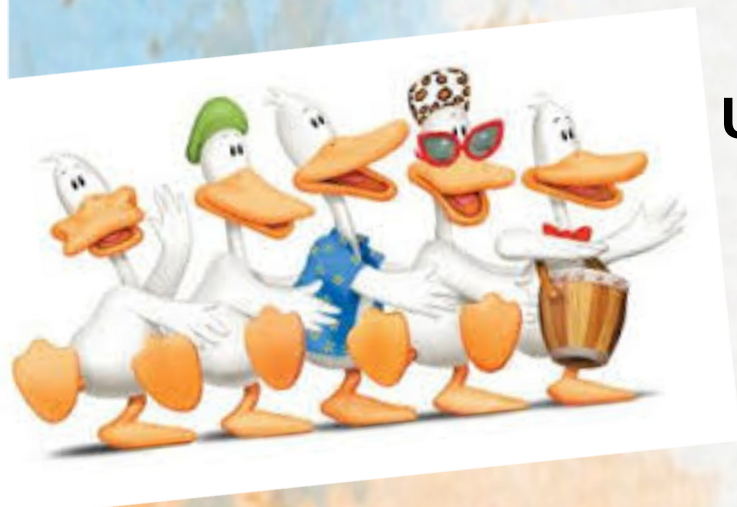
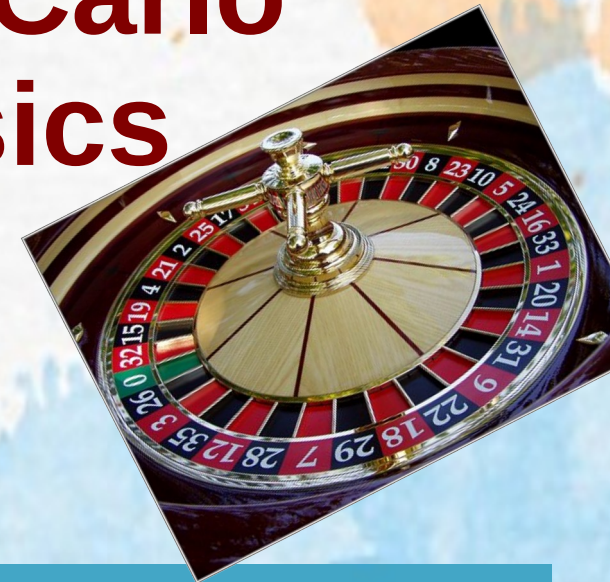




Métodos de Monte Carlo LA-CoNGA Physics

Prof. Gloria Buendía
Universidad Simón Bolívar
Caracas-Venezuela



Abril 2023



Contenido

- Introducción
-
- Metodos de simulación
-
- Cadenas de Markov
-
- Algoritmo de Metropolis
-
- Critical Slowing Down
-
- Cálculo de errores
-
- Escalamiento de Tamaño Finito (FSS)
-

Bibliografía _Lecturas Recomendadas

- A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, David Landau, Kurt Binder. Cambridge University Press
- Monte Carlo Methods in Statistical Physics 1st Edition by M. E. J. Newman (Author), G. T. Barkema (Author)
- Monte Carlo Methods, 2nd Edition. Malvin H. Kalos, Paula A. Whitlock. Wiley
- Monte Carlo Simulations in Statistical Physics. Kurt Binder, Dieter Hermann Springer
- The theory of Critical Phenomena. J.J. Binney, N.J. Dowrick, A. J. Fisher, M.E.J. Newman Oxford Science Publications
- Statistical Mechanics of phase transitions. J.M.Yeomans (Clarendon Press)

Introducción

Una simulación numérica es un cálculo hecho en computador basado en un programa que desarrolla un modelo matemático para un problema de física, economía, social, biológico, etc.

