



Universidad
del País Vasco

Euskal Herriko
Unibertsitatea

ZIENTZIA
ETA TEKNOLOGIA
FAKULTATEA
FACULTAD
DE CIENCIA
Y TECNOLOGÍA



Gradu Amaierako Lana
Fisikako Gradua

Monte Carlo metodoak eta horien aplikazioak fisikan

Egilea:
Maitane Fariñas Argoitia
Zuzendaria:
Gotzon Madariaga

Gaien Aurkibidea

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | Sarrera | 2 |
| 2 | Oinarri teorikoa | 3 |
| 2.1 | Monte Carlo metodoen sarrera | 3 |
| 2.2 | Definizioak | 4 |
| 2.2.1 | Domeinua eta PDFa | 4 |
| 2.2.2 | Itxarotako balioak. Momentuak | 5 |
| 2.3 | PDFaren laginketa | 6 |
| 2.4 | Monte Carlo integrazioa | 8 |
| 2.5 | Markov-kateak. Ibiltari askeak | 9 |
| 2.5.1 | Metropolis-Hastings algoritmoa | 10 |
| 2.5.2 | Von Neumann algoritmoa | 11 |
| 3 | Monte Carlo metodoen aplikazioak zenbait problema fisikotan | 12 |
| 3.1 | Poissonen ekuazioa | 12 |
| 3.1.1 | Inplementazioa | 16 |
| 3.1.2 | Emaitzak | 17 |
| 3.2 | Uhin-funtzioaren irudikapena | 19 |
| 3.2.1 | Emaitzen interpretazioa | 23 |
| 3.3 | Ising eredua | 26 |
| 3.3.1 | Soluzio analitikoa | 30 |
| 3.3.2 | Inplementazioa | 31 |
| 3.3.3 | Emaitzak | 33 |
| 4 | Ondorioak | 37 |

1. kapitulua:

Sarrera

Historian zehar, fisikaren arloko aurrerapenak beti etorri dira ikerketa teorikoaren eta hark proposatzen zituen teoriak naturarekin bat zetozen ala ez frogatzen zuen ikerketa esperimentalaren eskutik. Ikerketa esperimentalaren garapena, ordea, beti egon da mugatuta, fisikariek aztertu beharreko laginak lortzeko edota propietate jakin bat ondorioztatu ahal izateko teknika berriak asmatzeko zailtasunak direla eta. XX. mendearen erdialdetik aurrera konputagailuek izan zuten garapenari esker, teknika teoriko klasikoaren bitartez ikertzea ezinezkoa zen modelo fisikoaren simulazioak egitea posible bilakatu zen; eta, teknika konputazionalak garatu ahala, simulazioak ikerketa egiteko beste modu bat bihurtu ziren [1].

Azken hamarkadetan, konputagailuen garapenak izugarri egin du aurrera, gero eta konplexuagoak eta handiagoak diren sistemak aztertzeko simulazioak egitea ahalbidetuz. Horrek, hasieran ezinezkoak ziren metodo numerikoak inplementatzea ahalbidetu du; horien artean, Monte Carlo metodoa. Masiboki paraleloak diren ordenagailuen agerpenak edota finantza konputazionala bezalako alorren sorrerak ere bultzatu du garapen hori, zeintzuetan Monte Carlo bidezko kalkuluak oso baliagarriak diren. Oro har, Monte Carlo metodoak duen aplikagarritasun handiak eta sortu duen interesak ideia berrien izugarritzko hazkundera eragin du [2].

Gradu amaierako lan honetan, Monte Carlo metodoak dituen aplikazioetako batzuk aztertuko ditugu. Printzipioz, metodo honekin interpretazio probabilistikoak duen edozein problema ebazteko daiteke baina, ikusiko dugun moduan, ez da horretara mugatzen. Oso erabilia da askatasun gradu anitzeko sistemak aztertzeko, dimentsio askoko integralen soluzioa kalkulatzeko (zeintzuetan ohiko integrazio-metodoak erabiltzea ia ezinezkoa bihurtzen den), fisika estatistikoko sistematarako... eta, gaur egun, baita finantza edota zuzenbidea bezalako arloetarako ere. Lan honetan sistema fisikoetara mugatuko gara. Helburua Monte Carlo (*MC*) metodoaren funtza ulertzea da: haren oinarrian dauden ausazko zenbakiekin lan nola egiten den, probabilitate-dentsitate funtzioak nola lagintzen diren, eta Monte Carlo metodoen oinarritzko algoritmoak zeintzuk diren, besteak beste. Horregatik, metodoaren inguruan aztertutako kontzeptuak problema fisikoetan aplikatuko dira, ohikoenak diren lagintze metodoak martxan jarritz.

Lana bi zatitan banatua dago. Hasteko, problemak ebaztean aplikatu behar ditugun kontzeptuen eta tekniken azalpen teorikoa egingo da, oinarri teorikoan bilduko dena. Bigarren zatian, Monte Carlo metodoak fisikan dituen aplikazioetako hiru aztertuko dira: ekuazio diferentzialen ebazpena, Poissonen ekuazioa; uhin-funtzioaren irudi bidezko errepresentazioa eta, azkenik, sistema magnetikoen eta fase-trantsizioen azterketa, Ising ereduaren bitartez. Lana aztertutako problemek eta erabiltzeko teknikei buruzko hausnarketa batekin amaituko da, zeinetan erabiltzeko metodologiaren baliagarritasuna eztatuko den.

2. kapitulua:

Oinarri teorikoa

Atal honetan Monte Carlo metodoa ulertzeko eta inplementatzeko beharrezkoa izango den teoria garatuko dugu. Alde batetik, probabilitatearen eta estatistikaren oinarriko kontzeptuak azalduko ditugu, problemak planteatzeko orduan ezinbestekoak izango zaizkigunak. Bestetik, teoria hori aplikatzeko eta Monte Carlo metodoa inplementatzeko oinarriak eta algoritmoak zehaztuko ditugu.

2.1 Monte Carlo metodoen sarrera

Monte Carlo metodoak metodo numerikoak dira, eta, modu sinplean, simulazio estatistikoko metodo bezala deskriba daitezke. Simulazio estatistikoko metodo kontsideratzen da simulazio bat egiteko ausazko zenbakien sekuentziak erabiltzen dituen edozein metodo numeriko. Monte Carlo metodoek, ausazko aldagai baten balio-sekuentzia bat erabiliz, problema jakin bateko soluzioaren estimazio bat lortzeko balio dute; eta oso tresna baliagarria da banaketa ezberdinen hurbilketak egiteko, banaketa zehatza lortzea konplexuegia denean.

Monte Carlo metodoen gutxi gorabeherako funtzionamendua edo prozesua ulertzeko, ohiko diskretizazio-metodo numerikoekin alderatuko ditugu. Diskretizazio-metodo horiek, oro har, sistema fisiko edota matematikoak deskribatzen dituzten ekuazio diferentzialak ebazteko erabiltzen dira. Sistema horiek deskribatzen dituzten legeak lortu ahal izateko, lehenengo sistemaren modelo matematiko bat proposatu behar da, ondoren, ekuazioak diskretizatu eta, azkenik, horien soluzioak kalkulatu, lortutako ekuazio aljebraikoen sistema ebartziz. Monte Carlo metodoen kasuan, aldiz, bestelakoa da jarraitu beharreko bidea: sistema fisikoaren lagin bat lortzea da helburua; ez dago sistemaren jokaera deskribatzen duen ekuazio diferentzialik aldeztetik idatzi beharrik. Baldintza bakarra da aztertzen dihardugun sistema fisikoa probabilitatearen dentsitate-funtzio (PDF, ingeleseko *probability distribution function*-etik) batekin deskribatu ahal izatea [3]. Hurrengo ataletan azalduko dugu PDFak zehazki zer diren, eta horiekin lan nola egiten den.

Aztartu nahi den sistema PDF baten bitartez deskribatu daitekeela onartzen badugu, PDFaren lagin bat lortzeko simulazioak egiten has gaitezke. Lagin hori PDFak emandako banaketa jarraitzen duten ausazko puntuek osatuko dute, baina, funtsean, $[0, 1]$ tartean uniformeki banatuta dauden ausazko zenbakiak izango ditugu. Ausazko zenbakiak sortzeko, konputagailuetako sorgailuak erabiltzen dira. Garrantzitsua da azpimarratzea, ordea, zenbaki horiek ez direla inoiz benetan ausazkoak izango: ordenagailuak makina deterministak dira, eta printzipioz ez dira gai guztiz ausazkoak diren zenbakiak sortzeko; bai ordea horien hurbilketa onak egiteko. Horregatik, *sasi-ausazko* zenbakiak direla esaten da. *Ausazko* hitza, aldiz, intrintsekoki ausazkoak diren prozesu fisikoetako emaitzak deskribatzeko erabiltzen

da. Hala ere, gaur egun algoritmo asko daude ausazkotasunaren hurbilketa behar bezain ongi egiteko gai direnak eta, beraz, lan honetan zehar, ausazko zenbakiak erabiltzen ari garela onartuko dugu [4].

Lagina lortzeko, simulazioak nahi beste aldiz errepikatzen dira, eta azken emaitza lortutako balioen batez bestekoak eginez lortzen da. Batez besteko emaitza horretatik errore estatistikoa kalkula daiteke, errore jakin bat lortzeko beharrezkoa den simulazio kopurua kalkulatu ahal izateko.

Laburbilduz, Monte Carlo metodoen funtsa ulertu nahi badugu, argi eduki behar dugu ausazko zenbakiak nola sortzen diren eta nola jokatzeko duten; probabilitatearen dentsitate-funtzioa zer den; eta, horiekin sistemaren laginketa nola egiten den. Azkenik, PDFaren momentuak zer diren jakitea ere baliagarria izango zaigu, horiekin kalkulatu baitira batezbestekoa eta bariantza, errore estokastikoarekin lotutako magnitudeak.

2.2 Definizioak

Aurrerago aztertuko ditugun kontzeptuak ulertzeko eta problemak ebatzi ahal izateko, ezinbestekoa da, lehenik eta behin, aldagai estokastikoak zer diren ulertzea. Izan ere, hemen erabiltzen ditugun ausazko zenbakiak aldagai estokastiko izeneko kontzeptu estatistikoen hurbilketa numerikoak baino ez dira. Ausazko aldagai ere esaten zaie batzuetan. Lan honetan zehar, letra larriz izendatuko ditugu aldagaiak: X, Y, \dots [3].

2.2.1 Domeinua eta PDFa

Aldagai estokastikoak ulertzeko, garrantzitsua da lehenik horien marko teorikoa ondo finkatzea. Bi kontzeptu nagusi daude horiekin lotuta: *definizio-eremua* eta aurretik ere aipatu dugun *probabilitatearen dentsitate-funtzioa*, *PDFa*.

