

Estudio y simulación del principio de Equiprobabilidad para sistema de partículas aislado, utilizando diferentes métodos de muestreo.

Sergio Duque Mejía¹

Instituto de Física, U de A, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

(*Electronic mail: sergio.duquem@udea.edu.co)

(Dated: 13 July 2022)

Se realizara un estudio y simulación del principio de Equiprobabilidad para un sistema de partículas aislado, para esto se busca la probabilidad de obtener configuraciones legales en el sistema, estas corresponden a posiciones dentro de la caja contenedora que no se encuentren por fuera de los limites ni superpuestas sobre otras esferas contenidas. Este estudio se realizara usando dos algoritmos de creación de muestras aleatorias de Monte Carlo (directo y usando cadenas de Markov) y adicionalmente se utiliza un algoritmo de dinámica molecular expuesto por Alder and Wainwright (1957), estos escritos en el lenguaje de programación python 3.8. Finalmente para cada algoritmo se explica si las posiciones asociadas a eventos son igualmente probables.

Keywords: Monte Carlo, muestras aleatorias, cadenas de Markov, dinámica molecular, python3

I. INTRODUCCIÓN:

Al día de hoy, a pesar de contar con grandes experimentos que permiten estudiar sistemas de muchas partículas y obtener conclusiones de estos, los resultados se limitan a describir las propiedades macroscópicas del sistema como lo son el volumen, temperatura y el numero de partículas; pero cuando se desea explorar la dinámica mas primordial del sistema, es decir, la que se puede encontrar en las posiciones y velocidades de las partículas, resulta realmente complicado debido a las miles de interacciones que ocurren para cantidades masivas de partículas que componen el sistema. por esta razón es necesario hacer uso de conceptos estadísticos que permitan realizar estudio de estos sistemas en búsqueda de promedios o probabilidades, de esta forma se puede describir los posibles estados de un conjunto de partículas por medio de sus configuraciones los cuales son fotografías del sistema en un determinado instante de tiempo y se compone de todas las posiciones y momentos de cada partícula especifica en el volumen estudiado y a cierta temperatura. Los conceptos utilizados en física estadística permiten el estudio de cambios de fase, solubilidad de moléculas, viscosidad de líquidos, sugiere aplicaciones en la biología en modelos moleculares, etc.

El concepto de la estadística que se desea abordar en este articulo es el de la *Equiprobabilidad*, el cual indica que todos las posibles configuraciones en un sistema que resulten de alguna interacción, tienen la misma probabilidad de ocurrir. Este concepto se puede demostrar en sistemas que estén definidos bajo una función de distribución de probabilidad uniforme. Por ejemplo en el lanzamiento de un dado, la probabilidad de obtener un numero específico de cada cara es igual al resto de caras si se considera que este no esta alterado de alguna forma (como un dado cargado), para poder observar que las probabilidades son iguales, es necesario realizar N números de eventos (experimentos) de tal forma que cuando N se hace físicamente grande, es decir que es un numero relativamente grande pero finito, se observa que la probabilidad de cada cara es la misma en cada caso.

En el estudio realizado para este articulo, se explora este concepto de equiprobabilidad (ver resultados) para un sistema de partículas aislado, para esto es necesario construir las diferentes configuraciones que permite evolucionar el sistema, de tal manera que busca determinar que dichas configuraciones sean igualmente probables. Se utilizaron tres modelos de muestreo utilizando técnicas de Monte Carlo los cuales son: Muestreo directo, muestreo utilizando cadenas de Markov y muestreo utilizando dinámica molecular por eventos. Se obtuvo que la probabilidad de que se construya una configuración legal o aceptada con base en las condiciones impuestas por los algoritmos es de 0.01%, Adicionalmente se obtuvo una mejor aproximación de la distribución uniforme de las posiciones con el algoritmo de dinámica molecular.

II. MARCO TEÓRICO:

Monte Carlo es una serie de técnicas computacionales que con base en N muestras construidas aleatoriamente con una distribución de probabilidad definida, permite realizar y resolver problemas con procesos aleatorios llevando a cabo experimentos numéricos, es decir que todo problema que resulte en una interpretación probabilística, puede ser susceptible de ser modelado usando números aleatorios que a su vez son construidos con técnicas Monte Carlo.

