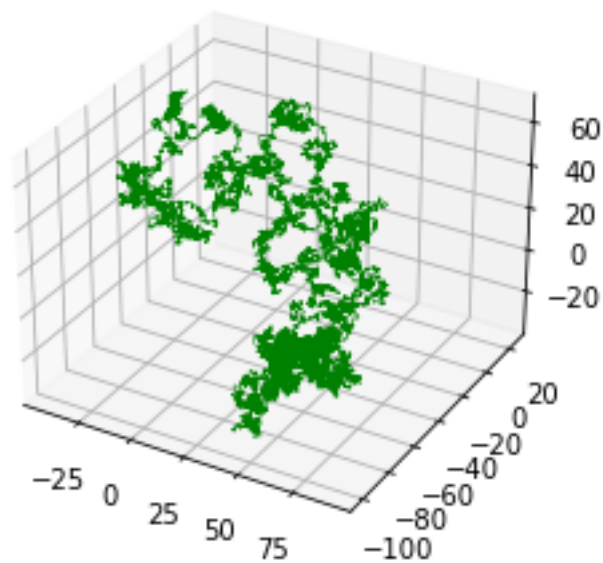


Fig 5. Camino aleatorio del fotón con Radio=100

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 15060.7
El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
7.959586230497456e-17 años

El tiempo de ejecución fue de 3.7528 segundos

Radio=250

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

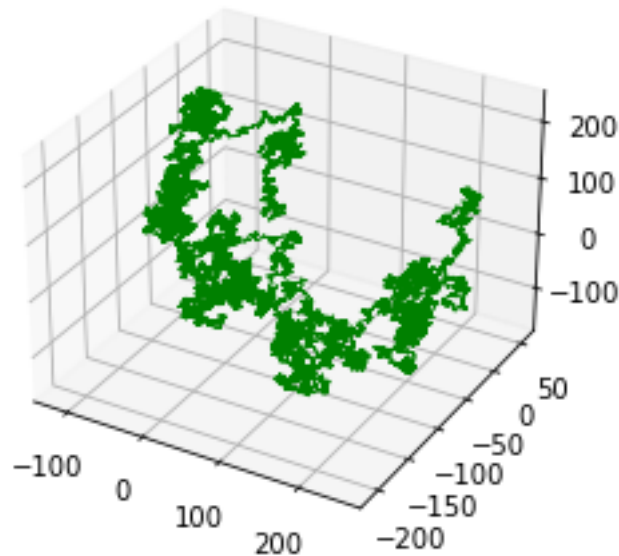


Fig 6 . Camino aleatorio del fotón con Radio=250

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 88568.33333333333
El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
4.680840110070866e-16 años

El tiempo de ejecución fue de 21.7437 segundos

Radio=500

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

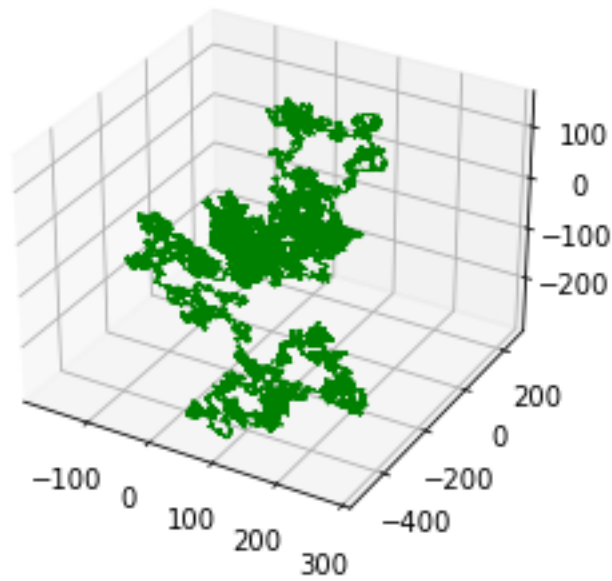


Fig 7. Camino aleatorio del fotón con Radio=500

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 299874.8
El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
1.5848395685229398e-15 años
El tiempo de ejecución fue de 73.1493 segundos

Radio=750

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

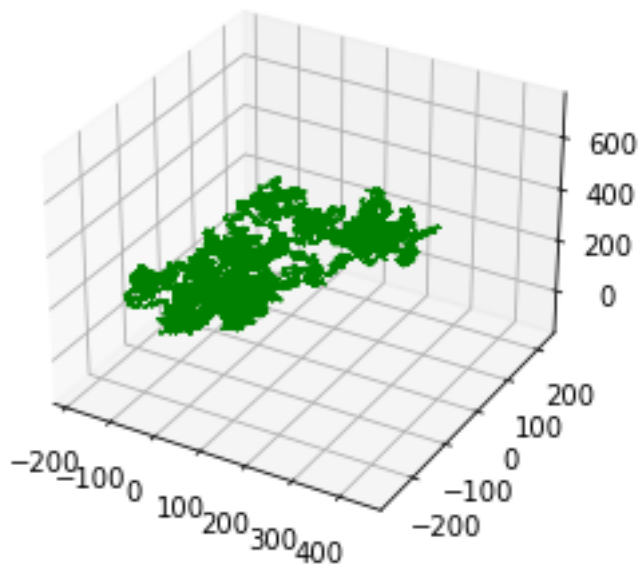


Fig 8. Camino aleatorio del fotón con Radio=750

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 820662.9666666667

El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
4.337207201185424e-15 años
El tiempo de ejecución fue de 200.0715 segundos

Radio=1000

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

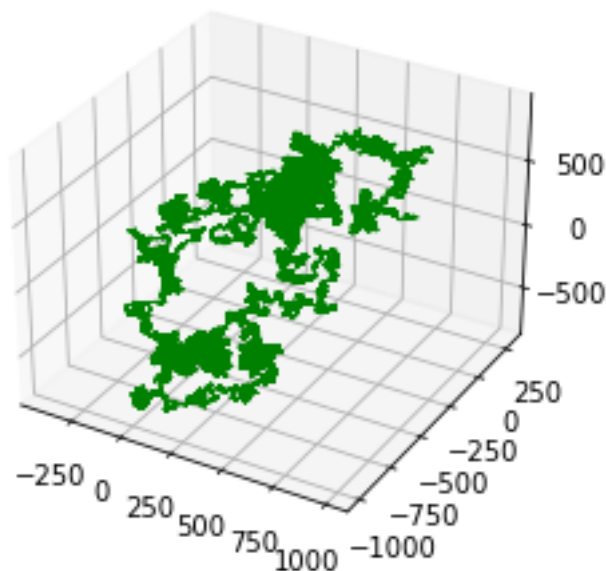


Fig 9. Camino aleatorio del fotón con Radio=1000

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
1407064.6666666667

El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
7.436342630959282e-15 años

El tiempo de ejecución fue de 343.8076 segundos

Radio=1500

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

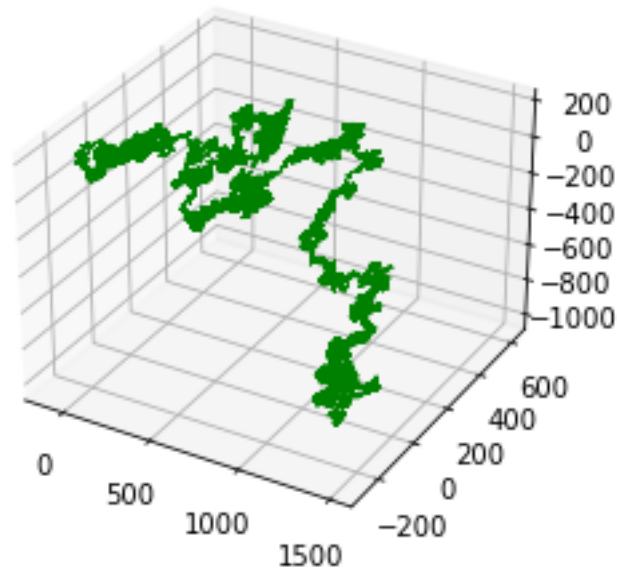


Fig 10. Camino aleatorio del fotón con Radio=1500

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
2767493.8666666667

El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
1.4626216625528794e-14 años