Definizio-eremua aldagaiak har ditzakeen balio guztien multzoa da: $\mathbb{D} = \{x\}$. Suposa dezagun txanpon bat daukagula; hura jaurtitzean aurpegia edo gurutzea irtengo zaigu eta, beraz, X -ek irten den txanponaren aldea irudikatuko du kasu honetan. Honela adieraziko genuke X -en definizio eremua: $x \in \{\text{aurpegia, gurutzea}\}$.

PDFa, $p(x)$, definizio-eremuaren funtzio bat da. Kasu diskretuan, zuzenean X -ek balio jakin bat hartzeko duen probabilitatea ematen digu, hau da, definizio-eremuko balioek zein probabilitate duten esaten digu. Txanponaren kasuan $p(x) = 1/2$ litzateke $\forall x \in \mathbb{D} = \{\text{aurpegia, gurutzea}\}$.

$$\text{Prob}(X = x) = p(x) \tag{2.1}$$

Kasu jarraituan, aldiz, $p(x)$ PDFak ez digu zuzenean ematen X aldagaiak balio jakin bat hartzeko duen probabilitatea, probabilitatearen dentsitatea baizik. X -ek x -en inguruko dx tarte infinitesimaleko balio bat hartzeko probabilitatea definitzen

da, $p(x)dx$. Hortik abiatuz, honela definitzen da X aldagai estokastikoak tartea ez-infinitesimal bateko edozein balio hartzeko probabilitatea:

$$\text{Prob}(a \leq X \leq b) = \int_a^b p(x)dx \quad (2.2)$$

Bai kasu diskretuan bai jarraituan, PDFak bi propietate bete behar ditu:

1. $p(x) \geq 0$. Positiboa izan behar du definizio-eremu osoan; probabilitatea negatiboa izateak ez du zentzurik.
2. $\sum_{x_i \in \mathbb{D}} p(x_i) = 1$ kasu diskretuan, eta $\int_{x \in \mathbb{D}} p(x)dx = 1$ kasu jarraituan. Baldintza hori betetzen duen PDFa normalizatuta dagoela esaten da.

X aldagaiak x baino txikiagoa den edozein balio hartzeko probabilitatea ere oso erabilgarria izango zaigu problemak ebatzeko orduan. Probabilitate hori ematen digun funtzioari *banaketa-funtzio* esaten zaio (CDF, ingeleseko *cumulative probability distribution function*), eta $P(x)$ letra larriz adieraziko dugu. Era honetan kalkulatu dira kasu jarraituan eta kasu diskretuan, hurrenez hurren:

$$P(x) = \text{Prob}(X \leq x) = \int_{-\infty}^x p(x')dx' \quad (2.3)$$

$$P(x) = \text{Prob}(X \leq x) = \sum_{x_i \leq x} p(x_i) \quad (2.4)$$

2.2.2 Itxarotako balioak. Momentuak

PDFaren bitartez, X aldagai estokastikoaren probabilitateak aztertzeaz gain, beste zenbait magnitude kalkulatu ahal izango ditugu, problemetako soluzioetan aplikatu beharko ditugunak:

$p(x)$ X aldagai estokastikoaren PDFa dela jakinda, X -en definizio-eremuko funtzio arbitrario bat definituko dugu, $h(x)$. Era honetan definitzen da p -rekiko h -ren *itxarotako balioa*:

$$\langle h \rangle \equiv \int_{x \in \mathbb{D}} h(x)p(x)dx \quad (2.5) \quad \langle h \rangle \equiv \sum_i h(x_i)p(x_i) \quad (2.6)$$

Itxarotako balioen kasu partikular garrantzitsu bat *momentuak* dira. Era honetan definitzen da $p(x)$ PDFaren n -garren momentua:

$$\langle x^n \rangle \equiv \int_{x \in \mathbb{D}} x^n p(x)dx \quad (2.7) \quad \langle x^n \rangle \equiv \sum_i x_i^n p(x_i) \quad (2.8)$$

n -ri ematen diogun balioaren arabera, $p(x)$ PDFaren formarekin lotutako magnitude ezberdinak kalkula ditzakegu. Orokorrean, $n = 0$ eta $n = 1$ izango dira interesatuko zaizkigunak. $n = 0$ hartuta, $p(x)$ -en zerogarren momentua lortuko dugu, zeina lehen ikusi dugun $p(x)$ -en normalizazio-baldintza baino ez den:

$$\langle x^0 \rangle = 1 = \int_{x \in \mathbb{D}} p(x)dx \quad (2.9)$$

$n = 1$ hartuz, aldiz, $p(x)$ -ren lehenengo momentua izango dugu, $p(x)$ -en *batezbestekoa* deritzona. μ hizkia adierazten da:

$$\langle x \rangle = \mu \equiv \int_{x \in \mathbb{D}} xp(x)dx \quad (2.10) \quad \langle x \rangle = \mu \equiv \sum_i x_i p(x_i) \quad (2.11)$$

p -en itxarotako balioa ere esaten zaio. Aurrekoez gain, momentuen mota berezi bat ere badago, *momentu zentral* izeneko. Honela dago definituta n -garren momentu zentrala:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^n \rangle \equiv \int (x - \langle x \rangle)^n p(x)dx \quad (2.12)$$

Momentu zentralen kasuan, zerogarren eta lehenengo momentuak trivialak dira (1 eta 0 dira, hurrenez hurren). Garrantzia handikoa da, aldiz, bigarren momentu zentrala, *bariantza* deiturikoa. X aldagai estokastikoaren bariantza σ_X^2 edo $\text{Var}(x)$ eran adierazten da, eta honela definituta dago:

$$\begin{aligned} \sigma^2 = \text{Var}(x) &= \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \int (x - \langle x \rangle)^2 p(x)dx \\ &= \int (x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2) p(x)dx = \langle x^2 \rangle - 2\langle x \rangle\langle x \rangle + \langle x \rangle^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \end{aligned} \quad (2.13)$$

Bariantzaren erro karratua *desbideratze estandarra* da. x_i neurketa jakin baten eta X -en batezbestekoaren (μ) arteko batez besteko diferentzia edo desbideratzea adierazten du:

$$\sigma = \sqrt{\sigma^2} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \quad (2.14)$$

2.3 PDFaren laginketa

Aldagai estokastiko bakoitza, X , bere banaketak edo PDFak bereizten du; hau da, $p(x)$ funtzioa da X -en bereizgarria. Probabilitatearen dentsitate-funtzioak, bai kasu diskretuan bai jarraituan, X aldagai estokastikoa nolako maiztasunarekin edo patroirekin behatuko dugun deskribatzen du; eta X -i buruz lortu behar den informazioa PDFa laginduz ateratzen da.

Monte Carlo metodoaren funtsezko pausoa gure sistema edo datu multzoa deskribatzen duen $p(x)$ PDFaren laginketa egitea izango da. Gure sistemaren oinarria X aldagai estokastikoa denez, egin beharreko laginketa ausazko zenbakiak sortzean datza. Horretarako, ausazko zenbakien sorgailuak erabiltzen dira, $[0, 1]$ tartean uniformeki banatutako zenbakiak sortzen dituztenak. Lehen esan dugun bezala, sorgailu horiek sortzen dituzten zenbakiak ez dira benetan ausazkoak izango; ausazko zenbakien hurbilketak baizik. Hala ere, gaur egun existitzen diren algoritmoak hurbilketa horiek behar bezain ongi egiteko gai dira eta, beraz, lan honetan ez dugu bereizketarik egingo *ausazko* eta *sasi-ausazko* zenbakien artean [4]. Gfortran konpilatzaileak erabiltzen duen algoritmoa *xoshiro256*** izeneko da. Errotazioak eta *shift*-ak erabiltzen ditu ausazko zenbakiak sortzeko. Erabilera orokorreko algoritmo

bat da, $2^{256} - 1$ -eko periodoa duena. Periodoa hain handia ez denez, ez da gaur egun ezagutzen den algoritmorik zehatzena (guk emango diogun erabilerarako ez dugu gehiago behar), baina kalitate horretako ausazko zenbakiak sortzeko gai den algoritmoen artean azkarrenetakoa da.

Lagintzeko sinpleena den banaketa *banaketa uniforme* da. Izan ere, banaketa uniforme $[a, b]$ tartean uniformeki banatutako ausazko zenbakien multzoa baino ez da:

$$p(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{bestela} \end{cases} \quad (2.15)$$

Hau da, $r \in [0, 1]$ sorgailutik lortu dugun ausazko zenbakia izanik, aldagai aldaketa simple bat eginez $[a, b]$ tartean dagoen x zenbakia lortuko dugu¹:

$$x = a + (b - a)r \quad (2.16)$$

Pausu hori N aldiz errepikatuz gero, $p(x)$ banaketa jarraitzen duten N zenbakiz osatutako lagina lortuko dugu, $\{x\}$. Baina, orokorrean, laginketa egitea ez da hain erraza izango, jarraitu beharreko prozedura banaketaren CDFaren alderantzizkoa kalkulatzeko oinarritzen baita. Hala ere, zenbait kasutan oso erabilgarria izan daiteke:

Prozeduraren hasierako puntua beti izango da banaketa uniforme, zuzenean sorgailuek emandako ausazko zenbakiak, hain zuzen [3]:

$$p(x)dx = \begin{cases} dx, & 0 \leq x \leq 1 \\ 0, & \text{bestela} \end{cases} \quad \text{non } p(x) = 1 \text{ izango den.}$$

$x \rightarrow y$ aldagai aldaketa egiten dugunean, probabilitatea kontserbatu beharra dagoenez, $p(x)dx = p(y)dy$ bete beharko da. $p(x) = 1$ izanik, honela geratzen da berdintza:

$$p(y)dy = dx \quad (2.17)$$

(2.17) ekuazioa integratuz, adierazpen hau lortuko dugu:

$$x(y) = \int_0^y p(y')dy' \quad (2.18)$$

zeina $p(y)$ -ren CDFa baino ez den, $P(y)$. Azkenik, $y(x)$ lortu nahi dugunez, y askatzea baino ez zaigu geratzen, $x(y)$ funtzioaren alderantzizkoa kalkulatu. Lehen esan dugun bezala, $[0, 1]$ tarteko N ausazko zenbaki sortuz gero, $p(y)$ banaketa jarraitzen duen N balioz osatutako $\{y\}$ lagina lortuko dugu.

Baina alderantzizkoa kalkulatzeko askotan ez da posible izango (edo benetan konplexua izan daiteke). Kasu horietan, laginketak egiteko beste metodo batzuk erabili beharko dira, 2.5.1 eta 2.5.2 ataletan aztertuko ditugunak.

¹ D dimentsioko aldagai bat izango bagenu, D ausazko zenbaki sortu beharko genituzke, eta bakoitzari dagokion aldagai aldaketa aplikatu.