Existen diferentes algoritmos que permiten realizar la técnica de generación de muestras de Monte Carlo, se evaluarán en el presente articulo las mas comunes para el propósito, estas son: Muestreo directo, cadenas de Markov y muestreo por eventos.

Muestreo Directo de Monte Carlo: Este método es utilizado para distribuciones de una única variable aleatoria, dada la variable aleatoria X con función de densidad de probabilidad $p_o(X)$ y considerando su función de distribución acumulativa como:

$$F_X(x) = \text{Prob}(X \leq x) = \int_{-\infty}^x p_o(v) dv \quad (1)$$

siendo una función creciente monótona, la importancia de la función densidad de probabilidad recae en que esta describe la probabilidad relativa de que dicha variable aleatoria tome determinado valor. Cuando tenemos varias variables con probabilidades independientes entre si, la función de distribución acumulativa es el producto de estas dos probabilidades, una vez obtenido $F_X(x)$, se puede muestrear la variable aleatoria realizando una inversión tal que:

$$Y = F_X^{-1}(x) \quad (2)$$

donde Y es la variable que se busca muestrear dado que esta se encuentre dentro del rango $[0,1]$ definido por la función de densidad de probabilidad.

Muestreo de Monte Carlo basado en Cadenas de Markov: En un proceso estocástico (es decir dependiente del tiempo) tal que $\{X_t, t\}$ tal que X_t es una variable aleatoria y t es el tiempo, un proceso de Markov ocurre si para cualquier intervalo $s > 0$ y tiempo t :

$$(X_{t+s}|X_u, u \leq t) \sim (X_{t+s}|X_t) \quad (3)$$

es decir, la probabilidad de que ocurra el suceso en un instante futuro, descrito por la variable X_{t+s} esta condicionada por el valor de esta en el instante actual t pero es independiente de su valor en cualquier instante anterior, por lo que se distingue por una serie de sucesos independientes condicionados únicamente por la medida anterior. Una cadena de Markov es un proceso de Markov discreto en el tiempo, es decir que toma un conjunto de valores para t específico. Esto implica que las transiciones de probabilidad son temporalmente homogéneas (también llamadas transiciones estacionarias), es decir que no dependen del instante en que ocurren, resumidamente se escribe como:

$$p_{ij} = P(X_{n+1} = j | X_n = i) \quad (4)$$

donde p_{ij} son las transiciones estacionarias que describen completamente una cadena de Markov, además se cumple que $\sum_{j=1}^N p_{ij} = 1$ cuando $i = 1, \dots, N$.

Muestreo basado en Dinámica molecular por eventos: La dinámica molecular son técnicas de simulación en la cual se construye un sistema de átomos o moléculas que interactúan por un periodo de tiempo, permitiendo visualizar la dinámica de las partículas. Estas técnicas o algoritmos tienen unas bases físicas concretas las cuales se describen en el marco de la física estadística:

- *Colectividad Microcanónica:* es un concepto de la física estadística empleado en el estudio de sistemas

macroscópicos aislados y que se encuentran en equilibrio termodinámico por lo tanto su energía total es constante además que ni su volumen ni su la cantidad de partículas se ven alteradas. Los conjuntos de micro estados se les asocia una densidad de probabilidad dada por:

$$\rho(q, p) = \frac{\delta[E - H(q, p)]}{\Omega(E)} \quad (5)$$

donde $\Omega(E)$ es el numero de micro estados dependientes de la energía del sistema. Utilizando esta simulación es posible observar la probabilidad de que una partícula pueda estar en la misma configuración en un tiempo determinado.

- *Ensamble Canónico:* es un concepto de la física estadística en que el sistema evaluado, ni el volumen ni la cantidad de partículas se altera, la temperatura permanece alrededor de la media deseada por medio de procesos endotérmicos y exotérmicos que ocurren cuando interactúa con un reservorio de temperatura. este formalismo permite describir los estados del sistema de igual forma que en el estudio realizado por la colectividad microcanónica pero visto desde el punto de vista macroscópico.