El tiempo de ejecución fue de 676.1957 segundos

Radio=2500

Número de corridas=30

Camino aleatorio del fotón

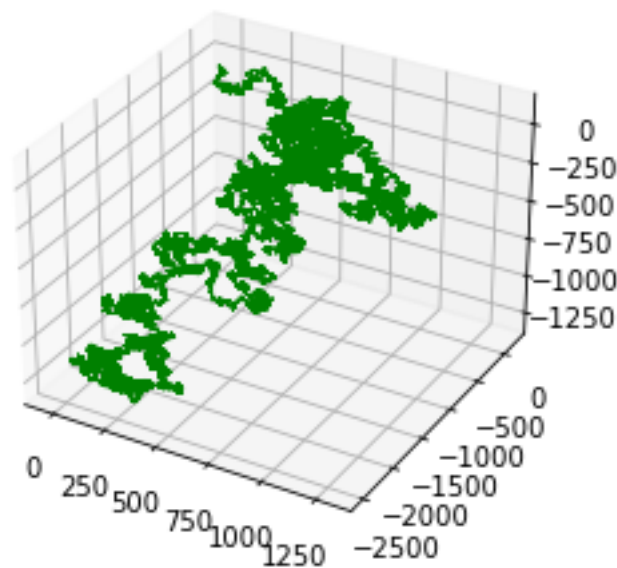


Fig 11. Camino aleatorio del fotón con Radio=2500

Los pasos en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de: 8492467.466666667
 El tiempo en promedio con: 30 corridas arbitrarias, es un total de:
 4.488272596836941e-14 años
 El tiempo de ejecución fue de 2072.8701 segundos

Tabla 1. Resumen de los datos para diferentes corridas de la simulación con valores diferentes de radio

Radios	Tiempo de ejecución	Tiempo del fotón	Número de pasos promediados con 30 corridas
1	0.075	1.29E-20	2.433333333
5	0.0821	2.17E-19	41
10	0.1166	9.39E-19	177.6666667
50	0.8608	1.68E-17	3179.833333
100	3.7528	7.96E-17	15060.7
250	21.7437	4.68E-16	88568.33333
500	73.1493	1.58E-15	299874.8
750	200.0715	4.34E-15	820662.9667
1000	343.8076	7.44E-15	1407064.667
1500	676.1957	1.46E-14	2767493.867
2500	2072.8701	4.49E-14	8492467.467

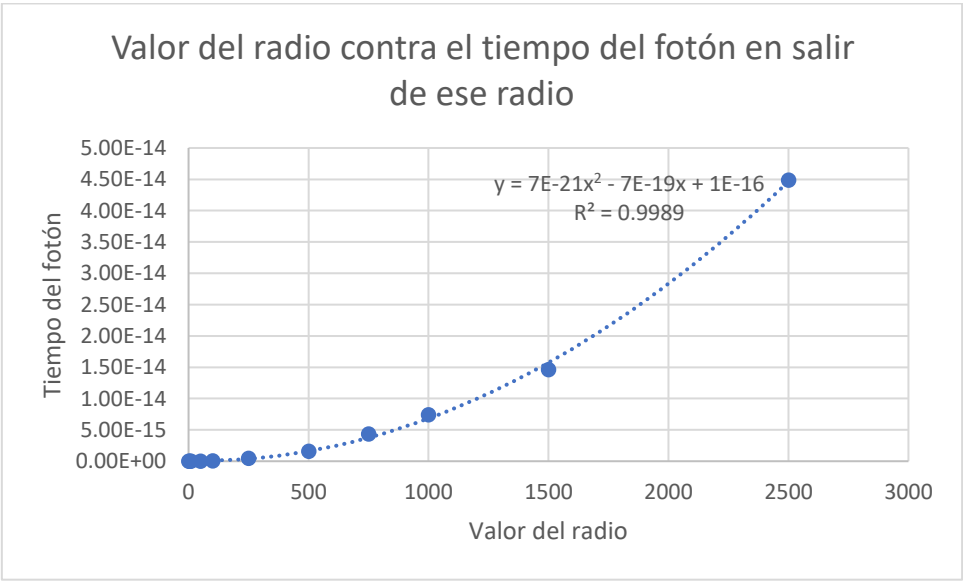


Fig 12. Gráfico de los valores de radio probados en la simulación contra el tiempo de recorrido del fotón

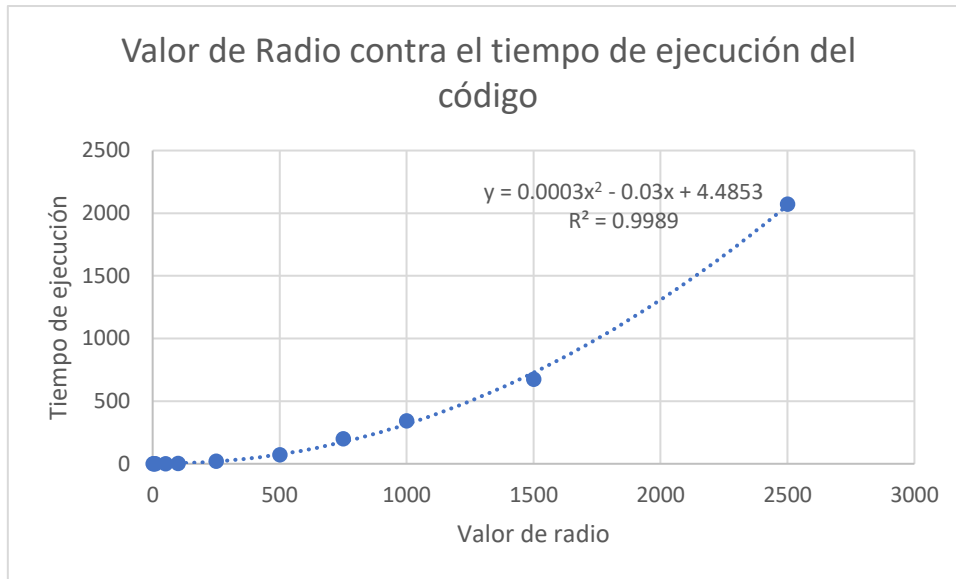


Fig 13. Gráfico de los valores de radio probados en la simulación contra el tiempo de ejecución de la misma

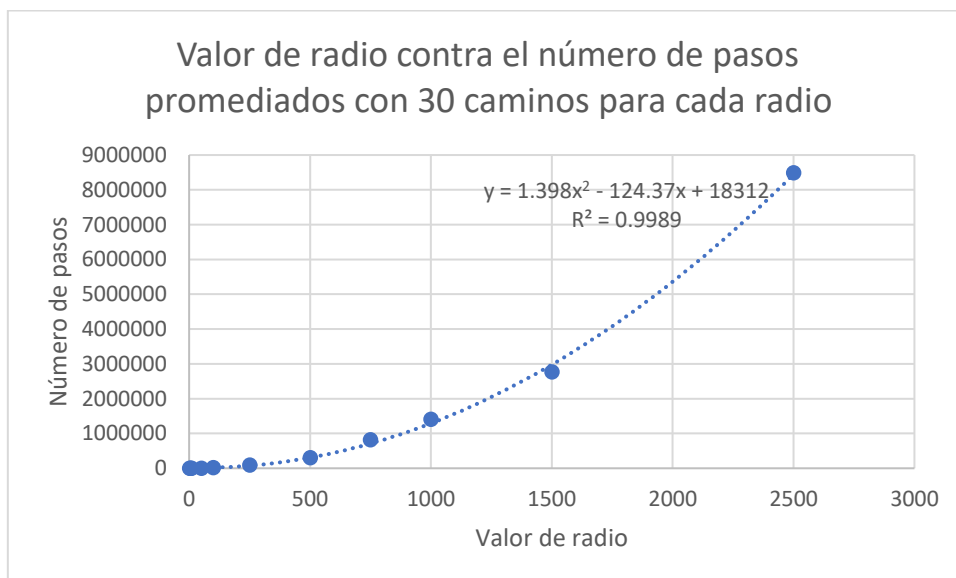


Fig 14. Gráfico de los valores de radio probados en la simulación la cantidad de pasos del camino estocástico promediado con 30 corridas para cada radio

b) Si usamos la fórmula de la raíz cuadrada media:

$$R_{rms} = \sqrt{N} r_{rms}$$

Implica que:

$$\left(\frac{5 * 10^8}{5 * 10^{-5}} \right)^2 = N$$

$$\rightarrow 1 * 10^{26} = N$$

Esto implica que la cantidad de pasos que va a deber de dar el fotón para poder salir de la zona de estudio va a ser de $1 * 10^{26}$ en el mejor de los casos.

c)

La simulación no se pudo completar, pues se llenó la memoria, la máquina no pudo ejecutar de forma completa la simulación, para probar esto se midió el tiempo que duró la simulación con radios más pequeños, estos datos se ven en la Tabla 1.

Además, se graficaron, cómo se ve en la Fig 13, esto con el objetivo de obtener una recta de mejor ajuste y así estimar cuanto duraría la computadora con el radio deseado, si sustituimos $5 \cdot 10^{**8}$ en la ecuación de mejor ajuste mostrada en la Fig 13, podemos ver que daría un tiempo de $7.50 \cdot 10^{**13}$, esto en años sería aproximadamente 2333483 años, lo cual vemos a simple vista que es imposible de completar.

Es importante señalar las características de la máquina, pues con otras características la velocidad de ejecución variaría, los datos se obtuvieron con una memoria RAM de 16 GB y un procesador AMD Ryzen 5 5600X 6-CORE PROCESSOR, además que se corrió hasta con 2500 pasos pues con este valor ya tomó un tiempo de ejecución significativo y pasos más grandes llenaban la memoria RAM.