2.4 Monte Carlo integrazioa

Monte Carlo bidezko integrazioaren funtsa, gainontzeko Monte Carlo metodoen antzera, sistema jakin baten $p(\mathbf{x})^2$ PDFa jarraitzen duen $\{\mathbf{x}\}$ lagina lortzean datza. MC integrazioan, integratu beharreko $f(\mathbf{x})$ funtzioa lagin horretan ebaluatzen da, eta haren integrala estimatzen da, $\{\mathbf{x}\}$ laginean oinarrituz.

Monte Carlo bidezko integrazio metodo sinpleenetan, aukeratzen den $p(\mathbf{x})$ banaketa uniformea izaten da, hau da, $p(\mathbf{x}) = 1$, $\mathbf{x} \in V$. Erabiltzen den lagina, beraz, $V \subset \mathbb{R}^n$ bolumenean uniformeki banatutako N puntuz osatua egongo da: $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{N-1}$. Hauxe izango da metodo horren bitartez estimatuko den $f(\mathbf{x})$ -ren integralaren adierazpena [4]:

$$F = \int_V f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \approx V\langle f \rangle \pm V\sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}} \quad \text{non} \quad \langle f^k \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f^k(\mathbf{x}_i) \quad (2.19)$$

” \pm ” ikurraren ostean datorren terminoa desbideratze estandarra da, integralaren errorearen estimazio bat. Ez dugu errorearen muga zehatz bezala ulertu behar, errorearen gutxi gora-beherako balio moduan baizik.

Metodo hori aproposa izan daiteke $f(\mathbf{x})$ funtzioak V -n duen forma *leuna* bada. Baina V bolumenean funtzioa oso pikutsua bada, eta nulua bada puntu askotan, $\{\mathbf{x}\}$ -eko puntu askok F -ri egingo dioten ekarpena arbuigarria izango da. Ondorioz, beharko dugun puntu kopurua, N , oso handia izan beharko da, tarte pikutsuan zehaztasuna behar bezain ona izan dadin.

Hori saihesteko, $\{\mathbf{x}\}$ lagina beste era batera lortzen saia gaitzke: puntuak banaketa uniformea jarraituz aukeratu beharrean, gure funtzioari egokituiko zaion $p(\mathbf{x})$ banaketa bat jarraituz aukeratu ditugu. Era horretan ebazteko aproposak diren integral mugatuek adierazpen hau daukate [2]:

$$F = \int_V p(\mathbf{x})f(\mathbf{x})d\mathbf{x} \quad \text{non} \quad p(\mathbf{x}) \geq 0, \quad \int_V p(\mathbf{x})d\mathbf{x} = 1 \quad (2.20)$$

Integrala ebazteko, $p(\mathbf{x})$ banaketa jarraitzen duen lagina lortu beharko dugu. F_N F -ren estimazioa izango da, eta era honetan kalkulatu da:

$$F_N = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} f(\mathbf{x}_i) \quad (2.21)$$

non \mathbf{x}_i $\{\mathbf{x}\}$ -eko i -garren puntua den. F_N F -ren estimazioa denez, hurrengo hau idatz dezakegu:

$$F_N = F + \text{errorea}^3 \quad (2.22)$$

²Atal honetan eta hurrengoan, \mathbf{x} hizki larriaz adieraziko dugu, aldagai estokastikoa n dimentsioko espazioan adierazteko, orokortasunik galdu gabe.

³(2.20) adierazpeneko integrala existitzen bada, Monte Carloren oinarrizko teoremak esaten digu $F = \langle F_N \rangle$ izango dela.

Bariantza existitzen bada, (2.22) ekuazioko errorea ausazko zenbaki bat izango da, zeinaren batezbestekoa 0 den, eta zeinaren zabalera, N handien kasurako, era honetan adieraz daitekeen:

$$|\text{errorea}| = \varepsilon \cong \frac{\sigma_1}{N^{1/2}} \quad \text{non} \quad \sigma_1^2 = \int_V f^2(\mathbf{x})p(\mathbf{x})d\mathbf{x} - F^2 \quad (2.23)$$

(2.23) adierazpenetik ondoriozta daiteke Monte Carlo metodoarekin integralaren konbergentzia astiro lortzen dela ($\sim N^{1/2}$). Hala ere, oso metodo erabilgarria da integralaren dimentsio kopurua handia denean, N ez baitago dimentsio kopuruaren menpe. Horregatik, metodo deterministekin baino efizientzia handiagoa lortzen da, eta programazio aldetik errazagoa da N altuak kontsideratzeko moldaketa egitea.

2.5 Markov-kateak. Ibiltari askeak

Lan honetan aztertuko ditugun problemak ebazteko Markov-kateetan oinarritutako metodoak erabili ditugu. Markov-kateek $p(\mathbf{x})$ distribuzio jakin bat jarraitzen duen \mathbf{x}_i balioz osatutako $\{\mathbf{x}\}$ lagina lortzea ahalbidetzen dute.

Markov-katea konfigurazio ezberdinen segida bat da, zeinetan sistemak, pauso bakoitzean, konfigurazio batetik beste batera salto egin dezakeen, trantsizio-probabilitate jakin bat jarraituz. Sistemak etorkizunean izango duen konfigurazioa uneko konfigurazioari erreparatuz aurrea hartzen da, eta aukeraketa hori ez dago sistemak aurretik izan dituen segidaren edo prozesuen menpe. Gainera, hurrengo konfigurazioa aukeratzeko egiten den iragarpen hori sistemaren historia kontuan hartuz egin ditzakegun iragarpenak bezain ona izango da [5]. Propietate horri, konfigurazio berriak sistemaren historiarekiko menpekotasunik ez izateari, *Markov-en propietatea* esaten zaio. Markov-katea, beraz, Markoven propietatea betetzen duen prozesu estokastiko bat da.

Markov-kateek egoera edo konfigurazio kopuru finitua daukate. i eta j egoera bikotea hartuz, i egoeratik j egoerara salto egiteko probabilitate bat egongo da, p_{ij} trantsizio-probabilitatea, i bakoitzerako $\sum_j p_{ij} = 1$ izanik.

Orain aztertuko ditugun metodoak *Markov Chain Monte Carlo (MCMC)* metodoak izango dira. Metodo hauetan, sistemaren probabilitate-dentsitatearen ($p(\mathbf{x})$) proportzionala den banaketa bat daukagu, $\pi(\mathbf{x})$, normalizatuta egoteko beharrik ez duena. MCMC metodoek lagintze-puntuak *zuzenean* $p(\mathbf{x})$ probabilitatea handiagoa den puntuetan ipintzen dituzte, konputazio-kostua murriztuz. Puntu horiek ez dira independenteki aukeratzen⁴, Markov-kateak jarraituz baizik. Lortutako $\{\mathbf{x}\}$ puntuak lokalki koerlazioztatuta egongo dira, baina azkenik, kateak multzoko \mathbf{x}_i puntu guztietara iristea lortuko du⁵, $\pi(\mathbf{x})$ proportzioa jarraituz [4].

Markov-en propietatea betetzen denez, \mathbf{x}_i puntua aukeratzean erabiliko dugun distribuzioa \mathbf{x}_{i-1} -en menpe baino ez da egongo, eta \mathbf{x}_{i-1} -etik \mathbf{x}_i -rako trantsizio-

⁴Metropolisek 50. hamarkada hasieran proposatutako metodoa.

⁵Propietate horri *ergodizitatea* esaten zaio.

probabilitatea $p(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_{i-1})$ itxurakoa izango da. Aukeratzen den $p(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_{i-1})$ funtzioak *oreka zehatzaren* ekuazioa bete beharko du [3]:

$$\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}_1)p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) = \boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}_2)p(\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2) \quad (2.24)$$

(2.24) ekuazioa betetzen bada, Markov-kateak $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x})$ ergodikoki lagindu ahalko du. Ekuazio horrek oreka fisikoa irudikatzen du $\mathbf{x}_1 \rightarrow \mathbf{x}_2$ trantsizioan. Hau da, \mathbf{x}_1 eta \mathbf{x}_2 $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}_1)$ eta $\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x}_2)$ proportzioekin *gertatzen* badira, orduan bi noranzkoen trantsizio-erritmoa berbera izango da. Trantsizio-erritmoa dentsitatearen ($\boldsymbol{\pi}(\mathbf{x})$) eta trantsizio-probabilitatearen ($p(\mathbf{x}_i|\mathbf{x}_{i-1})$) arteko biderketa da.

Markov-kateekin lotuta, ibiltari askeak definituko ditugu. Ibiltari askeak ausazko pausoz osatutako segidak deskribatzen dituzten prozesu estokastikoak dira. Ibiltari askea Markov-katearen egoera jakin batean hasiko da. Aldiune jakin batean i egoeran egongo da; eta hortik, hurrengo egoera, j , ausaz aukeratuko da, p_j probabilitatearekin. Prozesu horretan, *aldiunea* ez dago beti denbora fisikoarekin lotuta; orokorrean, n aldiunea Markov-katearen n -garren pausoa izango da. Ibiltari askeen oinarrizko propietatea da, limitean, epe luzera ibiltariak i egoeran egoteko izango duen batez besteko probabilitatea haren hasierako egoerarekiko independentea dela.

Sare batean zehar hedatzen den ibiltaria ibiltari askeen artean oso erabilia den metodoa da. Ibiltaria sareko puntu batetik hasiko da. Pauso bakoitzean puntu berri bat aukeratuko da, eta ibiltariak bertara egingo du salto, p probabilitatearekin. Ibiltariak duen posizio bakoitzerako egoera ezberdin bat kontsideratuko da. Ibiltariak L pauso egin ostean, edota sareko puntu jakin batera iristean, amaituko du zikloa. Prozesua behin eta berriz errepikatzen da behar adina ziklo burutu arte. Metodo honen kasu sinplea ondoz ondoko puntuetara baino higitzen ez den ibiltaria da; hau da, i puntuan (egoeran) egonda j puntu berria aukeratzeko orduan, i -ren lehen bizilagunak diren puntuak baino ezingo dira kontsideratu. Horietako bat ausaz aukeratuko da, p_j probabilitatearekin. $1D$ -ko sarearen kasuan (lerro zuzena), ondoz ondoko 2 puntu baino ez ditu izango puntu bakoitzak; $2D$ -ko kasuan lau puntu, eta $3D$ -ko kasuan sei.