Se utiliza cuando (entre otros casos):

- Las ecuaciones del sistema real son muy complejas, como en el caso de sistemas no lineales
- El número de variables es muy grande, solo conocemos el comportamiento de unas pocas variables macroscópicas
- Queremos saber como reacciona un sistema ante determinados cambios, pero es muy complicado fijar estas variables desde el punto de vista experimental.
- Es muy costoso ó muy riesgosos para trabajar con el sistema real. Permite analizar ambientes o comportamientos ante situaciones de peligro sin replicar estas condiciones y sin daño a los sujetos de experimentación. Por ejemplo, propagación de epidemias, extinción de especies, riesgos financieros.

Meteorología, Redes de Potencia, Reacciones Nucleares, Comportamiento Magnético, eléctrico, etc de materiales, comportamiento de la bolsa de valores, procesos catalíticos, Procesos de formación de opinión en sociedades, modelos de tráfico, etc, etc, etc.

En general cuando el método de simulación utiliza números al azar se dice que se hace una **SIMULACION DE MONTE CARLO**, por la analogía con el pequeño Principado famoso por sus juegos al azar.

Un número al azar es un número escogido de un conjunto de números que no tienen un patron definido, estos números en la mayoría de los casos son independientes uno del otro.

Un **generador de números al azar** produce números bajo determinadas condiciones.



Para simulaciones numéricas se utilizan números generados por el computador, no son formalmente al azar y se llaman “pseudo random”. Los números realmente al azar son basados en fenómenos físicos tales como ruido atmosférico, ruido térmico, y otros fenómenos cuánticos.

Para la mayoría de aplicaciones los números “pseudo random” funcionan muy bien, siempre que cumplan que sean independientes unos de otros, que estén igualmente separados (si queremos una distribución uniforme) en el rango de valores posibles. Muchos “pseudo random” generadores tienen un período, despues del cual los números se repiten. Es importante escoger un generador rápido, pero con un periodo largo para el rango de nuestras simulaciones.

Hay toda una ciencia detras de la generación de números al azar, sobre todo por las necesidades criptográficas de protección de datos.

Desde comienzos del siglo XIX se utilizaban métodos de muestreo estadístico para el cálculo de integrales. Enrico Fermi fué pionero en el uso de estos métodos en física, los utilizó para estudiar la difusión de electrones.