Para iniciar un proceso de dinámica molecular se requiere una configuración inicial del sistema a analizar, es decir que se requieren las posiciones iniciales y de ser posible las velocidades de los átomos que conforman el sistema. Para realizar esta simulación se requiere de diferentes etapas:

- *Preparación del sistema:* Se establece la configuración inicial del sistema, cuantos átomos se evaluarán y las condiciones de equilibrio termodinámico.
- *Equilibramiento:* Mediante ensambles de simulación (microcanónico, canónico, isotérmico, isobárico, etc) se lleva el sistema al equilibrio donde la energía permanece casi constante, por lo que se requiere definir condiciones como presión o temperatura.
- *Simulación Monte Carlo:* Se define el tiempo de ejecución y se ejecuta la dinámica molecular que resulta en el calculo de las fuerzas del sistema que permite obtener las propiedades fisicoquímicas de interés.
- *Resultados:* Se analiza los resultados, comúnmente relacionados al comportamiento de las trayectorias por medio de animaciones.

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN:

En esta sección se discutirá los resultados encontrados al realizar los diferentes métodos de muestreo y posteriormente analizar la probabilidad de que las configuraciones ocurran, el problema se define en un contenedor aislado cuadrado de

lado 1.0 por lo que se considera que para cada configuración se conserva la equiprobabilidad por lo que se busca alterar los parámetros mas importantes (σ , n_runs) que permiten evaluar las condiciones necesarias para hacer evidente la equiprobabilidad, estos parámetros representan el radio de cada esfera y el numero de veces que evolucionara el sistema. con base en estos parámetros se construye las posiciones condicionadas y a su vez permite observar los hits que indican los aciertos para cada configuración. Se realizaron 3 configuraciones que serán estudiadas con $N=4$ y $N=8$ esferas con radio $\sigma = 0.15$.

Muestreo Directo: En esta simulación se agregan de forma aleatoria esferas dentro de la caja, se evalúa que estas no se superpongan a otras esferas aleatorias o a las propuestas en cada configuración, a cada conjunto que cumpla este requisito se le llama una configuración legal y se cuenta como un hit, la probabilidad de que ocurra esto sera determinada por el numero de hits entre el numero de esferas que no sean aceptadas, Se evaluaron las probabilidades de aciertos en las configuraciones respecto al total numero de veces que evoluciona el sistema, para esto se considero los valores (10^4 , 10^5 , 10^6) de n_runs . En cada caso se ejecuto el programa 3 veces con el propósito de observar los posibles resultados en cada configuración.

Configuracion	Centro de Masa coordinado			
	Partícula 1	Partícula 2	Partícula 3	Partícula 4
a	(0.30,0.30)	(0.30,0.70)	(0.70,0.30)	(0.70,0.70)
b	(0.20,0.20)	(0.20,0.80)	(0.75,0.25)	(0.75,0.75)
c	(0.30,0.20)	(0.30,0.80)	(0.70,0.20)	(0.70,0.70)

TABLE I. Descripción de la posición inicial de las partículas que se encuentran en cada configuración.

Las configuraciones *a*, *b*, *c* como se muestran en la tabla I indican los centro de masa de las esferas correspondientes a cada partícula, notamos que las posiciones se tomaron con la única condición que se encuentren dentro de la caja contenedor, es decir que deben estar en el rango $[0, 1] \in (x, y)$.

Los resultados de las probabilidades se muestran para cada caso de n_runs en las tablas (II,III,IV):

Configuraciones	Probabilidad [%]		
	Ejecución 1	Ejecución 2	Ejecución 3
a	0.03	0.03	0.01
b	0.01	0.01	0.00
c	0.07	0.00	0.00

TABLE II. Probabilidades de acierto en la ejecución del programa para cada configuración cuando $n_runs = 10^4$.

Se observa que como es de esperar, la probabilidad de acierto en cada configuración se hace igual a medida que aumentamos las medidas. La razón principal de que se requiera un numero de medidas relativamente grande se observa en los resultados, las probabilidades obtenidas son

Configuraciones	Probabilidad [%]		
	Ejecución 1	Ejecución 2	Ejecución 3
a	0.006	0.008	0.009
b	0.013	0.013	0.007
c	0.012	0.015	0.016

TABLE III. Probabilidades de acierto en la ejecución del programa para cada configuración cuando $n_runs = 10^5$.

Configuraciones	Probabilidad [%]		
	Ejecución 1	Ejecución 2	Ejecución 3
a	0.0112	0.0113	0.0118
b	0.0110	0.0122	0.0112
c	0.0110	0.0126	0.0110

TABLE IV. Probabilidades de acierto en la ejecución del programa para cada configuración cuando $n_runs = 10^6$.

lo suficientemente pequeñas para que ocurran cuando se toman números pequeños de medidas. Se observa que para el muestreo directo, se puede hablar de equiprobabilidad dado que se puede considerar que cada acierto en cada configuración es independiente de las otras permitiendo que esta ocurrencia tenga una probabilidad de 0.01%.