Debido a lo anterior se intentará aproximar los pasos que requerirá el fotón para completar el camino estocástico, para ello se corrió la simulación con valores de radio más pequeño que la función, estos datos se observan en la Tabla 1, para poder obtener una recta de mejor ajuste que aproxime el valor de interés, la cual se aprecia en la Fig 14. Usando la recta de mejor ajuste de la Fig 14 con un valor de radio de $5 \cdot 10^{**8}$ obtenemos una cantidad de pasos de $3.5 \cdot 10^{**17}$, lo cual vemos que al comparar lo con el valor obtenido de la fórmula de la raíz cuadrada media, se observa que hay una diferencia significativa, donde la simulación da muchos menos pasos para alcanzar el objetivo, sin embargo, se debe tener en cuenta que el dato de la simulación en realidad se está obteniendo cómo una estimación a partir de valores de radios mucho más pequeños y que al ser el camino estocástico entre más largo más aleatoriedad habrá, por lo que el número de pasos se podría elevar mucho más y calzar con el valor producto de la fórmula de la raíz cuadrada media.

d)

Debido que no se pudo completar la simulación para el radio deseado, se calculó el tiempo del recorrido para radios pequeños, datos que se muestran en la Tabla 1, para obtener una recta de mejor ajuste y calcular un tiempo aproximado que duraría en el recorrido, importante decir que estos valores sí están en años, por ende al sustituir el radio deseado, se obtiene el valor buscado de manera directa, al sustituir $5 \cdot 10^{**8}$ en la recta de mejor ajuste que se muestra en la Fig 12 se obtiene un tiempo de $1.75 \cdot 10^{**3}$ años.

e)

A pesar de que no se pudo calcular la trayectoria completa, se calcularon las trayectorias de los radios de menor distancia, que se pueden ver en las figuras desde la 1 hasta la 11

d)

La trayectoria no pareciera ser un fractal, pues no se observa de forma concreta que el fotón mantenga una trayectoria con un patrón el cuál se repita, si no que se

observa completamente estocástica, esto se puede ver más específicamente con los valores de radios pequeños, pues ahí vemos las diferentes escalas y cómo al acercarse o alejar la escala, la estructura no se mantiene, además que esto es difícil de concluir con solo observar la trayectoria, pues es una trayectoria muy poblada en la cual al humano le cuesta identificar patrones y al ser de esta manera tan brusca se complica más.

Simulación de Metrópolis-Monte Carlo

Pseudocódigo

- Crear una función que genere una combinación aleatoria de 1 o -1 que representará el arreglo aleatorio de espines, además se puede generar una combinación de solo unos por fuera simplemente usando `numpy.ones` o bien de -1 multiplicando `numpy.ones` por -1.
- Crear una función que calcule la energía de Ising para una configuración de espines, empleando la fórmula del enunciado, para lo cual se le deberá de dar cómo parámetro el arreglo de espines.
- Crear una función que calcule la magnetización de Ising para una configuración de espines, empleando la fórmula del enunciado, para lo cual se le deberá de dar cómo parámetro el arreglo de espines.
- Crear una función que me modifique el arreglo de espines de forma aleatoria la cantidad de pasos deseada, usando el algoritmo de Metrópolis-Monte Carlo que se estudió en clase, para cada paso agregar a un arreglo la energía de esa configuración, así como la magnetización, pues estos valores se perderán una vez modificada la configuración de espines, se consideran los valores de energía y de magnetización después de los 2000 pasos y se promedian entre la cantidad de pasos que hayan después de esa cantidad, pues en el enunciado se especifica que estos valores se calculan en el equilibrio y se toman después de los 2000 cómo el equilibrio.
- Crear una función que repita la función del paso anterior una determinada cantidad de veces, la energía de cada corrida, así como la magnetización se deberá en almacenar en un arreglo, para después promediarlos con la cantidad de veces que se corrió la simulación y de esta forma eliminar las fluctuaciones estadísticas, aprovechar esta función y los valores de energía por repetición para calcular el U_2 elevando cada energía al cuadrado, almacenándolo en una variable y promediándolo con la cantidad de repeticiones.
- Definir parámetros propios de la simulación como el valor de J e inicializar variables
- Solicitar al usuario la cantidad de pasos, cuidar que sean más de 2000 para garantizar el equilibrio y prevenir errores al introducir valores no permitidos como alguna letra
- Establecer la configuración inicial, solicitando al usuario un número de 1 a 3 donde cada uno significa una configuración específica, además establecer la configuración según lo que el usuario haya ingresado.
- Llamar las funciones pertinentes, crear un gráfico de energía y magnetización para una iteración que permita ver el comportamiento de estos parámetros.
- Establecer la cantidad de repeticiones para eliminar fluctuaciones que se desean hacer.

- Correr la simulación anterior, pero ahora variando el KbT , esto por medio de un ciclo almacenando cada variable en un arreglo que permita realizar los gráficos de cada una de las variables.
- Calcular las soluciones analíticas de los parámetros para posteriormente poder graficarlos y comparar con las soluciones numéricas

Código generado

<https://github.com/ever2706/FCI-Tarea5.git>

Análisis de resultados

Modelo configuración inicial todos espines hacia arriba, valor 1, con 5000 pasos y 50 repeticiones para eliminar fluctuación, con KbT inicial de 0.1 aumentando 0.1

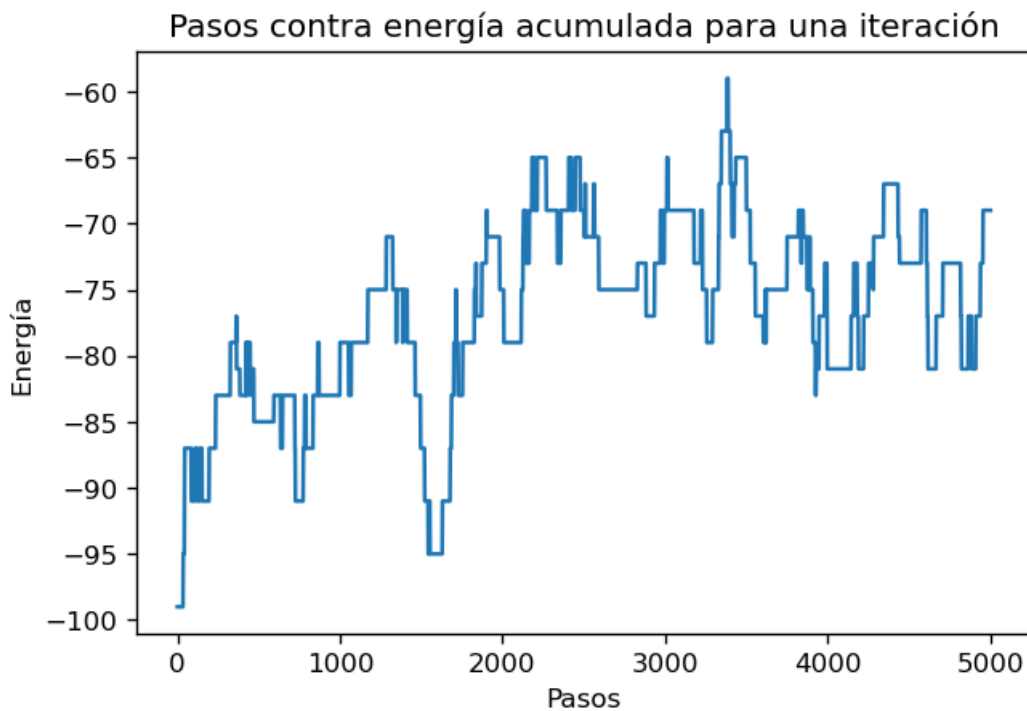


Fig 15. Pasos contra la energía de cada configuración para una iteración, configuración inicial todos hacia arriba