2.5.1 Metropolis-Hastings algoritmoa

Metropolisek proposatutako algoritmoak MCMC metodo egingarriak lortzen lagundu zuen. Hala ere, $p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1)$ trantsizio-probabilitatearen funtzioa ezezaguna bada, ezin da algoritmoa aurrera atera. Hastings-ek Metropolisen lana orokortu zuen, prozedura orokor bat proposatuz [4]:

1. $q(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1)$ *proposamen-banaketa* bat aukeratzen da. Multzoko puntu guztietara iristeko gai den edozein banaketa izan daiteke, $q(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) = q(\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2)$ betetzen bada⁶. Pauso honetan datza orokortasuna.
2. \mathbf{x}_1 hasierako puntutik abiatuta, \mathbf{x}_p puntua proposatzen da, $q(\mathbf{x}_p|\mathbf{x}_1)$ banaketa jarraituko duen ausazko zenbaki baten bitartez.

⁶Probabilitate bera egon behar da $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}'$ eta $\mathbf{x}' \rightarrow \mathbf{x}$ trantsizioak gertatzeko.

3. Puntu berria $\alpha(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_p)$ probabilitatearekin onartuko da, era honetan kalkulatu dena:

$$\alpha(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_p) = \min \left(1, \frac{\pi(\mathbf{x}_p) q(\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_p)}{\pi(\mathbf{x}_1) q(\mathbf{x}_p|\mathbf{x}_1)} \right) \quad (2.25)$$

Horretarako, $[0, 1]$ tartean egongo den ausazko zenbaki bat sortuko da, r . \mathbf{x}_p onartu egingo da $r \leq \alpha(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_p)$ betetzen bada, eta $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_p$ izango dugu. Baldintza betetzen ez bada, proposamena baztertu egingo da, eta $\mathbf{x}_2 = \mathbf{x}_1$ izango dugu.

Prozesu hori jarraituz, $p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) = q(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1)\alpha(\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2)$ trantsizio-probabilitatea lortzen ari gara ($\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$ izanik).

Problemetan erabiliko dugun $q(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1)$ proposamen-banaketa banaketa uniforme izan da, era horretan asko sinplifikatzen baita $\alpha(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ -ren adierazpena.

2.5.2 Von Neumann algoritmoa

Von Neumann-en algoritmoa MCMC metodoetan laginketak egiteko erabiltzen den beste metodoetako bat da, zeintzuetan laginketako puntuek $p(x)$ banaketa jakin bat jarraitzen duten. Onartze/baztertze- edota, zuzenean, baztertze-metodoa ere esaten zaio. Von Neumannek erabiltzen zuen algoritmo bat da, baina Buffon Kondearen orratzaren problemaren garaitik da ezaguna, 18.mendetik.

Algoritmoa sinplea da, bi pausoko prozedura bat jarraitu behar da [2]:

1. Ausazko $r_1 \in [0, 1]$ aldagaia sortu eta, horrekin, interesatzen zaigun $[a, b]$ tartean egongo den x_1 balioa lortuko dugu, (2.16) adierazpenaren bitartez.
2. Bigarren $r_2 \in [0, 1]$ aldagaia sortuko dugu. $M_0 p(x)$ banaketaren maximo absolutua izanik, $p(x_1) < M_0 r_2$ erlazioa betetzen bada x_1 puntua onartuko dugu. Betetzen ez bada, x_1 baztertu eta hurrengo puntu bat proposatuko da.

Metodoa n dimentsiora orokortu nahiko bagenu, lehenengo pausoan n ausazko aldagai sortu beharko genituzke, $\{r_i\}$, eta bakoitza dagokion $[a_i, b_i]$ tarteko x_i aldagai bihurtu.

Metodo honen desabantailetakoa bat efizientzia baxua da; izan ere, kasu batzuetan, puntu asko baztertzen dira bat onartu ahal izan arte. Baina erabilgarria da $p(x)$ -en normalizazio konstantea ezagutzen ez den edo kalkulatu zaila den kasuetarako, $\{x\}$ lagin egoki bat lortzeko $p(x)$ -ek ez baitu normalizatuta egon behar.

3. kapitulua:

Monte Carlo metodoen aplikazioak zenbait problema fisikotan

Atal honetan, Monte Carlo metodoak fisikako zenbait ataletan nola aplikatu daitezkeen ikusiko dugu. Horretarako, hiru problema aukeratu dira, metodoak dituen aplikazio interesgarrietako batzuk aztertzeko asmoz. Monte Carlo metodoa berria da guretzat, graduan zehar ez baitugu aukerarik izan behar bezala aztertzeko eta, beraz, aukeratutako problemak ez dira konplexuegiak izango, baina metodoaren erabilgarritasuna eta moldakortasuna ezagutzeko balioko digute. Ahal den neurrian, lortutako emaitzak beste metodo numeriko batzuekin lortutako emaitzekin alderatuko ditugu, bai eta soluzio analitikoekin ere.

Atal honetan zehar egin diren simulazioetarako programak egiteko Fortran programazio lengoia erabili da, eta *gfortran* konpilatzailearen bitartez konpilatu dira.

3.1 Poissonen ekuazioa

Poissonen ekuazioa izango da lehen problema. Bi dimentsioko Poissonen ekuazioa ebatziko dugu koordenatu kartesiarretan. Gainazal errektangeluar bat kontsideratuko dugu, zeinak mugalde-baldintza jakin batzuk izango dituen. Mugalde-baldintzetako problema bat izango dugu, beraz. Hemendik abiatuko gara:

$$\begin{aligned}\nabla^2\Phi(x, y) &= \frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Phi}{\partial y^2} = g(x, y) \\ \Phi(x, y)\Big|_{\Gamma} &= F(s), \quad s \in \Gamma\end{aligned}\tag{3.1}$$

Lehenengo pausua ekuazioa diskretizatzea izango da. Horretarako, gure ekuazio deribatu partzialak diferentzia finituko hurbilketen bitartez adieraziko ditugu, gainazala h_x zabalerako eta h_y altuerako laukitxoetan banatuz, zeintzuek $2D$ -ko planoan errektangelu bat osatzen duten. Errektangelua $n_x \times n_y$ puntuz osatutako sarea izango da, x ardatzeko bi punturen arteko distantzia h_x eta y ardatzeko bi punturen arteko distantzia h_y direlarik. Gainazala $x = a$, $x = b$, $y = c$ eta $y = d$ zuzenak definitzen dutenez, honela lortuko ditugu h_x eta h_y balioak:

$$h_x = \frac{b - a}{n_x - 1}; \quad h_y = \frac{d - c}{n_y - 1}\tag{3.2}$$

Deribatu partzialen adierazpena lortzeko, diferentzia finituko formulak behar ditugu. Taylorren garapenaren bitartez lortuko ditugu, Taylorren polinomio bidezko interpolaketaren bitartez, alegia. Hau da $f(x)$ funtzio baten Taylorren garapenaren adierazpena, x_0 puntu baten inguruan:

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + f''(x_0)\frac{(x - x_0)^2}{2!} + \dots \quad (3.3)$$

Bigarren ordenako deribatuak kalkulatzeko, Taylorren bigarren mailako polinomioa hartuko dugu kontuan [6]. Deribatuen *erdi-puntuko* formulak kalkulatuko ditugu; era horretan, $f(x)$ funtzioak x_0 puntuan duen malda x_0 -ren aurreko eta atzeko puntuek deskribatuko dute. Hortaz, $f(x + h)$ eta $f(x - h)$ kalkulatuko ditugu, x puntuan zentratuta:

$$f(x + h) \approx f(x) + f'(x)((x + h) - x) + f''(x)\frac{((x + h) - x)^2}{2} = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x)$$

$$f(x - h) \approx f(x) + f'(x)((x - h) - x) + f''(x)\frac{((x - h) - x)^2}{2} = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x)$$

Horiek biak batuz lortuko dugu nahi genuen formula:

$$f''(x) \approx \frac{f(x + h) - 2f(x) + f(x - h)}{h^2} \quad (3.4)$$

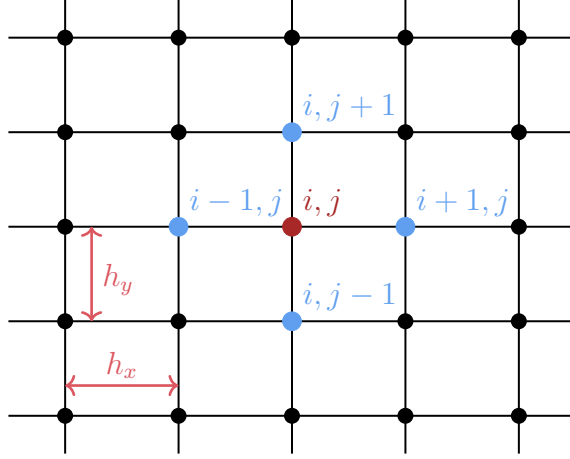
Formula hori Poissonen ekuazioan aplikatuko dugu. Ardatz bakoitzean h -ren balio bat, *pausu* bat, izango dugu, printzipioz ezberdina izango dena: h -ren ordez, x ardatzean h_x izango dugu, eta y ardatzean h_y . Honela geratuko zaigu Poissonen ekuazioa diferentzia finituen formulak aplikatu ostean:

$$\frac{\Phi(x + h_x, y) - 2\Phi(x, y) + \Phi(x - h_x, y)}{h_x^2} + \frac{\Phi(x, y + h_y) - 2\Phi(x, y) + \Phi(x, y - h_y)}{h_y^2} = g(x, y) \quad (3.5)$$

Ekuazio horretatik $\Phi(x, y)$ askatu nahi dugu, soluzioaren adierazpena lortzeko:

$$\Phi(x, y) = \frac{1}{2\left(1 + \frac{h_x^2}{h_y^2}\right)} \left\{ \Phi(x + h_x, y) + \Phi(x - h_x, y) + \frac{h_x^2}{h_y^2} (\Phi(x, y + h_y) + \Phi(x, y - h_y)) - h_x^2 g(x, y) \right\} \quad (3.6)$$

λ aldagaia definituko dugu, non $\lambda = h_x/h_y$ izango den. Gainera, gainazala diskretizatuta dago, eta beraz x eta y aldagaien ordez, i eta j aldagai diskretuak izango ditugu, hurrenez hurren. Beraz, hurbilketa hauek izango ditugu Φ -ren adierazpenean: $\Phi(x, y) = \Phi_{i,j}$, $\Phi(x + h_x, y) = \Phi_{i+1,j}$, eta abar; eta $g(x, y) = g_{i,j} \equiv g(x_i, y_j)$ izango da. i eta j aldagai diskretuek x_i -ren eta y_i -ren balioak emango dizkigute, $2D$ -ko sare bat osatzen dutelarik:



Irudia 3.1: Diskretizatutako $2D$ -ko gainazaleko puntuek osatzen duten sarea.