Se intento realizar la misma evaluación para $N=8$ partículas, pero para esto se comprueba una necesidad de reformar el radio de las esferas, lo que cambiaría las probabilidades del anterior estudio, esto es debido a que dentro del tamaño de la caja, existe una probabilidad bastante pequeña de que se genere un centro de masa aleatorio que permita la condición de distancia mínima entre las esferas de la configuración y la generada por el método propuesto, esto implica un bucle que al medirse los tiempos de ejecución, sobrepasa las 2 horas de cada ejecución para el caso $n_runs = 10^4$ que implica un menor tiempo de ejecución respecto a los otros casos, para mayor compresión ver explicación dentro del código respecto a la función *direct_disk_box()*.

Utilizando la función generadora de muestras aleatorias de Monte Carlo usando muestreo directo es posible obtener las posiciones. Se realizo un estudio de la frecuencia de que las esferas se posicionen en un rango específico de los ejes x y y , es decir que se busca observar si las posiciones asociadas a la evolución de los centros de masa son igualmente probables. Se muestra los resultados de frecuencias de las posiciones en la figura (1,2):

Se observa en la figura 1 que aparentemente las posiciones contradicen la equiprobabilidad ya que se espera una distribución uniforme dado que se cumpla las mismas probabilidades. Este comportamiento implica que hay posiciones que mas repiten dentro de un rango específico, especialmente se observa que la mayor frecuencia corresponde a las posiciones definidas en los limites de la caja, esto se verifica observando la figura 2.

Una posible explicación de esto es debido a la forma en que se construyen las esferas que se consideran configuraciones legales, como estas en principio se construyen en una posición

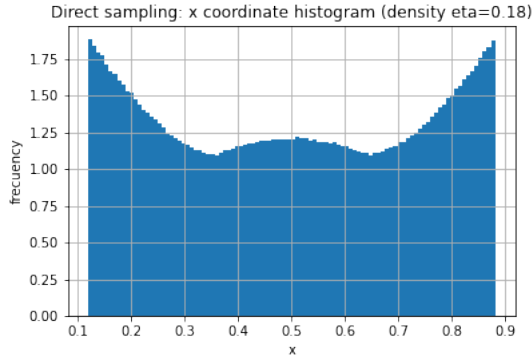


FIG. 1. Histograma de las posiciones en el eje x, para los resultados del muestreo directo cuando la densidad $\eta=0.18$, es decir que $\sigma = 0.1197$ y $n_{\text{runs}} = 10^6$.

aleatoria, es posible que se solape con las partículas que corresponden a cada configuración, esta no es una configuración legal y se descarta, cuando las configuraciones legales se dan, es decir cuando no se solapan, se considera esto como un hit, permitiendo hacer un conteo de las configuraciones legales. El problema con esto es que realmente no existe una interacción entre esferas que se desplacen en todo el espacio sino que estas se posicional aleatoriamente de tal forma que se discrimina todo el espacio haciendo imposible hablar de una distribución de posiciones uniformes. Si este es el caso, dada la problemática, una forma de solucionar la distribución uniforme es aumentar mucho mas el valor de n_{runs} con el propósito de buscar muchas mas configuraciones legales ya que en el caso mas extremo, esto da lugar a cubrir todo el espacio dentro de la caja con esferas posicionadas aleatoriamente.

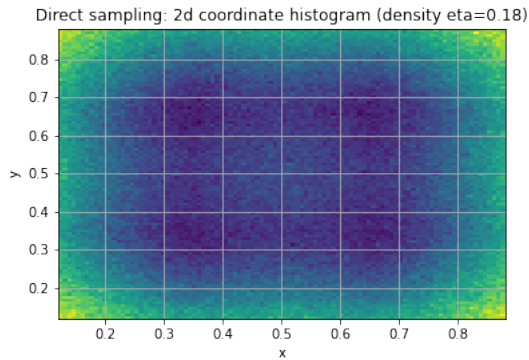


FIG. 2. Histograma 2D de las posiciones de los resultados del muestreo directo cuando la densidad $\eta=0.18$, es decir que $\sigma = 0.1197$.