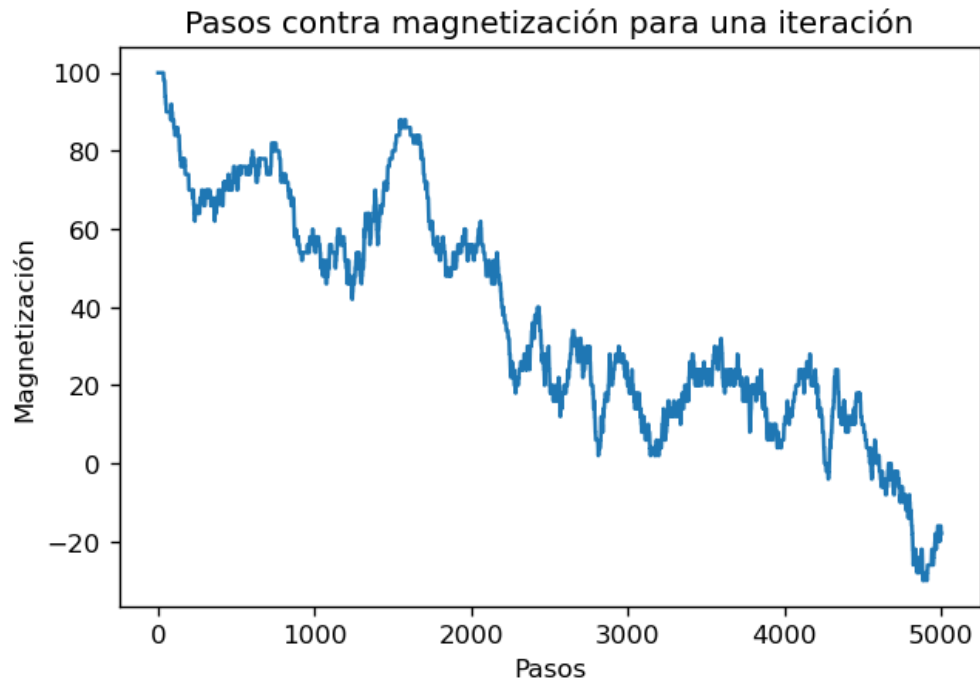


Fig 16. Pasos contra la magnetización de cada configuración para una iteración, configuración inicial todos hacia arriba

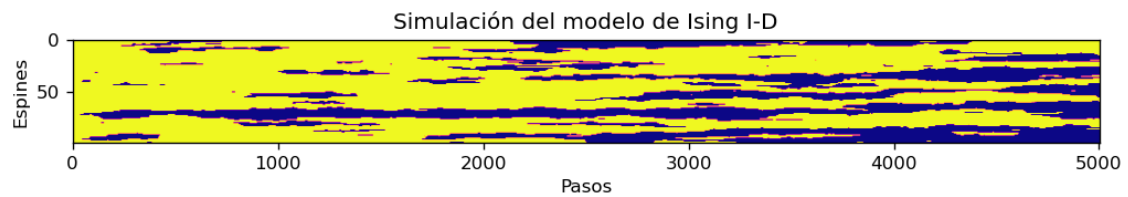


Fig 17. Pasos contra el estado del espín, configuración inicial todos hacia arriba

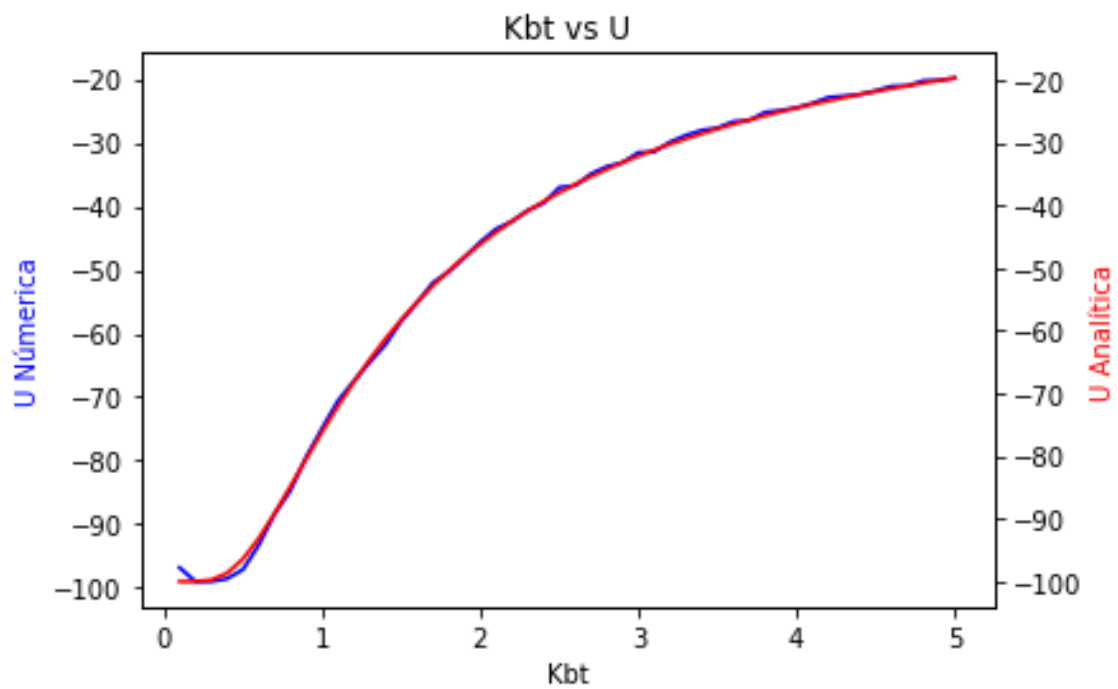


Fig 18. Valores de KbT contra la energía interna U , solución analítica y numérica, configuración inicial todos hacia arriba

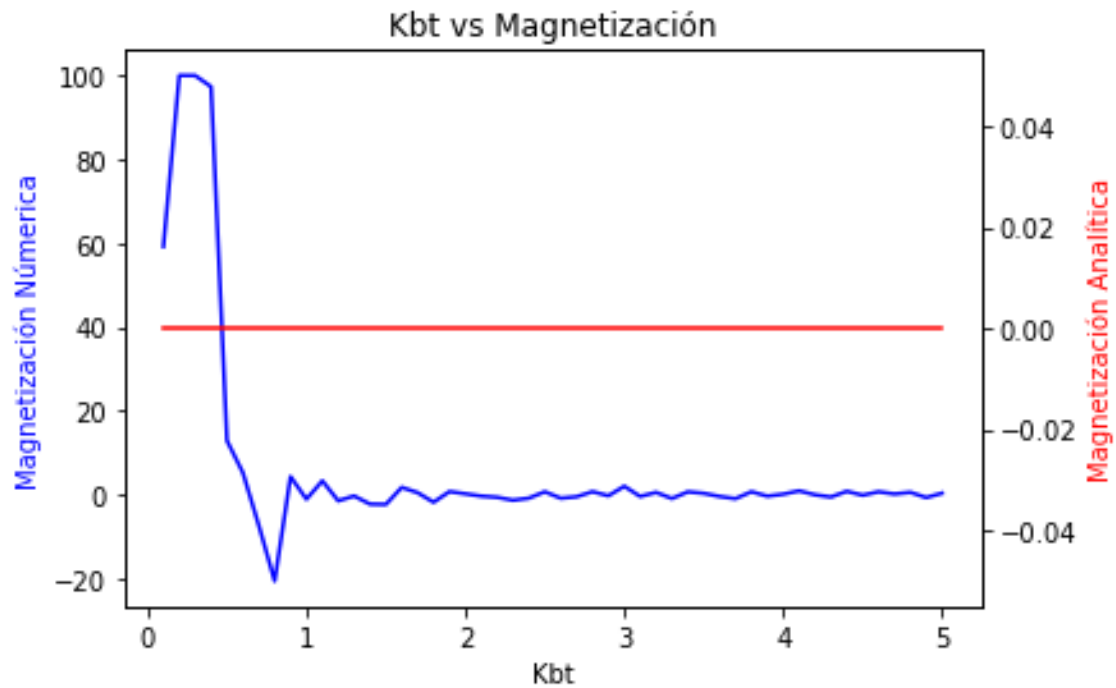


Fig 19. Valores de KbT contra la magnetización, solución analítica y numérica, configuración inicial todos hacia arriba

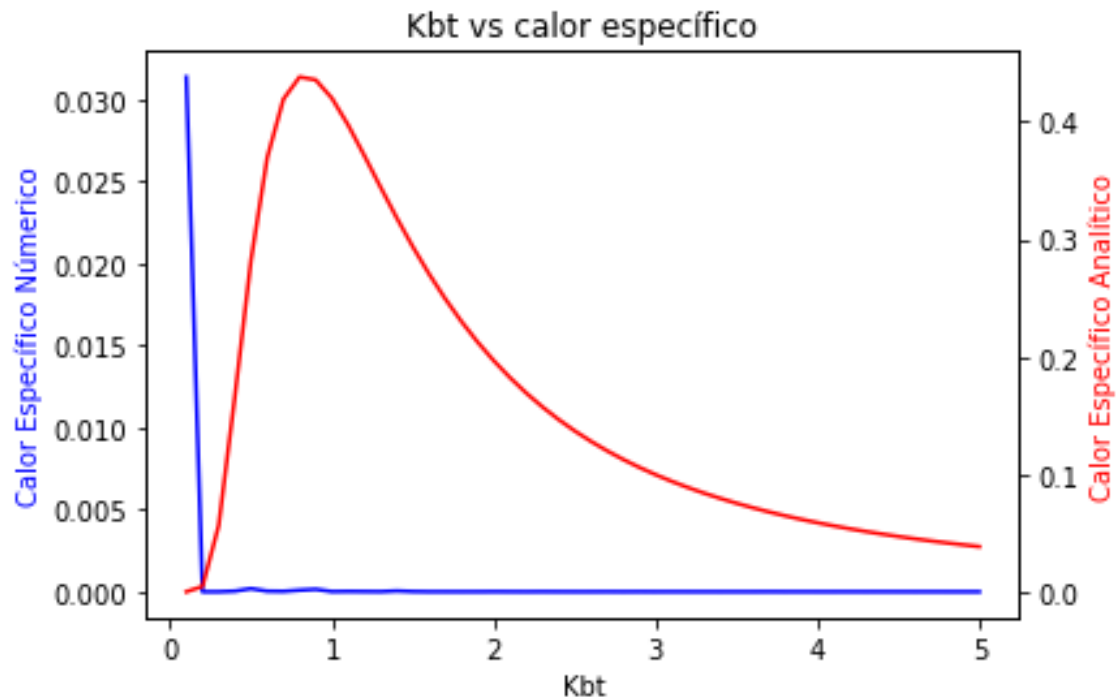


Fig 20. Valores de KbT contra el Calor específico, solución analítica y numérica, configuración inicial todos hacia arriba

