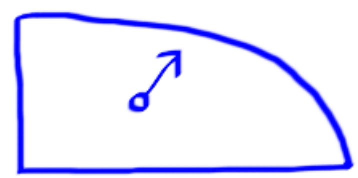
Buenas tardes!

Curso: Monte Carlo + Dinámica Molecular

LA CONGA

Ernesto Medina

Caos   determinismo no predecible $\longrightarrow$ probabilidad



exhibe caós

$$H = \begin{pmatrix} & & \\ & & \\ & & \end{pmatrix}$$ Matrices electrónicas

Aplicaciones:

- Astrofísica
- Tratamiento de imágenes

Fluidos

Sistemas Desordenados

Procesos difusivos

Calculo de riesgo → economía
→ clima

Condiciones de borde complejas

Biología computacional

Optimización

Problemas Inversos

Teorema del límite Central

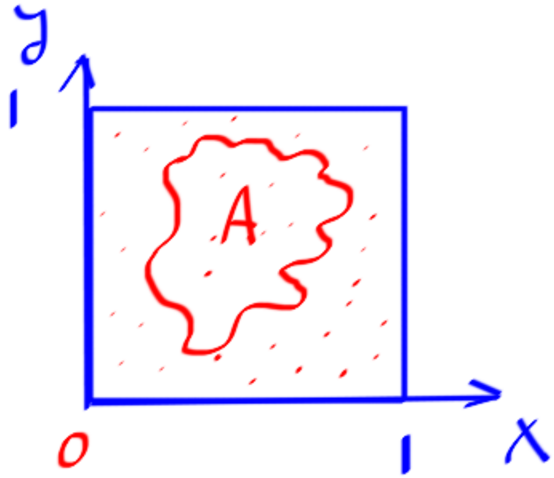
numéricamente

fluctuaciones $\leftarrow \dfrac{Var(Z)}{\langle Z \rangle^2} \propto \dfrac{1}{N} = A/N$ (# de grados de libertad)

$N \downarrow 10^{23}$

promedio

Cálculos de un área con bordes complejos



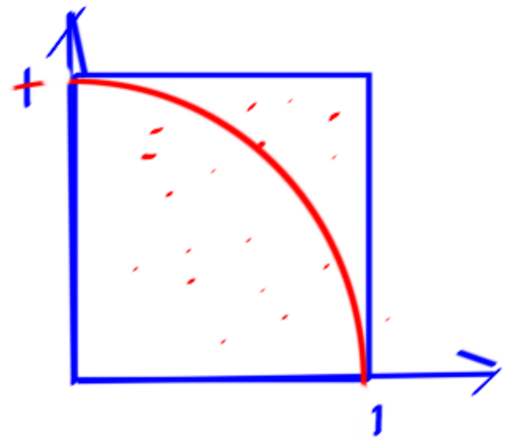
definimos una variable aleatoria

$$0 < X < 1$$

$$P(x)$$

Si escogemos $P(x) = \underline{\underline{\text{uniforme}}}\ [0,1]$

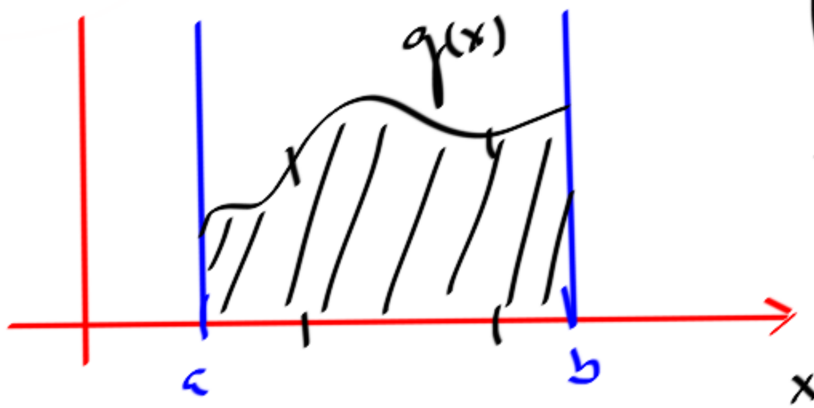
$$A = \lim_{N \to \infty} \frac{N'}{N} = \text{estimado del area de la figura}$$



$P(x) = \text{uniform} \; [0,1]$

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N'}{N} = \frac{\pi}{4}$$

Calculo de Integrales $\Longleftrightarrow$ areas



$$\int_a^b g(x)\,dx = I$$

computacional

$$\sum_i^N g(x_i)\Delta x_i = I$$

discretizado

donde esta la variable aleatoria?

$x \rightarrow$ variable aleatoria definida $[a,b]$

$P(x) \rightarrow$ distribucion con que se generan puntos sobre el eje x

Nueva variable

$$y = \frac{g(x)}{P(x)}$$

Trivial

resultado buscado

$$\langle y \rangle = \int_a^b \left(\frac{g(x)}{\cancel{P(x)}} \right) \cancel{P(x)}\, dx = \underline{\underline{I}}$$

$\langle \eta \rangle$ definición continua

$\Rightarrow$ discreta $\quad \langle \eta \rangle = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \eta_j$

T. L. Central

no universal
dep. de detalles

$$P \left\{ \left| \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \eta_j - I \right| < 3\sqrt{\frac{D_\eta}{N}} \right\} \xrightarrow[N \to \infty]{} 1$$

universal

Escogencia de $P(x)$ que error $3\sqrt{\frac{D_\eta}{N}}$ $\qquad \frac{1}{\sqrt{N}}$

normaliza $\eta = g(x)/p(x)$

Muestreo de Importancia (Importance Sampling)

y $P(x)$

$$P(\epsilon) = \frac{e^{-\beta\epsilon}}{Z}$$

y

Ej.