Adierazpen horiek kontuan hartuta, $\Phi(x, y)$ -ren hurrengo hurbilketa lortzen dugu:

$$\Phi_{i,j} = \frac{1}{2(1 + \lambda^2)} \left\{ \Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \lambda^2[\Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1}] - h_x^2 g(x_i, y_j) \right\} \quad (3.7)$$

(3.7) ekuazioa aztertuz, ikus daiteke $g(x_i, y_j)$ funtzioaz gain, $\Phi_{i,j}$ -k beste lau ekarpen dituela. Hau da, $\Phi_{i,j}$ -ren balioa haren inguruko lau puntuetako balioek zehazten dute, bakoitzak bere *pisuarekin*. Honela berridatz genezake (3.7) ekuazioa:

$$\Phi_{i,j} = w_{01}\Phi_{i+1,j} + w_{02}\Phi_{i,j+1} + w_{03}\Phi_{i-1,j} + w_{04}\Phi_{i,j-1} + \mu g(x_i, y_j) \quad (3.8)$$

non $\mu = -\frac{h_x^2}{2(1+\lambda^2)}$ den. Honako hauek dira pisuen balioak:

$$w_{01} = w_{03} = \frac{1}{2(1 + \lambda^2)}, \quad w_{02} = w_{04} = \frac{\lambda^2}{2(1 + \lambda^2)} = \lambda^2 w_{01}$$

Hori horrela, (x_0, y_0) puntu jakin bateko Φ -ren balioa kalkulatu nahiko bagenu, adierazpen hau izango genuke:

$$\Phi_0 = \sum_{k=1}^4 w_{0k} \Phi_k + \mu g_0 \quad (3.9)$$

non $g_0 \equiv g(x_0, y_0)$ eta $\Phi_0 \equiv \Phi(x_0, y_0)$ diren. Arazoa da, Φ_k -ren balioak ere ezezagunak direla. Hori dela eta, ibiltari aske bat erabiliko dugu, pauso bakoitzean Φ_0 -ren estimazio berri bat kalkulatzen joango dena.

(3.9) ekuazioan ikusten denez, pisuak zehazten du zer nolako eragina duen ekarpen bakoitzak $\Phi_{i,j}$ -rengan; edo, Monte Carlo metodoen ikuspuntutik begiratuta, ibiltari aske batek zer nolako probabilitatea duen puntu batetik, (x_0, y_0) , haren ondoz ondoko 4 puntuetako batera trantsizioa egiteko. Probabilitate moduan uler ditzakegu balio horiek, hortaz [7]. Izan ere, pisu bakoitzaren balioa aztertzen badugu, honako hau lortuko dugu:

$$\sum_{k=1}^4 w_{0k} = \frac{1}{2(1 + \lambda^2)} + \frac{1}{2(1 + \lambda^2)} + \frac{\lambda^2}{2(1 + \lambda^2)} + \frac{\lambda^2}{2(1 + \lambda^2)} = 1$$

Hau da, w_{0k} balioek PDF diskretu bat osatuko dute, non aldagai estokastikoa k den, eta definizio-eremua $\mathbb{D} = \{1, 2, 3, 4\}$. Beraz, (3.9) ekuazioa aplikatu beharrean, Φ_0 -ren *estimazio* bat egingo genuke, $z^{(1)}$ izendatuko duguna:

$$z^{(1)} = \Phi_m + \mu g_0 \quad (3.10)$$

non $m(x_0, y_0)$ puntuaren ondoz ondoko puntuetako bat den. Puntu hori zein izango den zehazteko, ausazko aldagai bat erabiliko dugu, eta irteten den balioaren arabera m aldagaiak k -ren zein balio hartuko duen zehaztuko dugu: 1, 2, 3 edo 4. Gure ausazko aldagaia $\xi \in [0, 1)$ izango da, eta ausazko zenbakien sortzaile bat erabiliz joango gara balioak ematen. m -k har ditzakeen balioen probabilitateak w_{0k} izango dira. Era honetan simulatuko dugu m -ren aukeraketa:

```

call random_number( $\xi$ )
if ( $\xi < w_{01}$ ) then
    m = 1
else if ( $\xi < w_{01} + w_{02}$ ) then
    m = 2
else if ( $\xi < w_{01} + w_{02} + w_{03}$ ) then
    m = 3
else
    m = 4
end if

```

Baina estimazio horretan, ez dugu Φ_m -ren balioa ezagutzen (mugaldeko puntu bat ez bada). Beraz, Φ_0 -rekin egin dugun moduan, Φ_m ere estimatu egingo dugu: $\Phi_m \rightarrow \Phi_n + \mu g_m$. Kalkulatuko duguna Φ_0 -ren bigarren estimazioa izango denez, $z^{(2)}$ izendatuko dugu:

$$z^{(2)} = \Phi_n + \mu(g_0 + g_m)$$

Estimazio berri bat egiten dugun bakoitzean, gainazaleko puntu berri batean egongo da ibiltari askea, aurretik geneukan puntuaren alboko lau puntuetako batean: $(x_0 + h_x, y_0)$, $(x_0, y_0 + h_y)$, $(x_0 - h_x, y_0)$ edo $(x_0, y_0 - h_y)$. ξ aldagaiaren bitartez k -ren balio bat finkatzeak zehazten digu lau puntu horietako zeinetara egingo duen ibiltariak *trantsizioa*. Ibiltaria mugaldeko edozein puntutara iristen denean amaituko da ibilbidea, puntu horietan jada ez baitugu estimazio berririk egin beharko: mugalde-baldintzek zehazten dute Φ -ren balioa zein den. Puntu horietan, $\Phi(x_i, y_j) = F(x_i, y_j)$ izango dugu.

Puntu berri bakoitzerako estimazio bat eginez, azken estimazioaren adierazpen hau lortuko dugu, ibiltariaren l -garren pasuan:

$$z^{(l)} = F_j + \mu \sum_{k=0}^{j-1} g_k \quad (3.11)$$

Era horretan, hasieran finkatu dugun (x_0, y_0) puntuko Φ -ren estimatutako balioa izango genuke. Baina soluzioak errore estatistiko txikiagoa izan dezan, N aldiz

errepikatu beharko dugu prozesu hori, z^l -ren N estimazio lortu ahal izateko; hau da, $\hat{\Phi}$ -ren N lagin lortzeko. Ibiltari askeak N ibilbide egin ostean, (x_0, y_0) puntuko Φ -ren balioa estimatutako batezbestekoaren eta desbideratze estandarren bitartez adieraziko dugu:

$$\bar{\Phi}_0 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i \quad (3.12)$$

$$\sigma_N^2 \equiv \sigma_{\bar{\Phi}_0}^2 = \frac{\sigma_{\Phi_0}^2}{N} = \frac{1}{N} \left(\frac{N}{N-1} [\langle z^2 \rangle - (\bar{\Phi}_0)^2] \right) = \frac{1}{N-1} [\langle z^2 \rangle - (\bar{\Phi}_0)^2] \quad (3.13)$$

Bariantza kalkulatzean, kontuan izan behar dugu estimazio bat egiten ari garela, ez baitakigu μ -ren balioa zein den, haren estimazioa baino ez dugu ezagutzen: $\hat{\mu} = \bar{\Phi}_0$. Horregatik, $\sigma_{\bar{\Phi}_0}^2$ -ri *Bessel-en zuzenketa faktorea* biderkatu behar diogu, $\frac{N}{N-1}$. Honela geratuko zaigu $\Phi(x_0, y_0)$ -ren adierazpena:

$$\Phi(x_0, y_0) = \bar{\Phi}_0 \pm \sigma_{\bar{\Phi}_0} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i \pm \frac{1}{\sqrt{N-1}} [\langle z^2 \rangle - (\bar{\Phi}_0)^2]^{1/2} \quad (3.14)$$

Sareko puntu guztietarako egin beharko dugu gauza bera: puntu bat finkatu, puntu horretatik N ibiltari aske implementatu, eta amaierako estimazioa kalkulatu. Era horretan gainazal osoan zehar $\Phi(x, y)$ -k duen balioa lortuko dugu.

3.1.1 Inplementazioa

Inplementatu egingo dugu aztertu dugun metodoa, (3.1) ekuazioan $g(x, y)$ funtzioa eta mugalde-baldintzak finkatuta. Hau izango da ebatzi beharko dugun problema:

$$\nabla^2 \Phi(x, y) = \frac{x^2 + y^2}{10}$$

$$F(0, y) = 0, \quad F(10, y) = 10, \quad F(x, 0) = F(x, 10) = x$$

Daukagun gainazala 10×10 -eko azalera duen laukia da. Hori dela eta, ekuazioa diskretizatzeke, puntu kopuru bera hartuko dugu x eta y ardatzetan: $n = 101$. h_x eta h_y pausuak zehaztuko ditugu: gainazalaren zabalera eta luzera berdinak izanik, eta bi ardatzetan puntu kopuru bera izanik, pausu bera izango dugu bi ardatzetan:

$$h_x = h_y = \frac{10}{n-1} = \frac{1}{10}$$

Azkenik, sareko puntu bakoitzerako kalkulatu dugun estimazio kopurua, Monte Carlo lagin kopurua, finkatuko dugu: N . Argi dago kopuru horren arabera, $\Phi(x, y)$ -ren estimazioa hobea edo okerragoa izango dela. Horregatik, N -ren hiru balioentzat lortuko dugu soluzioa: $N = 100$, $N = 500$ eta $N = 1000$. Beraz, alde batetik $n \times n$ iterazio izango ditugu, sareko puntu guztiak hartzeko; eta bestetik, puntu bakoitzeko N ibiltari aske (lagin bakoitzeko bat). Horrez gain, beste kontagailu batek ibiltari askeak ibilbide bakoitzean egiten duen pauso kopurua zenbatuko du, ibilbide bakoitzean ezberdina izango dena.

Problema hau Monte Carlo metodoekin ebatzez gain, ohiko diferentzia finituen metodoekin ere ebatziko dugu, soluzioaren zehaztasuna alderatzeko.