Energía en equilibrio: -73.04931689436854

Magnetización en equilibrio: 16.00199933355548

El promedio de las energías después de: 50 repeticiones, es: -74.83101561586396
El promedio de las magnetizaciones después de: 50 repeticiones es:
3.316004162920141

Modelo configuración inicial todos espines hacia abajo, valor -1, con 5000 pasos y 50 repeticiones para eliminar fluctuación, con KbT inicial de 0.1 aumentando 0.1

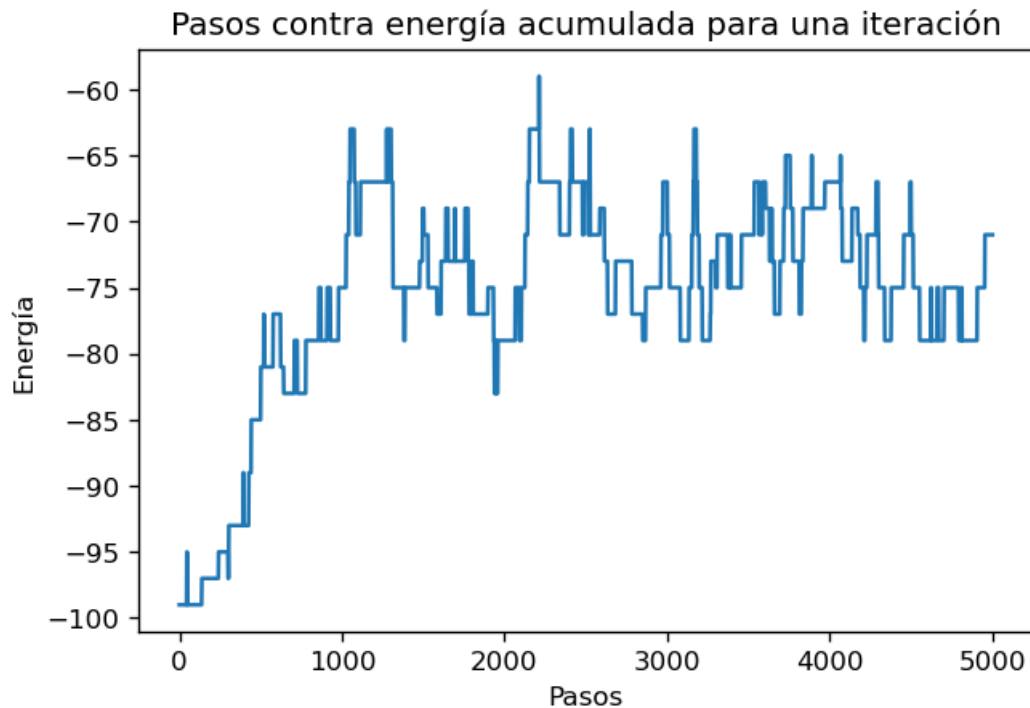


Fig 21. Pasos contra la energía de cada configuración para una iteración, configuración inicial todos hacia abajo

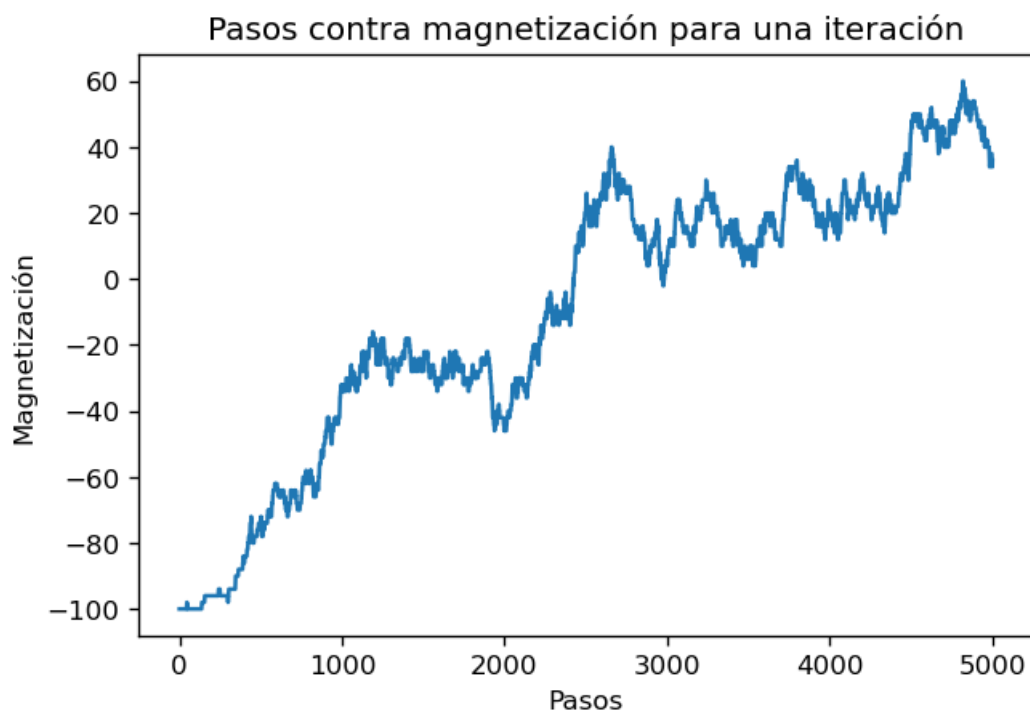


Fig 22. Pasos contra la magnetización de cada configuración para una iteración, configuración inicial todos hacia abajo

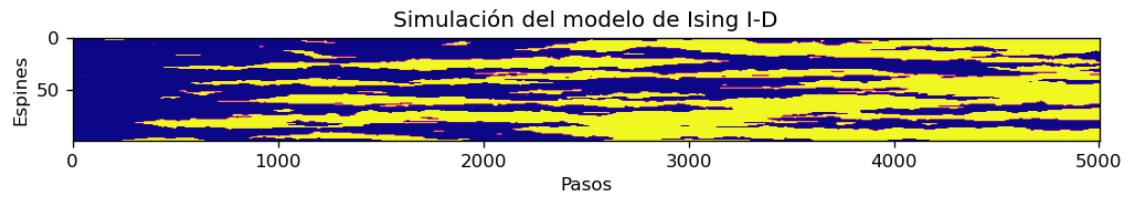


Fig 23. Pasos contra el estado del espín, configuración inicial todos hacia abajo

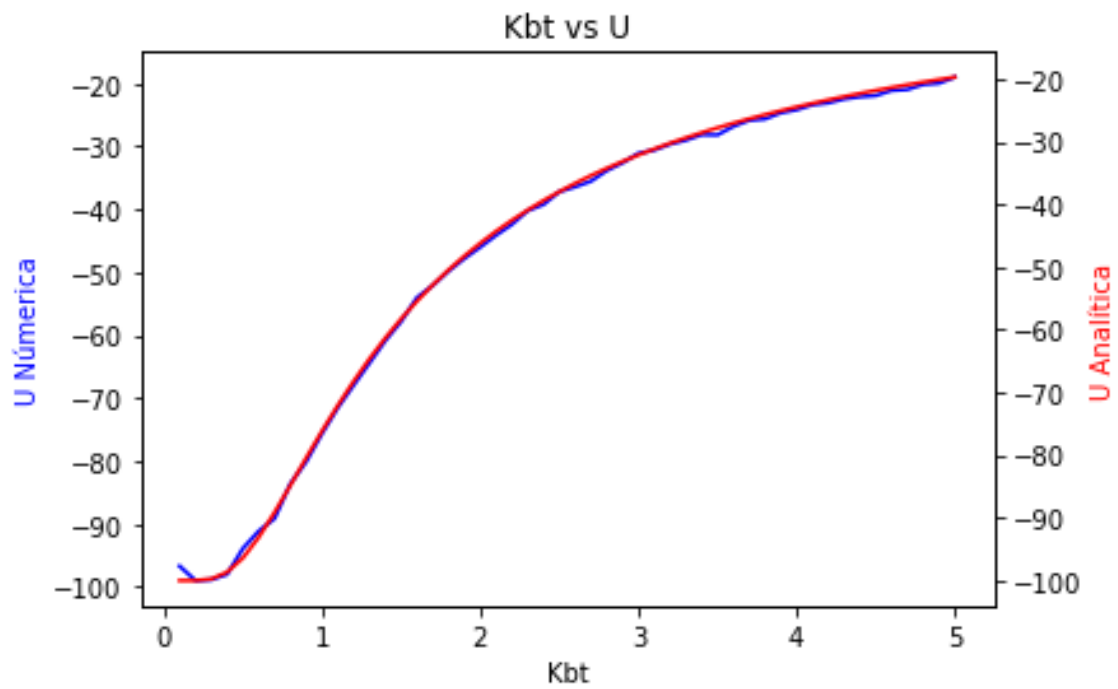


Fig 24. Valores de KbT contra la energía interna U, solución analítica y numérica, configuración inicial todos hacia abajo