Muestreo usando Cadenas de Markov: Usando métodos de Monte Carlo en Cadenas de Markov podemos estar seguros que la dificultad de que las esferas no interaccionen entre si se de, esto es debido a que como las esferas nuevas se crean dependiendo del proceso anterior, entonces podríamos llegar a una convergencia mas rápida que usando muestreo directo. La condicion que debemos imponer para que esto ocurra es

que la probabilidad de que una configuración inicial pase a otra final, debe ser igual a la probabilidad de que ocurra lo contrario y esto en esencia se cumple ya que como se menciono, suponemos que las configuraciones legales tienen la misma probabilidad. Luego podemos evaluar las probabilidades como se realizo en el estudio usando muestreo directo, esto lo vemos en las tablas (V,VI,VII) .

Configuraciones	Probabilidad [%]		
	Ejecución 1	Ejecución 2	Ejecución 3
a	0.00	0.03	0.01
b	0.00	0.01	0.00
c	0.01	0.01	0.00

TABLE V. Probabilidades de acierto en la ejecución del programa para cada configuración cuando $n_{\text{runs}} = 10^4$, usando muestreo basado en Cadenas de Markov.

Configuraciones	Probabilidad [%]		
	Ejecución 1	Ejecución 2	Ejecución 3
a	0.009	0.011	0.015
b	0.010	0.006	0.008
c	0.006	0.007	0.012

TABLE VI. Probabilidades de acierto en la ejecución del programa para cada configuración cuando $n_{\text{runs}} = 10^5$, usando muestreo basado en Cadenas de Markov.

Configuraciones	Probabilidad [%]		
	Ejecución 1	Ejecución 2	Ejecución 3
a	0.013	0.013	0.012
b	0.007	0.012	0.012
c	0.013	0.010	0.011

TABLE VII. Probabilidades de acierto en la ejecución del programa para cada configuración cuando $n_{\text{runs}} = 10^6$, usando muestreo basado en Cadenas de Markov.

Donde se comprueba nuevamente que la probabilidad de obtener configuraciones legales es de 0.01%, en este apartado se busca mostrar las diferencias entre muestreo directo y usando cadenas de Markov, se ha comprobado que para ejecuciones con n_{runs} suficientemente grandes, el algoritmo tarda en converger, esto debido a que no se cumplían los requisitos de las condiciones impuestas en el algoritmo para poder generar los números y debido a esto, el algoritmo presenta un bucle que para $N=4$ esferas y $n_{\text{runs}} = 10^6$ el tiempo de ejecución fue de aproximadamente 60 minutos en comparación al algoritmo de muestreo directo que bajo las mismas condiciones, generaba configuraciones legales en 8 minutos.

Adicionalmente se realiza de forma similar los histogramas respecto a las posiciones, resultados expuestos en la figura :

Observamos que la figura 3 cumple con el mismo patrón de la figura 2, sin embargo se comprueba que el numero de posiciones legales dentro de la caja fue mayor, indicando que con un numero mas grande de n_{runs} es posible obtener una distribución uniforme de las posiciones de tal forma que se com-

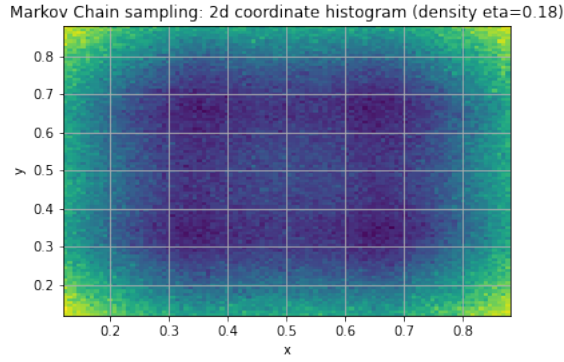


FIG. 3. Histograma 2D de las posiciones de los resultados del muestreo usando Cadenas de Markov cuando la densidad $\eta = 0.18$, es decir que $\sigma = 0.1197$

prueba la equiprobabilidad. Además, vemos otro problema asociado a los tiempo de ejecución del algoritmo, esta vez asociado a la densidad, haciendo variaciones de σ se puede comprobar que disminuye poco los tiempos de ejecución o aumentan drásticamente.