Poissonen ekuazioa ekuazio diferentzial eliptikoa da. Era horretako ekuazioek mugalde-baldintzetako problemak deskribatzen dituzte, eta horiek ebatzeko erabiltzen den metodoetako bat *erlaxazio-metodoa* da. Poissonen ekuazioari $\frac{d\Phi}{dt}$ terminoa gehitzen zaio, eta errealitatean denborarekiko menpekotasunik ez duen arren, k iterazio egin ostean dugun egoera egonkorra ($\frac{d\Phi}{dt} = 0$) izango da soluzioa. Metodo hori implementatzeko, (3.5) ekuaziotik abiatuko gara, eta denboraren terminoa gehituko diogu:

$$\frac{\Phi_{i+1,j} + \Phi_{i-1,j} + \Phi_{i,j+1} + \Phi_{i,j-1} - 4\Phi_{i,j}}{h^2} - g(x_i, y_j) = \frac{d\Phi_{i,j}}{dt} \quad (3.15)$$

Azken terminoa ere diferentzia finituen bitartez adieraziko dugu, lehenengo ordenako deribatuaren aurreranzko formula erabiliz:

$$\frac{d\Phi_{i,j}}{dt} \approx \frac{\Phi_{i,j}(t + \tau) - \Phi_{i,j}(t)}{\tau} \equiv \frac{\Phi_{i,j}^{k+1} - \Phi_{i,j}^k}{\tau} \quad (3.16)$$

non τ denboran zeharreko pausua den, eta k diskretizatutako t aldagaiaren indizea. Soluzioa lortzeko, egoera egonkorreko $\Phi_{i,j}^{k+1}$ -en adierazpena lortu beharko dugu. Ohartu behar gara deribatu espazialeko terminoak k aldiunekoak direla. Formula hori goiko ekuazioan ordezkatzuz eta $\Phi_{i,j}^{k+1}$ askatuz, adierazpen hau lortuko dugu:

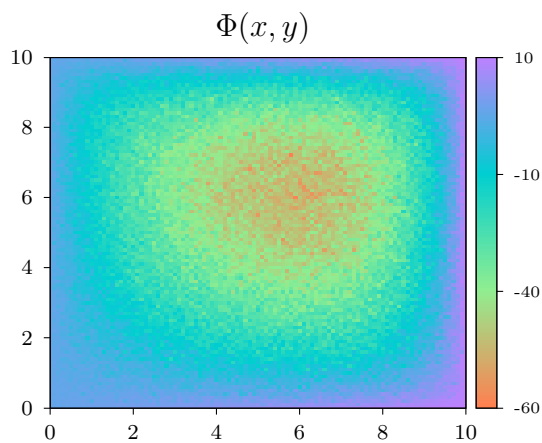
$$\Phi_{i,j}^{k+1} = \Phi_{i,j}^k + \frac{\tau}{h^2}(\Phi_{i+1,j}^k + \Phi_{i-1,j}^k + \Phi_{i,j+1}^k + \Phi_{i,j-1}^k - 4\Phi_{i,j}^k) - \tau g^k(x_i, y_j) \quad (3.17)$$

$\Phi_{i,j}^{k+1}$ egonkortu ahal izateko, (τ/h^2) parametroak har dezakeen balio maximoa erlazio honek zehazten du: $(\frac{\tau}{h^2}) \leq 1/4$. Erlaxazio-metodoan, egoera egonkorra baino interesatzen ez zaigunez (ez dugu denboran duen garapena aztertu behar), zuzenean $1/4$ balioa hartuko dugu, konbergentzia-parametro maximoari dagokiona.

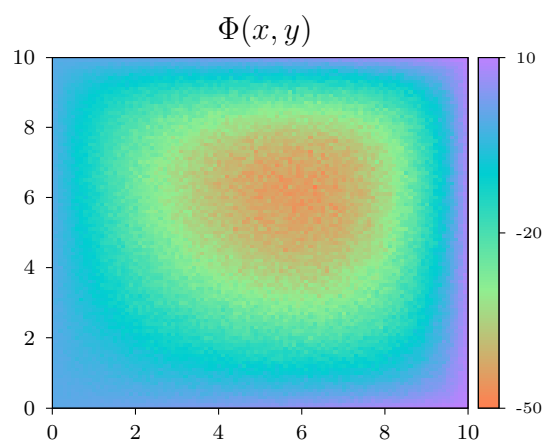
Hasierako aldiuneko egoera zein den finkatzea baino ez zaigu geratzen. Baina egoera hori arbitrarioki aukeratu dezakegu, denek amaituko baitute egoera egonkor berean; horregatik, $\Phi(x, y) = 0$ hartu dugu, x eta y -ren edozein baliorako. Goiko ekuazioa sareko puntu guztiei aplikatuko diegu, k -ren iterazio bakoitzean, egoera egonkorra lortu arte. Horri izango da problemaren soluzioa, lortu beharreko $\Phi(x, y)$.

3.1.2 Emaidak

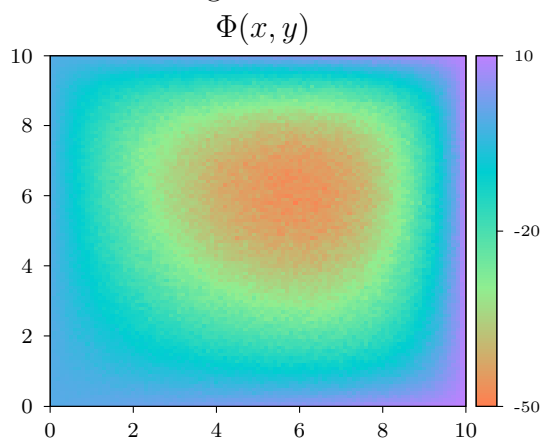
Hauek dira lortu ditugun soluzioak, bai Monte Carlo metodoekin ebatzita, bai erlaxazio-metodoaren bitartez ebatzita:



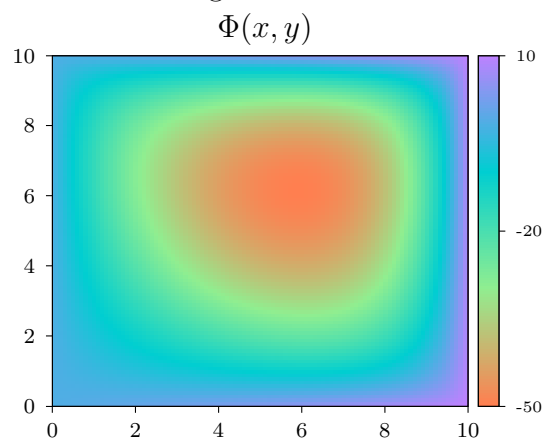
Irudia 3.2: $\Phi(x, y)$ funtzioa, $N=100$ Monte Carlo lagin hartuta.



Irudia 3.3: $\Phi(x, y)$ funtzioa, $N=500$ Monte Carlo lagin hartuta.



Irudia 3.4: $\Phi(x, y)$ funtzioa, $N=1000$ Monte Carlo lagin hartuta.



Irudia 3.5: $\Phi(x, y)$ funtzioa, erlaxazio-metodoaren bitartez ebatzita.

Lortutako grafikoak ikusita, aldez aurretik espero genezakeena ondoriozta daiteke. Printzipioz, Monte Carlo metodoa ez da bi dimentsioko Poissonen ekuazioa (edo antzeko ekuazio diferentzialak) ebazteko daukagun metodo numerikorik zehatzena ez efizienteena. Azken finean, MC metodoekin $\Phi(x, y)$ -ren balioa puntu bakarren kalkulatu daiteke aldiune bakoitzeko, eta dimentsio kopurua baxua denean, diferentzia finituen metodoekin lor dezakegun zehaztasuna lortzeko N ziklo kopurua handia izan beharko da; horregatik ez dira hain egokiak 3.2 eta 3.3 grafikoetako emaitzak.

Lortutako emaitzetan soluziorik zehatzena ematen diguten grafikoak 3.4 eta 3.5 dira. Bi grafiko horietan lortutako zehaztasuna antzekoa da; beti ere kontuan izanik Monte Carlo metodoek izaera probabilistikoa dutela, eta puntu bakoitzari dagokion errore estokastikoa kontuan izan beharko genukeela. Bestalde, kontuan eduki behar dugu Monte Carlo metodoa aplikatzean, helburua ez dela ahalik eta emaitza zehatzena lortzea; eta garrantzitsua da metodo honek dituen abantailak ezagutzea: oso metodo orokorra da, eta erraza da dimentsio kopuru handiagoa duten sistemetara moldatzea; implementatzeko ere erraza da, matrizeen bidezko algoritmoak erabiltzen dituzten metodoekin alderatuz; eta, gainera, dimentsio kopurua handitu ahala, Monte Carlo metodoak askoz efizienteagoak izango dira diferentzia finituetako metodoak baino, zehaztasun jakin bat lortzeko denbora ez delako hainbeste haziko puntu kopuruarekin.

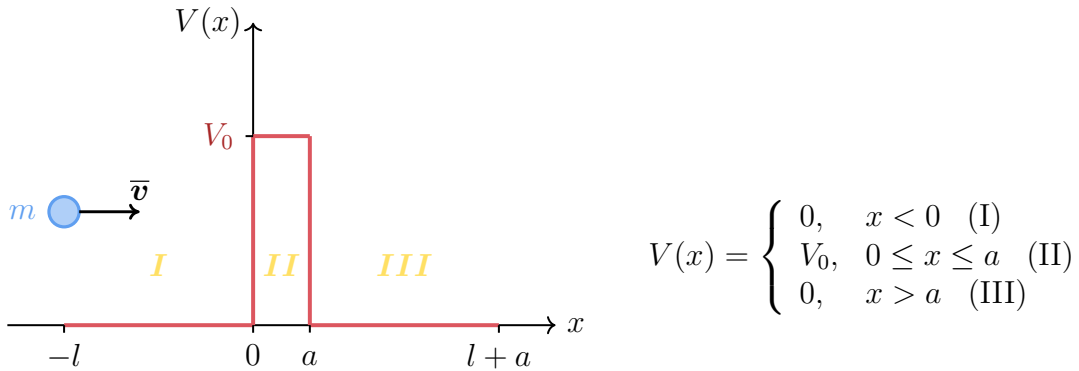
3.2 Uhin-funtzioaren irudikapena

Zenbait sistema fisiko, aurreko ataletan ikusi ahal izan dugun moduan, probabilitatearen dentsitate-funtzioek ezaugarritzen dituzte. Atal honetan, ausazko zenbakien eta sistemaren PDFaren bitartez, sistema fisikoaren irudi bidezko errepresentazioa egitea izango da helburua. Sistema kuantikoetan zentratuko gara, metodo hau oso aproposa baita uhin-funtzioa era kualitatiboago batean ulertu ahal izateko.

Ebatziko dugun probleman, m masako partikula bat izango dugu, zeina uhin-funtzio baten bitartez deskribatuko dugun, $\psi(x, t)$ eran adierazten dena. Sistemaren PDFa $\psi(x, t)$ -ren moduluaren karratua da, eta aztergai dugun partikula (x, t) puntuan egoteko probabilitatea adierazten du:

$$p(x, t) = |\psi(x, t)|^2 \quad (3.18)$$

Partikula $x = -l$ puntutik abiatuko da, eta eraso egingo dio V_0 altuerako potentzial-langa bati \bar{v} abiadurarekin:



Irudia 3.6: Potentzial-langa eta m masako partikula.

Partikularen energia $E < V_0$ da. Partikulak hasieran duen egoeratzat k -ren eremuan definitutako fardel Gaussiarra hartu dugu. Hau da partikularen hasierako aldiuneko momentu-banaketa:

$$g(k - \bar{k}) = \frac{1}{(2\pi\sigma_k^2)^{1/4}} e^{-(k-\bar{k})^2/4\sigma_k^2} \quad (3.19)$$

non σ_k^2 -k hasierako momentu-banaketaren zabalera zehazten duen. Zenbat eta σ_k txikiagoa izan, orduan eta estuagoa izango da momentu-banaketa, lokalizatuagoa egongo da uhina momentuaren espazioan eta, fardel espaziala (hau ere Gaussiara) zabaldu egingo da.