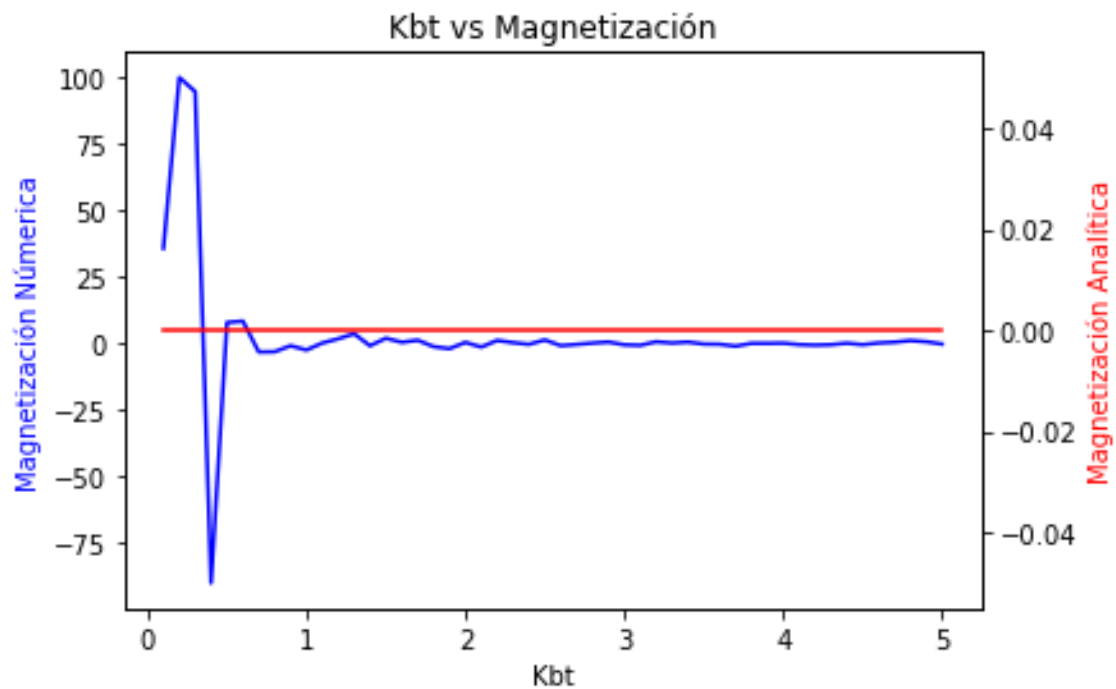


Fig 25. Valores de KbT contra la magnetización, solución analítica y numérica, configuración inicial todos hacia abajo

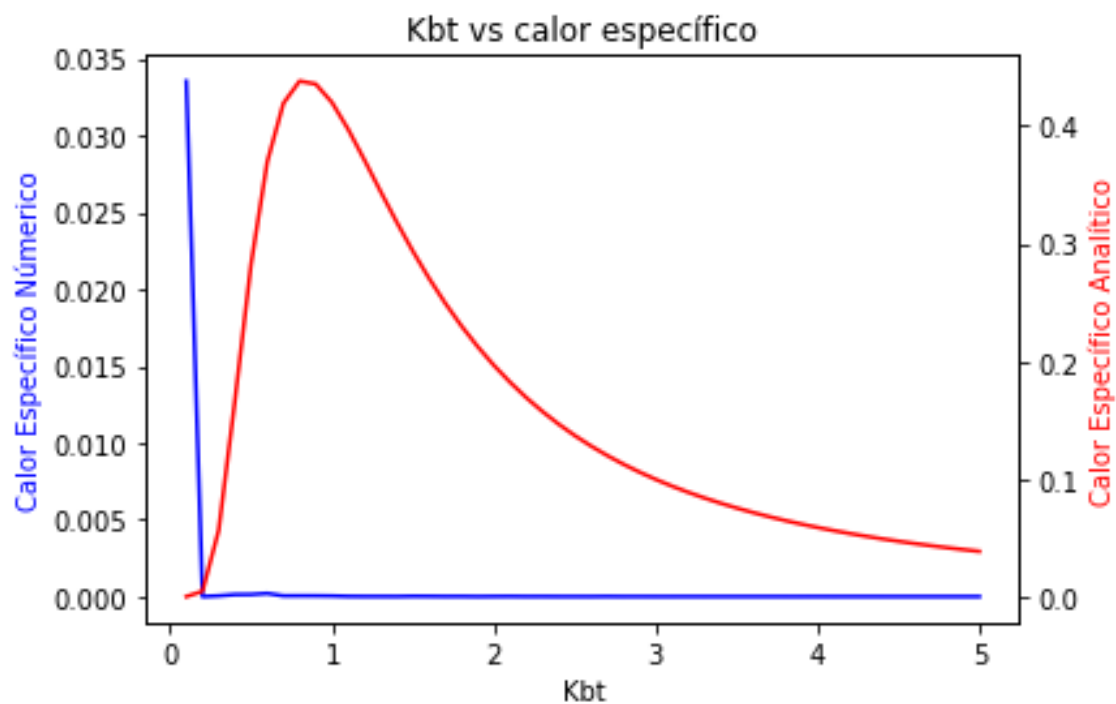


Fig 26. Valores de KbT contra el Calor específico, solución analítica y numérica, configuración inicial todos hacia abajo

Energía en equilibrio : -72.68143952015994

Magnetización en equilibrio: 18.221259580139954

El promedio de las energías después de: 50 repeticiones, es: -75.37022755821953

El promedio de las magnetizaciones después de: 50 repeticiones es: -5.480869288184809

Modelo configuración inicial todos aleatorios, con 5000 pasos y 50 repeticiones para eliminar fluctuación, con K_BT inicial de 0.1 aumentando 0.1

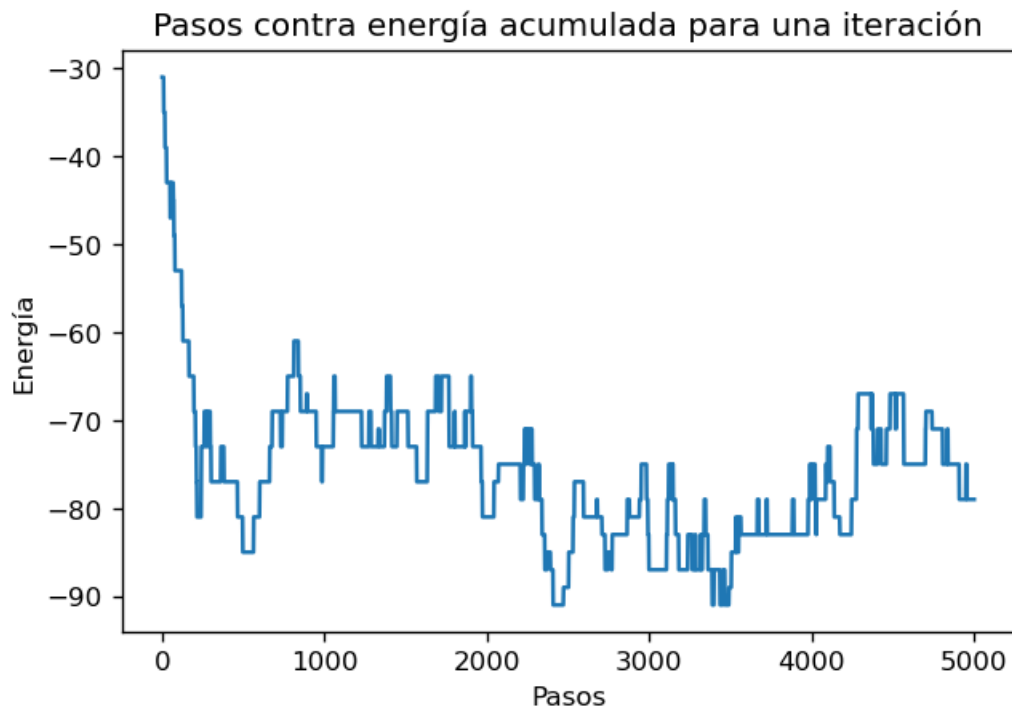


Fig 27. Pasos contra la energía de cada configuración para una iteración, configuración inicial todos aleatorios

