

## Desarrollo Experimental II

### Semestre 2017-1

#### Implementación del Algoritmo de Montecarlo

Este algoritmo nos permite construir configuraciones del sistema basado en criterios energéticos. Concretamente, nos permitirá **aceptar o rechazar** movimientos de partículas tomando en consideración el comportamiento del cambio de la **energía potencial** de cada partícula.

En la siguiente figura se ilustran dos configuraciones consecutivas y el movimiento de la  $i$ -ésima partícula:

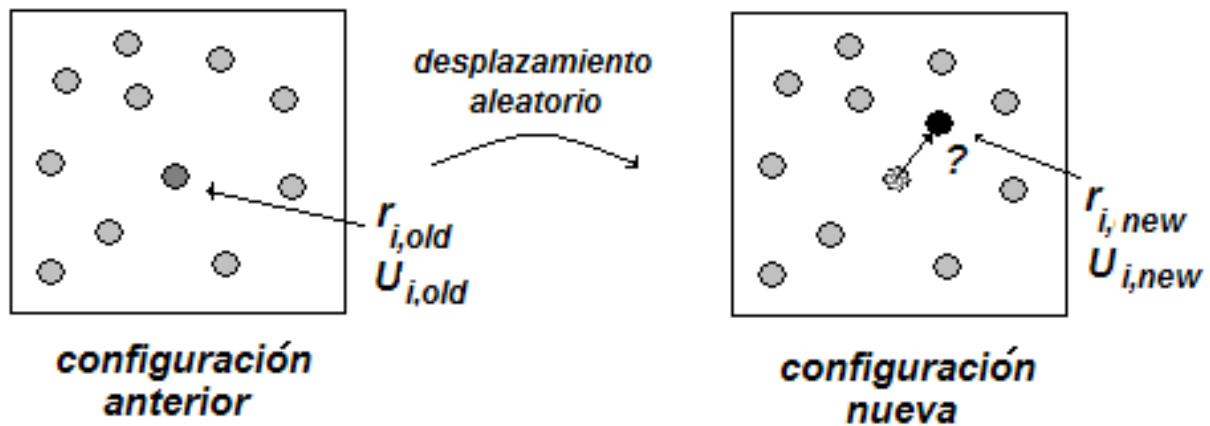


Figura 1. Configuraciones para Algoritmo de MC.

- Se calcula la energía de la  $i$ -ésima partícula  $U_{i,old}$  en la “configuración anterior” en la que se encuentra (figura 1, izquierda).
- Se propone un desplazamiento aleatorio tentativo  $\Delta \vec{r}_{ale}$  de la  $i$ -ésima partícula a partir de la posición  $\vec{r}_{i,old}$  que tenía en la configuración anterior, de forma tal que su posición tentativa nueva  $\vec{r}_{i,new}$  se puede expresar como:

$$\vec{r}_{i,new} = \vec{r}_{i,old} + \Delta \vec{r}_{ale}$$

- Se calcula la energía  $U_{i,new}$  que tendría la  $i$ -ésima partícula con este movimiento tentativo que la colocaría en una posible posición de la “configuración nueva” (figura 1, derecha).
- **Criterio de Aceptación o Rechazo:** Para decidir si esta posición tentativa  $\vec{r}_{i,new}$  de la  $i$ -ésima partícula se *acepta o rechaza*, procedemos a evaluar el cambio de la energía potencial resultante:

$$\Delta U_i = U_{i,new} - U_{i,old}$$

- Posibilidades y decisiones:

$$Si... \begin{cases} \Delta U_i < 0 & \rightarrow \text{Aceptar} \rightarrow \vec{r}_{i,new} \\ 0 \leq \Delta U_i \leq \xi & \rightarrow ? \\ \Delta U_i > \xi & \rightarrow \text{Rechazar} \rightarrow \vec{r}_{i,old} \end{cases}$$

donde  $\xi$  es una constante positiva suficientemente grande (Ej.: 75) .

- Para decidir si se acepta o rechaza la nueva posición de la  $i$ -ésima partícula en el caso  $0 \leq \Delta U_i \leq \xi$ , procedamos a evaluar el factor de Boltzmann (ensemble canónico):

$$f_i \equiv e^{-\Delta U_i}$$

y a calcular un número aleatorio  $\alpha$  en el intervalo  $[0,1]$ :

$$Si... \begin{cases} f_i \geq \alpha & \rightarrow \text{Aceptar} \rightarrow \vec{r}_{i,new} \\ f_i < \alpha & \rightarrow \text{Rechazar} \rightarrow \vec{r}_{i,old} \end{cases}$$

- Observemos que el criterio anterior permite aceptar movimientos en los que la energía potencial de la partícula no disminuya, siempre y cuando el incremento sea suficientemente pequeño, tomando como referencia un número aleatorio, como se ilustra en la figura 2. Es decir, esta parte del criterio de Montecarlo permite dar cabida a las fluctuaciones de la energía potencial del sistema.

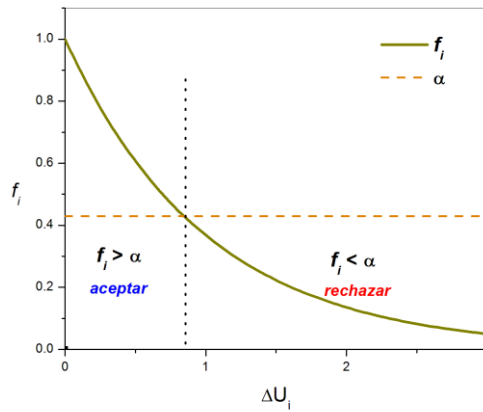


Figura 2. Criterio de aceptación o rechazo para  $0 \leq \Delta U_i \leq \xi$

- En la figura 3, ilustramos esquemáticamente la síntesis del criterio de aceptación y rechazo del algoritmo de Montecarlo:

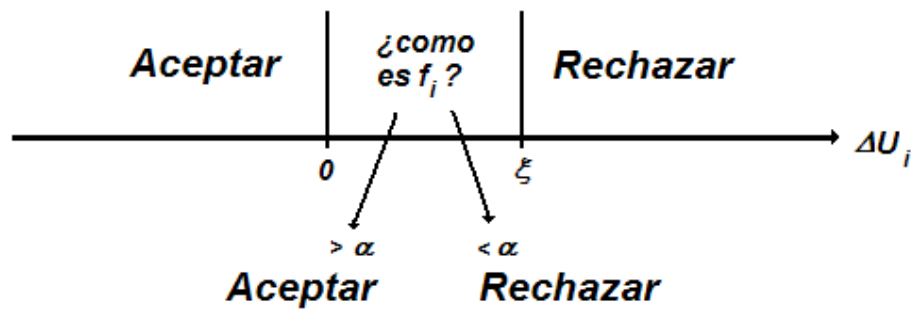


Figura 2. Esquema Aceptación y Rechazo MC.

Es importante señalar que es posible generar configuraciones nuevas moviendo una partícula, un grupo de partículas o a las  $N$  partículas de la simulación. En nuestro caso, diremos que hemos obtenido una configuración “nueva”, luego de *intentar* el movimiento de las  $N$  partículas. Algunas de las partículas quedarán en posiciones nuevas, luego de que el movimiento tentativo es aceptado con el criterio del algoritmo de Monte Carlo; sin embargo, otras quedarán en las posiciones previas a sus movimientos tentativos, por haber sido rechazados por dicho algoritmo. De ahí el énfasis que hago en las palabras “tentativo”, “aceptado”, “rechazado” e “intentar”.