Lehendabiziko pausoa $V(x)$ potentzialari dagokion Hamiltondarraren autofuntzioak kalkulatzeko izango da. Horretarako, denborarekiko independentea den Schrödingerren ekuazioa ebatziko dugu:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \psi(x, t) = E\psi(x, t) \quad (3.20)$$

Partikulak ezkerretik egin duenez eraso, kontuan izan behar dugu langaren eskuineko aldean ez dela abiadura negatiboarekin higitzen den uhinik egongo, uhin-transmititua baino ez baitugu izango. Honako hau izango da, beraz, soluzioa:

$$\psi(x, t) = \begin{cases} \psi_1(x, t) = \psi_I(x, t) + \psi_R(x, t), & x < 0 \\ \psi_2(x, t), & 0 \leq x \leq a \\ \psi_3(x, t) = \psi_T(x, t), & x > a \end{cases} \quad (3.21)$$

non I , R eta T uhin erasotzailea, islatua eta errefraktatua diren, hurrenez hurren. Ekuazioa ebatzita, uhin lauak lortuko ditugu I eta III eremuetan. II eremua aldiz, klasikoki debekatutako zonaldea¹ da.

Autofuntzioak lortuta, geratzen den bakarra gure hasierako egoera horien menpe idaztea izango da, denboran zehar duen garapena kalkulatzeko. Autobalioak $E(k) = \hbar^2 k^2 / 2m$ izango dira. Hauek dira soluzioak [8]:

$$\psi_I(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{k_0} g(k - \bar{k}) e^{ik(x+l)} e^{-i\omega t} dk \quad (3.22)$$

$$\psi_R(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{k_0} g(k - \bar{k}) \frac{e^{-2\rho a} - 1}{r} e^{ik(x-l)} e^{-i\alpha} e^{-i\omega t} dk \quad (3.23)$$

$$\psi_2(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{k_0} g(k - \bar{k}) \bar{r} \frac{2 \cos \theta}{r} e^{-i\gamma(k,x)} e^{ikl} e^{-i\alpha} e^{-i\omega t} dk \quad (3.24)$$

$$\psi_T(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{k_0} g(k - \bar{k}) e^{-\rho a} \frac{2 \sin 2\theta}{r} e^{ik(x+l-a)} e^{-i\alpha} e^{-i\pi/2} e^{-i\omega t} dk \quad (3.25)$$

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m}, \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad k_0^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad \text{eta} \quad \rho^2 = k_0^2 - k^2 \quad \text{izanik.}$$

θ , r , \bar{r} , α eta γ era honetan daude definituta:

$$\cos \theta = \frac{k}{k_0}; \quad \sin \theta = \frac{\rho}{k_0}; \quad \tan \alpha = \coth \rho a \tan 2\theta; \quad \tan \gamma = \coth [\rho(x - a)] \tan \theta$$

$$r^2 = 1 + e^{-4\rho a} - 2e^{-2\rho a} \cos 4\theta; \quad \bar{r}^2 = e^{-4\rho a} e^{2\rho x} + e^{-2\rho x} - 2e^{-2\rho a} \cos 2\theta;$$

$$\bar{r} e^{-i\gamma} = e^{-i\theta} e^{-2\rho a} e^{\rho x} - e^{i\theta} e^{-\rho x}$$

Erlazio horiek soluzio orokorrean mugalde-baldintzak aplikatuz lortzen dira (uhin-funtzioaren eta haren deribatuen jarraitutasuna).

Uhin-funtzioaren adierazpena badaukagunez, integrala kalkulatzeko geratzen zaigu, uhin-funtzioak (x, t) puntu bakoitzean daukan balioa kalkulatu ahal izateko.

¹Klasikoki debekatutako zonaldea $E < V_0$ betetzen duen zonaldeari esaten zaio. Eredu horretan, energia totala energia potentziala baino baxuagoa izanik, energiaren kontserbazioa betetzeko, T energia zinetikoak negatiboa izan beharko luke, klasikoki ezinezkoa dena. Kuantikoki, aldiz, partikulak probabilitate bat izango du zonalde horretan egoteko, x handitu ahala esponontzialki txikitzen joango dena.

Integrazioa egiteko 2.4 atalean ikusi dugun metodoa erabiliko dugu, garrantzizko laginketa erabiltzen duena. Itxura hau daukate kalkulatu behar ditugun integralek:

$$\psi_i(x, t) = \int_0^{k_0} g(k - \bar{k}) f_i(x, k, t) dk \quad (3.26)$$

non $g(k)$ partikularen hasierako aldiuneko momentu-banaketa den, eta $f_i(x, k, t)$ integratu behar ditugun gainerako ekarpenak biltzen dituen funtzioa (zonaldearen arabera f_i -k dagokion adierazpena hartuko du). Era horretan adierazita, (2.20) adierazpenarekin bat datorren integrala lortzen dugu. Kasu honetan, integralerako laginak jarraitu beharko duen PDFa $g(k - \bar{k})$ funtzioak emango digu: $p(k) = g(k - \bar{k})$. Hau da kalkulatu beharko dugun emaitza:

$$\psi_i(x, t) = \frac{1}{N_p} \sum_{i=1}^{N_p} f_i(x, t, k_i) \quad (3.27)$$

non N_p laginketarako erabili dugun puntu kopurua den, eta $\{k_i\}$ $p(k) = g(k - \bar{k})$ probabilitatearen dentsitate-funtzioa jarraituz aukeratutako puntu-sorta, lagina. Puntu-sorta hori Monte Carlo laginketa bat eginez lortu dugu. Laginketa egiteko, Von Neumann-en onartze/baztertze algoritmoa erabili dugu, 2.5.2 atalean azaldu duguna.

Von Neumann algoritmoa implementatzeko, 2.5.2ko Neumann-en algoritmoko M_0 balioa kalkulatu beharko dugu, zeinak k -ren eremuan probabilitate handienarekin agertzen den puntuaren $p(k)$ balioa adierazten duen. Puntu hori $g(k - \bar{k})$ Gaussiarren erdiko puntua izango da, $k = \bar{k}$ hain zuzen. Beraz $M_0 = g(\bar{k})$.

Monte Carlo bidezko integrazioak problema honetan duen baliagarritasuna frogatzeko, integral hori bera integrazio numerikoko metodo sinpleenetako batekin ere kalkulatu dugu, Newton-Côtes formula itxietako Trapezioaren erregela konposatuarekin, hain zuzen [9]. $[0, k_0]$ tartea $n = 1000$ zatitan banatu, eta adierazpen honen bitartez kalkulatu dugu zati bakoitzari dagokion integralaren balioa:

$$\int_{a_i}^{b_i} f(k) dk \approx \int_{a_i}^{b_i} P_1(k) dk = \frac{b_i - a_i}{2} (f(a_i) + f(b_i)) = \frac{k_0}{2} \cdot \frac{f(a_i) + f(b_i)}{n - 1} \quad (3.28)$$

non $P_1(x)$ lehen ordenako polinomio interpolatzailea den. Lagrange-ren lehen mailako bi polinomioren gainezarpen moduan idatz daiteke: $\frac{x-b_i}{a_i-b_i}$ eta $\frac{x-a_i}{b_i-a_i}$.

Behin partikularen uhin-funtzioak denboran zehar izango duen itxura kalkulatu-ta, (3.18) adierazpenaren bitartez, sistemaren PDFa kalkulatu dezakegu:

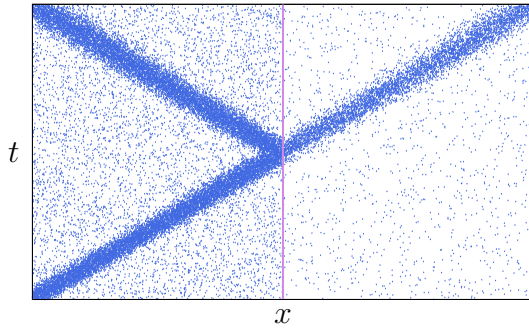
$$p(x, t) = \begin{cases} |\psi_I(x, t) + \psi_R(x, t)|^2, & x < 0 \\ |\psi_2(x, t)|^2, & 0 \leq x \leq a \\ |\psi_T(x, t)|^2, & x > a \end{cases} \quad (3.29)$$

Amaitzeko, Metropolis algoritmoa implementatuko dugu, x, t planoan ausazko puntuak hartuz eta zuzenean $p(x, t)$ probabilitate-dentsitatearen arabera onartzuz edo baztertuz, 2.5.1 atalean azaldutako prozedura jarraituz:

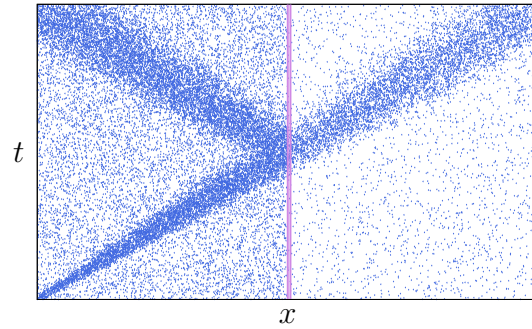
1. Algoritmoa hasteko ausazko puntu bat hartu dugu: (x_0, t_0) . Puntu horri $p_0 = p(x_0, t_0)$ probabilitatea dagokio.
2. x, t planoan ausazko zenbaki berri bat sortu dugu, irteteko $p = p(x, t)$ probabilitatea izango duena. Puntu berria onartu egingo dugu $p \geq p_0$ betetzen bada.
3. $p < p_0$ bada, puntu berria p/p_0 probabilitatearekin onartuko dugu; hau da, r ausazko zenbakia sortuz, onartu egingo dugu puntua $r \leq p/p_0$ betetzen bada.
4. 2 eta 3 pausoak behin eta berriz errepikatuko ditugu, N puntu lortu arte.

Lortutako puntuak x, y ardatzetan irudikatuz gero, uhin-funtzioaren probabilitate funtzioak izango duen itxuraren irudi kualitatibo bat lor dezakegu. Argi dago hasieran ezartzen ditugun baldintzen arabera soluzio ezberdinak lortuko ditugula. Analitikoki ikusi dugun moduan, partikulak *III* zonaldean egoteko duen probabilitatea ez da nulua; baina probabilitate hori asko aldatuko da \bar{v} eraso-abiaduraren arabera, baita σ_k^2 -ren balioaren arabera ere. Aldagai horien zenbait baliotarako simulazioen emaitzak alderatuko ditugu.