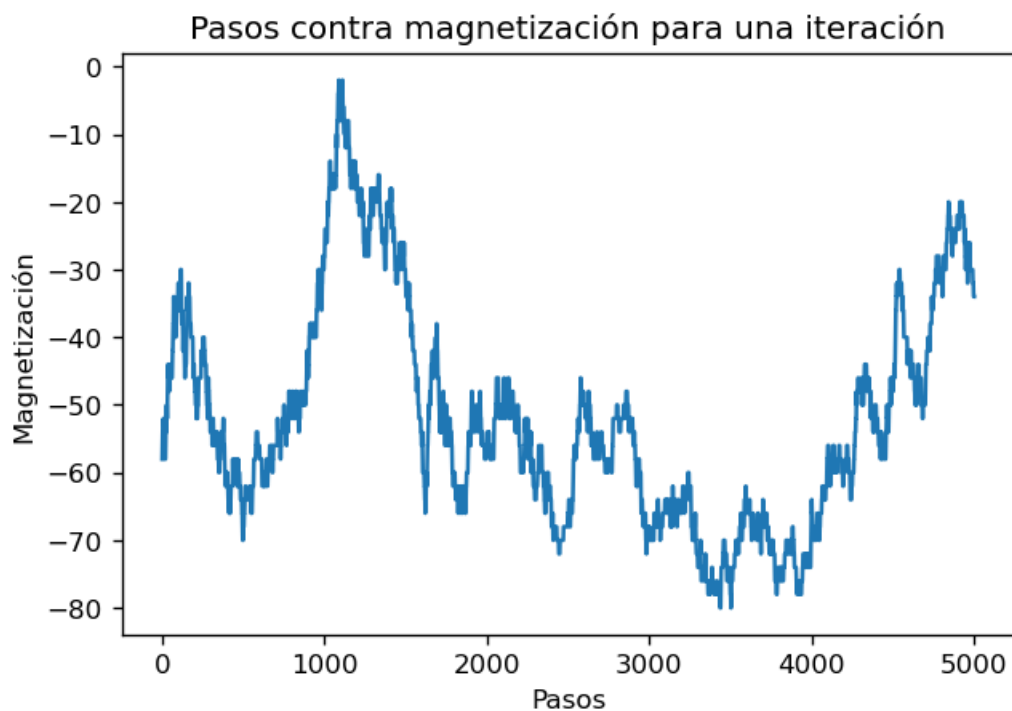


Fig 28. Pasos contra la magnetización de cada configuración para una iteración, configuración inicial todos aleatorios

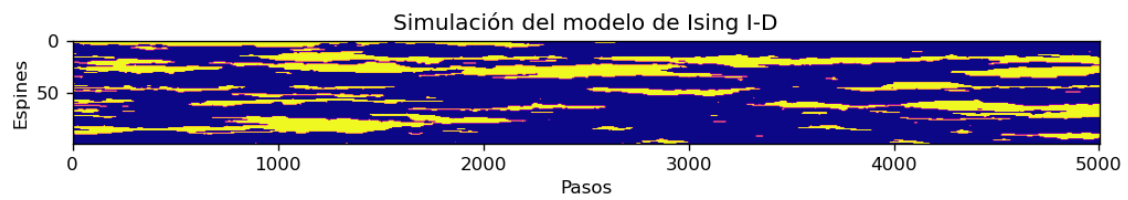


Fig 29. Pasos contra el estado del espín, configuración inicial todos aleatorios

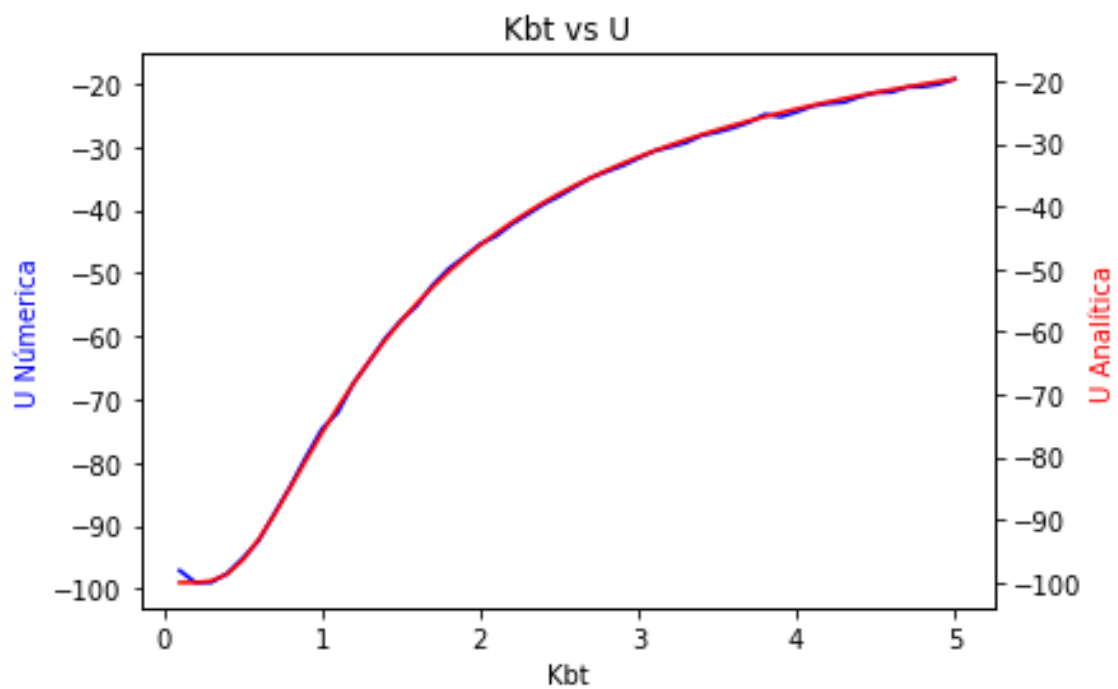


Fig 30. Valores de KbT contra la energía interna U, solución analítica y numérica, configuración inicial todos aleatorios

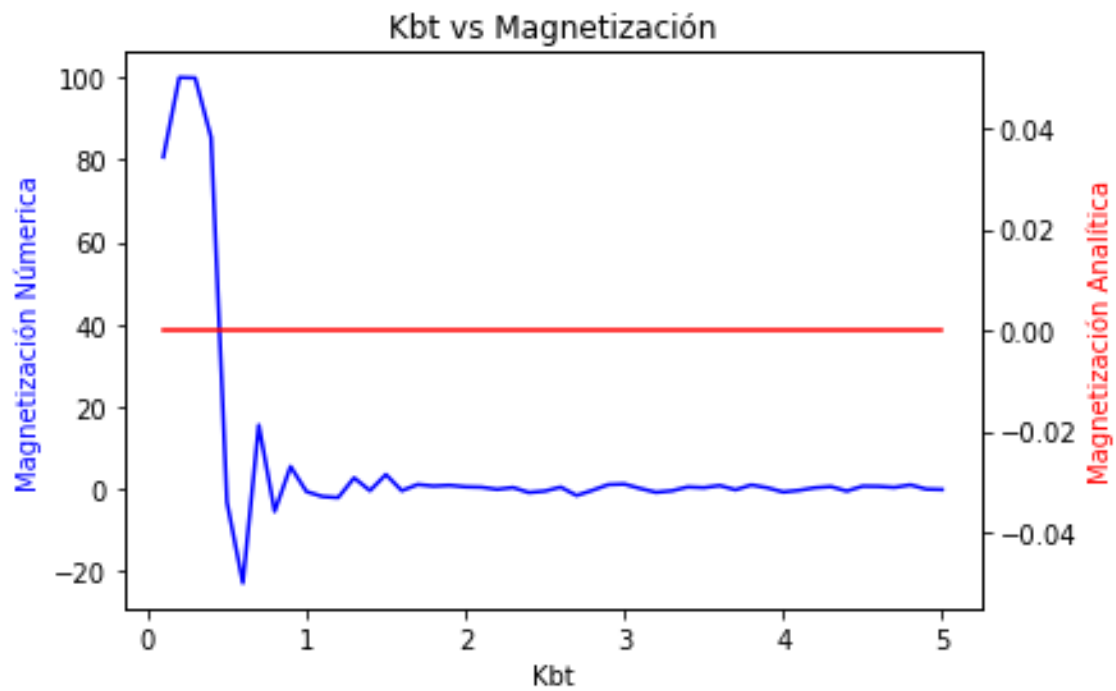


Fig 31. Valores de KbT contra la magnetización, solución analítica y numérica, configuración inicial todos aleatorios