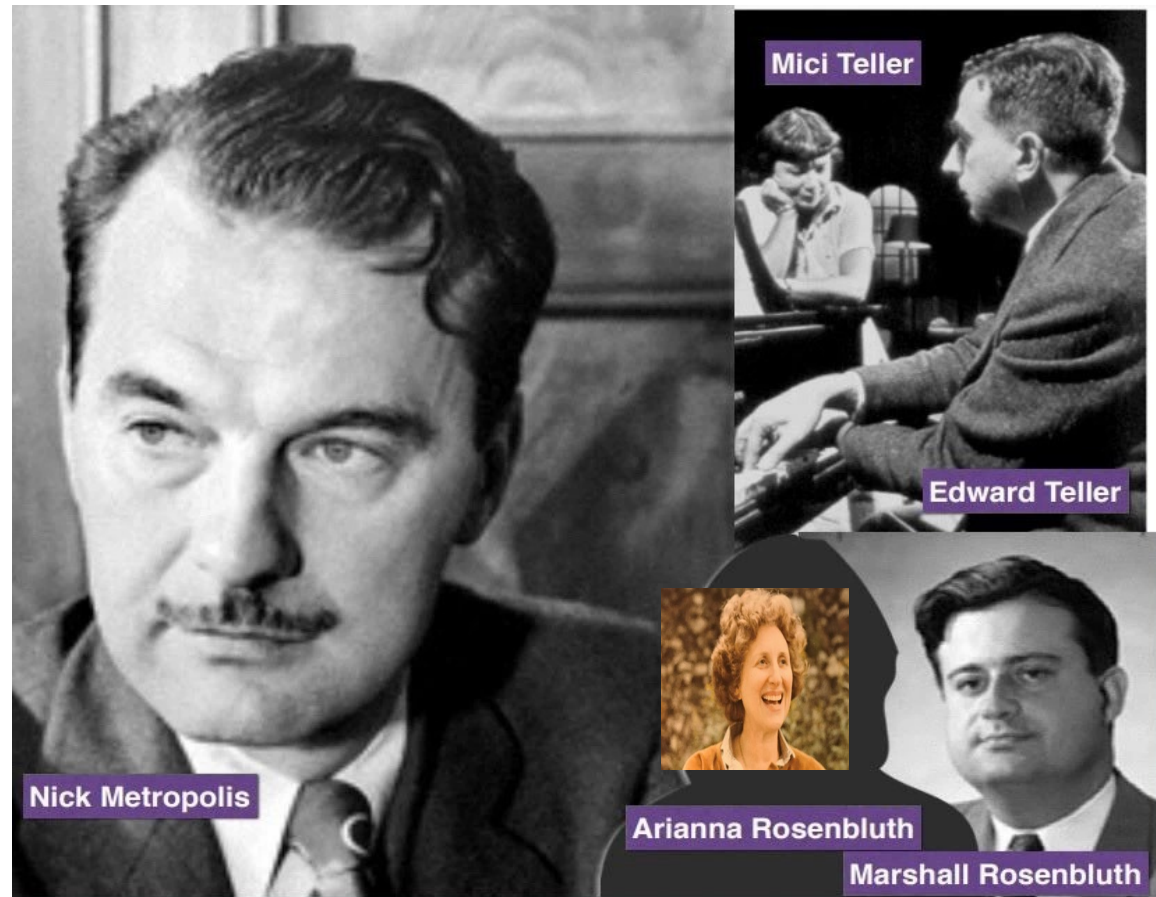


Fin de la guerra, continuidad del LANL?? desarrollaron métodos numéricos para resolver problemas asociados con el transporte de neutrones en la bomba,. Estos métodos numéricos, no deterministas, basados en técnicas de muestreo estadístico y que utilizaban números al azar recibieron el nombre de **Métodos de Monte Carlo**, el principado famoso por sus casinos.

ENIAC, MANIAC, MANIAC2
Éxito total resolviendo distintos
Problemas físicos.

1953 Nick Metropolis,
Arianna-Marshall Rosenbluth
Eduard-Augusta Teller

Famoso paper que describe el famoso
"Algoritmo de Metropolis" basado en
cadenas
De Markov".





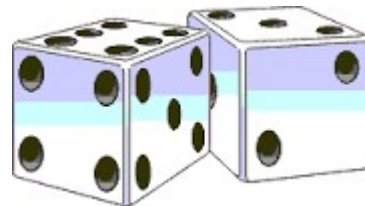
Nature is extremely complicated. Any real system have a huge number of factors and very complicated interactions.

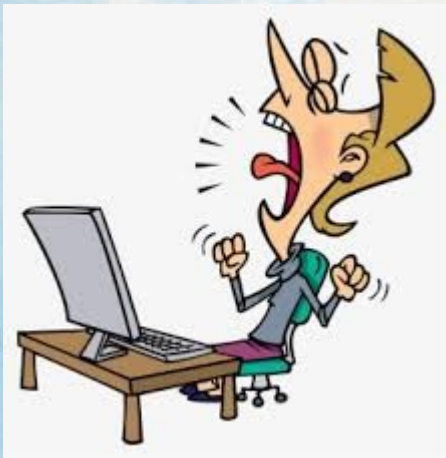
SO, as Physicist what can we do?

Make a “simple model” that with a minimum number of parameters can reproduce some aspects of the system. Simulate by a mathematical model the behavior of the system.

Solve the “simple model” we have to calculate the properties of the model, but it is a complex model that can take many possible configurations. Since we don't have all the information we have to take averages over all the possible configurations compatible with certain macroscopic behavior.

Statistics Monte Carlo methods let's us calculate the average over the most important configurations.





Esta soy yo frente a mi prehistórica laptop. Por lo que no esperen Grandes recursos informáticos, elaborados videos, “virtual classrooms”, etc, pero les prometo que pondré todo mi esfuerzo en preparar material y guiarlos por este proceso de Enseñanza que es nuevo para ambos.



E-mail, Grupo de whatsapp (o telegram)

Para cada tema les enviare notas que estoy preparando para complementar el material De libro. Estas notas las veremos en las reuniones semanales.