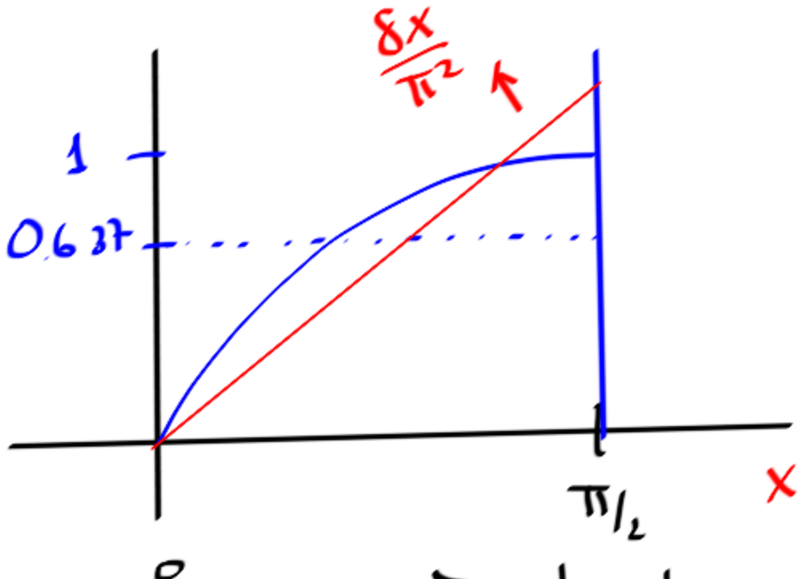
$\to g(x)$

$$I = \int_0^{\pi/2} \operatorname{sen} x \, dx = -\cos x \Big|_0^{\pi/2} = -(0-1) = 1$$

2 distribuciones

$$P_1(x) = \frac{1}{\pi/2} = \frac{2}{\pi} \qquad \int_0^{\pi/2} P_1(x)\,dx = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2} dx = \frac{2}{\pi}\,\frac{\pi}{2} = 1$$

$P_2(x) = \dfrac{8x}{\pi^2} \to$ está normalizada



$$P_1(x) = \frac{2}{\pi} = 0{,}637$$

Aproximación de Montecarlo

$$I = \int_0^{\pi/2} \operatorname{sen} x \, dx \longrightarrow \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \frac{g(\xi_j)}{P(\xi_j)} \simeq I$$

$$y = \frac{\operatorname{sen} \xi}{P_1(\xi)} = \frac{\operatorname{sen} \xi}{2/\pi}$$

$$\langle \eta \rangle = M\eta = \int_0^{\pi/2} \frac{\operatorname{sen} x}{2/\pi} \left(\frac{2}{\pi}\, dx\right) = I$$

$$= \int_0^{\pi/2} \frac{\operatorname{sen} x}{2/\pi}\, d\underbrace{\left(\frac{2}{\pi}x\right)}_{y}$$

$$= \int_0^{1} \frac{\operatorname{sen} \frac{\pi}{2} y}{2/\pi}\, dy$$

desvio

0.048

$$I \simeq \frac{1}{N} \frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^{N} \operatorname{sen} \xi_j = \frac{1}{N} \frac{\pi}{2} \sum_{j=1}^{N} \operatorname{sen} \frac{\pi}{2} y_j$$

$$\xi \to [0, \pi/2]$$
$$y \to [0, 1]$$

$$\boxed{N = 10 \qquad I = 0.952}$$

b) $P(s) = 8x/\pi^2$ //

$$y = \frac{\operatorname{sen} s}{8x/\pi^2}$$

$$\frac{8x}{\pi^2}\,dx = dy$$

$$\Rightarrow \quad y = \frac{4x^2}{\pi^2}$$

$$I = \frac{\pi^2}{8N}\sum_{j=1}^{N}\frac{\operatorname{sen}\frac{\pi}{2}\sqrt{y_j}}{\frac{\pi}{2}\sqrt{y_j}}$$

$$x = \frac{\pi}{2}\sqrt{y}$$

y uniforme

$$\boxed{\text{Muestreo de importancia}}$$

$N = 10$

$I \simeq 1.016$

desviación de $1 = I$

$0.016 \longleftrightarrow$

Converge más rápido que la prob. uniforme.

Nuestra area de Interes:

- Sistemas térmicos → Ising modelos magnéticos
- " Desordenados → $\uparrow \downarrow \times \downarrow \uparrow \uparrow$
- " en equilibrio

$\frac{1}{N}$ en MC en equilibrio

tiempo 't' artificial (no se corresponde con eq. de mov.)

Teorema del limite Central ← Converge al equilibrio