Muestreo usando dinámica molecular: En este apartado no se busca observar la probabilidad de que ocurra una configuración legal. Se busca observar que, si utilizando la dinámica molecular que en principio permite la interacción directa de las esferas, es posible comprobar que las posiciones asociadas a eventos son igualmente probables. Los resultados se exponen en las figuras (4,5):

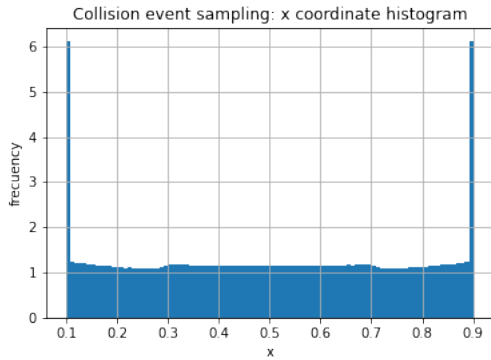


FIG. 4. Histograma de las posiciones en x, utilizando los resultados del muestreo usando dinámica molecular con $\sigma = 0.10$

Como se observa en las figuras 4,5, se obtiene las posiciones de las esferas uniformemente distribuidas en la caja contenedora exceptuando los limites de esta, debido a que estas rebotaran con mayor frecuencia debido con los muros que en contacto con otra esfera. Este muestreo resulta eficiente debido a que cada evento se ve sometido a la recursividad de las cadenas de Markov pero sin contar con la aleatoriedad de los muestreos anteriores, de hecho resulta siendo además el algoritmo con mejores tiempos de ejecución ya que para $n_{runs} = 5 \times 10^6$ eventos, se obtuvo todos los posibles resultados de las posiciones en aproximadamente 3

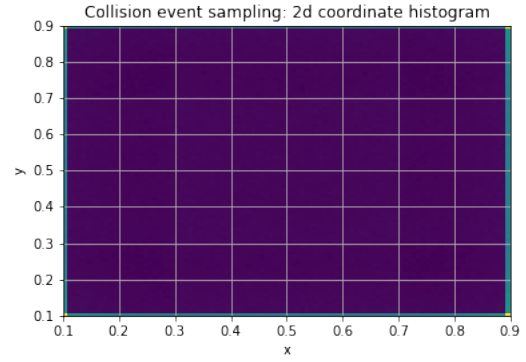


FIG. 5. Histograma 2D de las posiciones, utilizando los resultados del muestreo usando dinámica molecular con $\sigma = 0.10$

minutos.

IV. CONCLUSIONES:

- Se comprobó que para cada configuración se obtiene la misma probabilidad de 0.01%, es decir que son equiprobables. Esto es debido a que se insertan configuraciones posibles con la misma probabilidad dentro de la caja aislada.
- Aunque el algoritmo de muestreo usando Cadenas de Markov resulta mejor para la convergencia, cuando el numero de eventos y la densidad aumentan, se observa problemas mayores de tiempos de ejecución en comparación con los otros dos algoritmos estudiados.
- Debido a la generación aleatoria de configuraciones con los algoritmos de muestreo directo y usando cadenas de Markov, se observa que no todas las posiciones son cubiertas dentro de la caja en un numero específico de eventos, por lo que este se debe aumentar para encontrar mas configuraciones legales, esto conlleva a problemas de tiempo de ejecución para ambos algoritmos.
- Se observa que la cantidad de configuraciones legales para el caso del algoritmo que utiliza dinámica molecular para números de eventos similares a los otros algoritmos son mayores, esto es debido a que en este caso se están considerando las configuraciones posibles por medio de interacciones con las esferas vecinas y no por medio de inserción aleatoria de esferas.

V. AGRADECIMIENTOS:

Agradecimientos a los profesores que cursos atrás me dieron las bases para poder obtener los conocimientos que he llegado a adquirir, especialmente al profesor Johans Restrepo por impartir las clases que exponen la teoría del presente artículo de forma magistral y hacerla clara para el

entendimiento de todos los presente en el aula.

Código de la simulación: GitHub

VI. REFERENCIAS:

¹J. Camarena, *Cadenas de Markov y aplicaciones* (División de Estudios de Posgrado de la Facultad de Ingeniería Eléctrica., 2020).

²W. Krauth, *Introduction to Monte Carlo Algorithms* (CNRS-Laboratoire de Physique Statistique, 1996).

³R. Feynman, *Statistical Mechanics: A Set of Lectures* (Benjamin/Cummings, Reading, Massachusetts, 1972).

⁴J. Rull-Jordi, *Curso de Física Estadística* (Universidad de Barcelona, 2006).