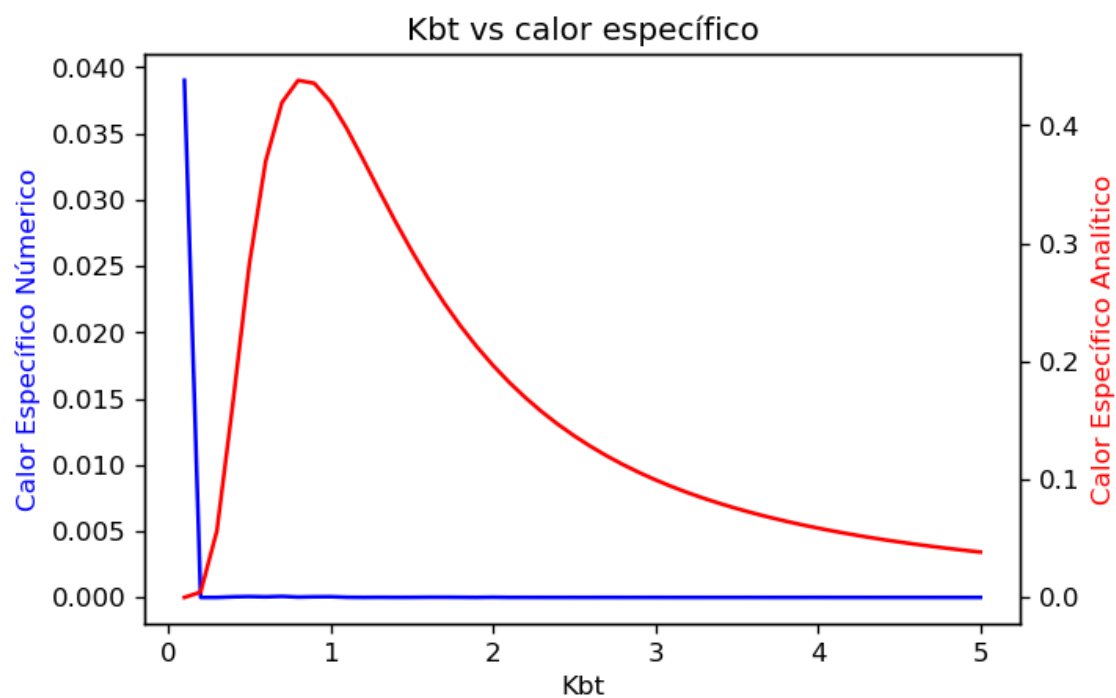


Fig 32. Valores de KbT contra el Calor específico, solución analítica y numérica, configuración inicial todos aleatorios

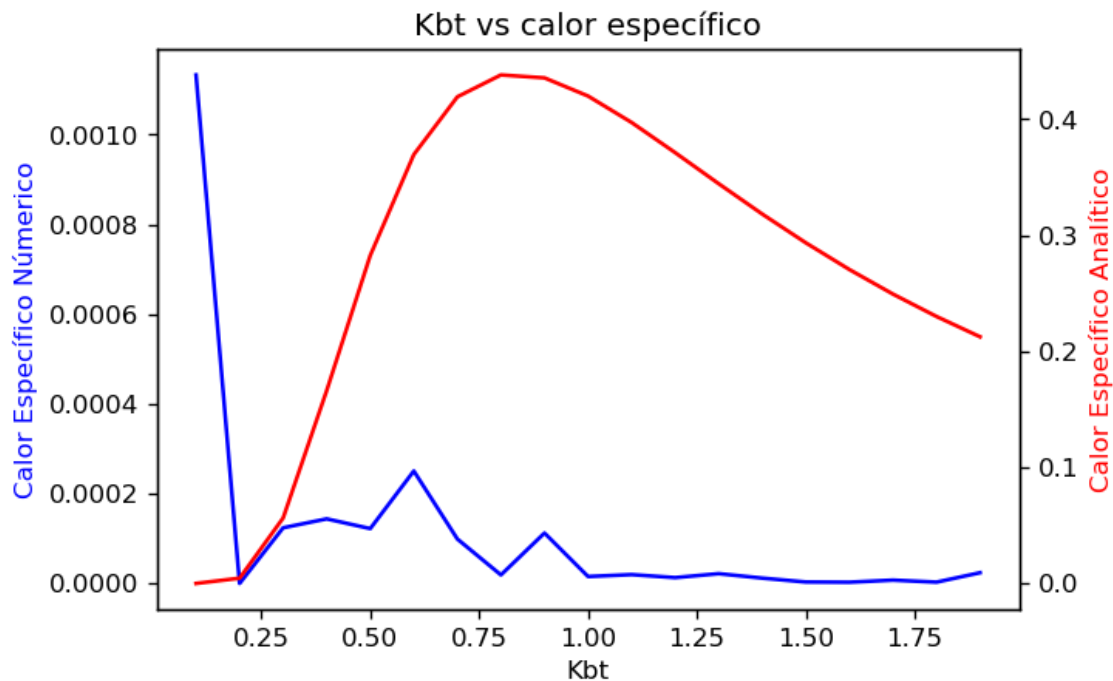


Fig 33. Valores de KbT de 0 a 2 contra el Calor específico, solución analítica y numérica, configuración inicial todos aleatorios

Energía en equilibrio: -79.76241252915695

Magnetización en equilibrio: -57.75474841719427

El promedio de las energías después de: 50 repeticiones, es: -74.37267801600954

El promedio de las magnetizaciones después de: 50 repeticiones es:
3.728423945837087

b) y c)

En cada uno de los apartados se muestran los valores de energía y magnetización en el equilibrio para una iteración y cómo este valor se corrigió de forma significativa al iterar 50 veces y promediar.

Para la configuración todos hacia arriba se obtuvo: Energía en equilibrio : -73.04931689436854 y Magnetización en equilibrio: 16.00, por otro lado el promedio de las energías después de 50 repeticiones es -74.83 y el promedio de las magnetizaciones después de 50 repeticiones es 3.31; mientras que para la configuración todos abajo se obtuvo Energía en equilibrio -72.68 y Magnetización en equilibrio: 18.22, mientras que el promedio de las energías después de 50 repeticiones es -75.37 y el promedio de las magnetizaciones después de 50 repeticiones es -5.48 y para la configuración aleatoria se obtuvo energía en equilibrio -79.76 y magnetización en equilibrio -57.75, por otro lado el promedio de las energías después de 50 repeticiones es -74.37 y el promedio de las magnetizaciones después de 50 repeticiones es 3.72

En general se puede observar que los valores obtienen una significativa corrección al correrlos y promediarlos.

Importante he de señalar que el equilibrio se toma a partir de los 2000 pasos cómo se indica tomar en el [Landau, 2011]. Esto también se puede ver en la Fig 27 en la cuál se observa cómo de manera segura después del paso 2000 la energía está fluctuando sobre un valor.

e)

La Fig 18 representa la energía interna para la configuración inicial todos arriba, la Fig 24 representa la energía interna para la configuración inicial todos hacia abajo, la Fig 30 representa la energía interna para la configuración inicial todos aleatorias, en todas las circunstancias se ve que la energía interna obtiene una forma creciente y se adapta de forma perfecta a la solución analítica presentada en [Landau, 2011].

f)

La Fig 19 representa la magnetización para la configuración inicial todos arriba, la Fig 25 representa la magnetización para la configuración inicial todos hacia abajo, la Fig 31 representa la magnetización para la configuración inicial todos aleatorias. En todos los gráficos se observa cómo la solución numérica va tendiendo al valor analítico que es cero, de hecho, empieza a oscilar sobre este valor y con forme los pasos aumentan la función se atenúa más y tiende cada vez más a cero.

g)

La Fig 20 representa el calor específico para la configuración inicial todos arriba, la Fig 26 representa el calor específico para la configuración inicial todos hacia abajo, la Fig 32 representa el calor específico para la configuración inicial todos aleatorias. En todos los gráficos se observa cómo a primera instancia la solución numérica tiene una forma que no se acopla de forma suficientemente exacta a la solución analítica, sin embargo, si vemos la Fig 33, la cual contempla solamente KbT de 0 a 2, se tiene un mayor detalle de la forma de la gráfica y en ella se puede ver cómo la solución si tiene una ligera forma a la solución analítica, así que se puede deber la diferencia a una interpretación de la escala.

Referencias

[Landau, 2011] Landau, R. H., P. J. . B. C. (2011). A Survey of Computational Physics: Introductory Computational Science. Princeton University Press, Princeton.