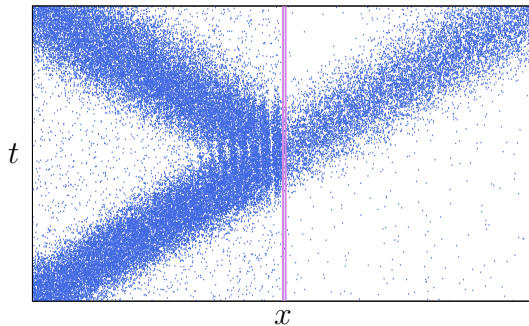
Simulazioak egiteko, x eta t ardatzetan edukiko ditugun mugak zehaztu behar ditugu: $x \in [-l, l + a]$ eta $t \in [0, (2l + a)/\bar{v}]$, $a = 1$ izanik. Hauek izan dira l , σ_k^2 eta \bar{v} aldagaien hainbat baliotarako lortu ditugun emaitzak:



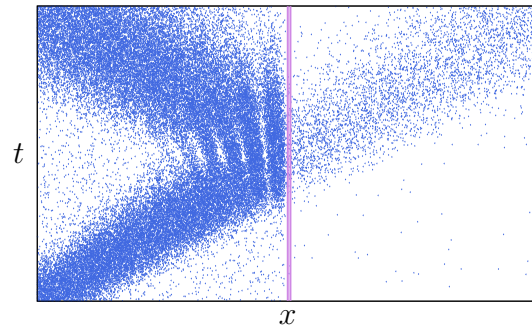
(a) $4\sigma_k^2 = 0.001$, $\bar{v} = 0.5v_0$, $l = 1000$.



(b) $4\sigma_k^2 = 0.01$, $\bar{v} = 0.5v_0$, $l = 100$.



(c) $4\sigma_k^2 = 0.01$, $\bar{v} = 0.5v_0$, $l = 100$.



(d) $4\sigma_k^2 = 0.01$ eta $\bar{v} = 0.25v_0$, $l = 100$

Irudia 3.7: Partikulak potentzial-langaren aurrean duen probabilitate-dentsitatea ($|\psi(x, t)|^2$), l , σ_k^2 eta \bar{v} -ren hainbat baliorako. Lerro bertikalek potentzial-langa irudikatzen dute. ($v_0 = \sqrt{2V_0/m}$).

3.2.1 Emaizten interpretazioa

Lortu ditugun emaitzekin tunel-efektuaren ilustrazio argi bat egitea lortu dugu. Zenbait ondorio atera ditzakegu lortutako irudiotatik, kualitatiboki bada ere.

Hasteko, probabilitate-dentsitateak denboran zehar jasan duen sakabanaketa. Zehaztu dugun moduan, $t = 0$ aldiunean partikula $x = -l$ puntuan dago; aldiune horretan edukiko du $p(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ -k sakabanaketarik txikiena. Hortik aurrera, gero eta ziurgabetasun handiagoa izango dugu partikularen posizioari dagokionez eta, beraz, uhin-funtzioa *zabaltzen* joango da.

(a) grafikoaren kasuan, $p(x, t)$ klasikoki izango genukeen ibilbidearen inguruan oso kontzentratuta dago, bai uhin erasotzailearen kasuan, bai transmitituan eta baita islatuan ere. Izan ere, σ_k^2 -k momentuaren ziurgabetasuna zehatzen digu, eta balio baxua du gainerako kasuekin alderatuz. Grafikoki ulertzeko, $p(x, t)$ -ren maldari erreparatuko diogu: maldak uhinaren abiadura ($1/v$) zein den adierazten du eta, (a) grafikoan, momentuaren ziurgabetasuna txikia denez, malda ongi zehaztuta ageri da (inoiz ez dago guztiz zehaztua, Heisenberg-en ziurgabetasun printzipioa dela eta). Hala ere, denborarekin $p(x, t)$ nola zabaltzen den ikus daiteke.

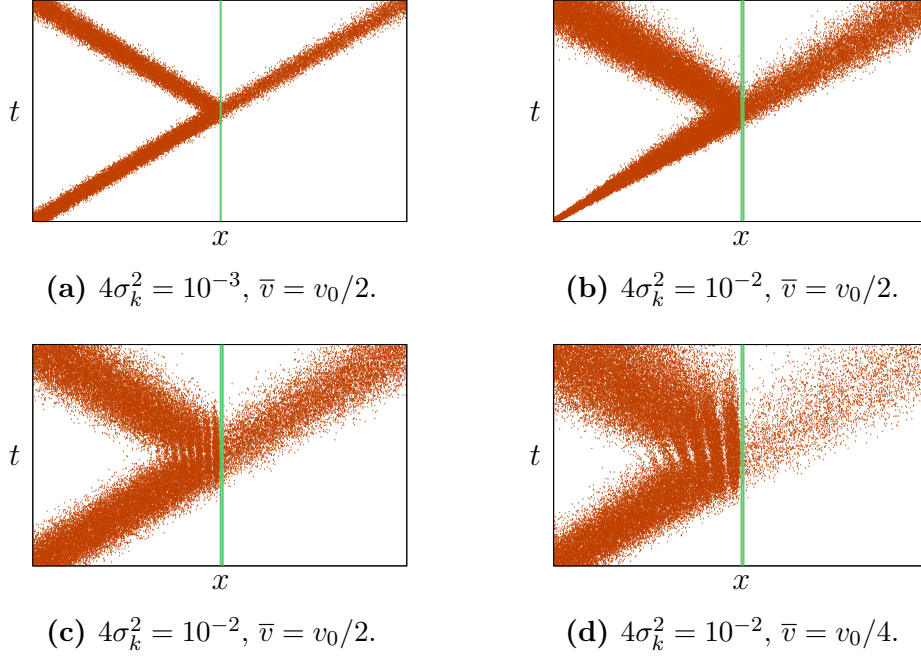
Aldiz, (b) grafikoari erreparatzen badiogu, $p(x, t)$ denborarekin nabarmen zabaltzen dela ikus dezakegu. Sakabanaketa hori σ_k^2 -ren balioarekin lotuta dago. Kasu honetan (a) grafikoan baino 10 aldiz handiagoa da; momentuaren ziurgabetasuna 10 aldiz handiagoa da hortaz. Horren eraginez, partikulak izan dezakeen abiadura tarte handiagoa da (malda posible bakoitzak abiadura bat adierazten du).

(c) grafikoan dauzkagun baldintzak (b)-n dauzkagunaren berdina dira, aldatzen dena partikularen hasierako posizioa da, kasu honetan $x = -100$ -etik hasten baita. Potentzial-langaraino egin beharreko distantzia laburragoa da eta, beraz, $x = 0$ -ra iristen denean duen sakabanatzea txikiagoa izango da. Oso nabarmena izan ez arren, uhin erasotzailearen eta islatuaren arteko interferentziak ikus daitezke, uhin-funtzioaren gainzarpenaren ondorioz gertatzen direnak: momentuaren ziurgabetasuna dela eta, partikula abiadura ezberdinekin irits daiteke potentziallangara eta, beraz, aldiune ezberdinetan has daiteke islatzen, oraindik erasotzen ari den uhinarekin gainezarriz.

(d) grafikoan partikularen hasierako abiadura oso txikia da; energia baxua du, beraz. E txikia izateagatik, partikulak langa zeharkatzeko duen probabilitatea txikia da, ikus daitekeen moduan, $x > a$ zonaldean dagoen puntu kantitatea oso txikia da $x < 0$ zonaldearekin alderatuz. (c) kasuan gertatu den moduan, uhin erasotzailearen eta islatuaren arteko interferentzia ageri da, kasu honetan askoz nabarmenagoa, $\bar{v} < 0.3v_0$ baita. Abiadura txikia denez, aurreko kasuetan bereiz genezakeen ibilbide klasikoak lausotuta ageri da (d)-n, eta uhin-funtzioaren sakabanatzea oso nabarmena da.

3.7 irudiko grafikoak Monte Carlo bidezko integrazioaren bitartez kalkulaturako uhin-funtzioarekin egin dira. Ondorio kualitatiboak ateratzeko balio izan diguten

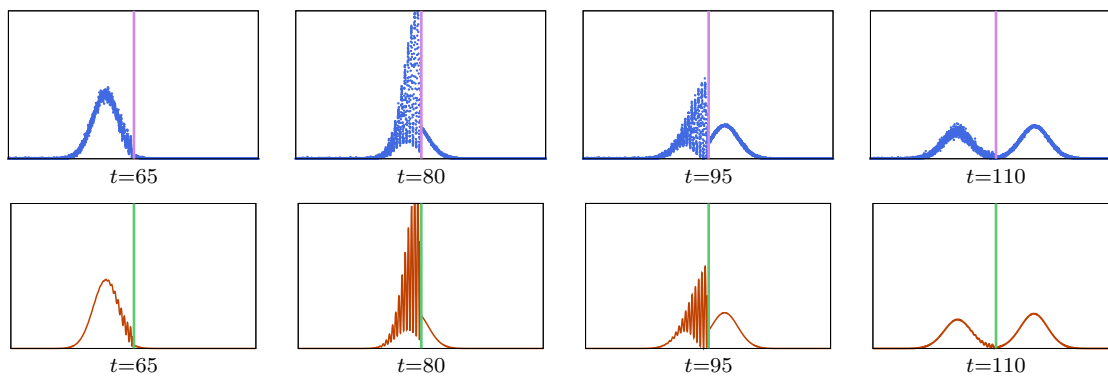
arren, zenbait zonaldetan ez da behar bezain garbi ikusten partikularen ibilbide klasikoak markatzen duen muga zein den. Izan ere, 2.4 atalean ikusi dugun moduan, integrazio-metodo hau ez da idealena dimentsio bateko integralak ebazteko. Hori dela eta, Trapezioaren erregelaren bitartez kalkulatu ditugun integralen balioak hartuta, berriro irudikatu ditugu probabilitate-dentsitateen grafikoak, 3.7 irudiko grafikoekin alderatu ahal izateko:



Irudia 3.8: Partikulak potentzial-langaren aurrean duen probabilitate-dentsitatea ($|\psi(x, t)|^2$), l , σ_k^2 eta \bar{v} -ren hainbat baliorako. Lerro bertikalek potentzial-langa irudikatzen dute. ($v_0 = \sqrt{2V_0/m}$).

Partikularen ibilbideen itxura orokorra 3.7. irudiaren grafikoetan dugunaren berdin da: σ_k^2 -ren balioa handitzeak uhin-funtzioaren sakabanatzea areagotzen du, eta \bar{v} abiadura txikietarako uhin erasotzailearen eta islatuaren arteko interferentzia handitzen du. Baina ibilbide klasikoaren mugetan sartzen ez diren puntuen kopuruan dagoen aldea nabaria da: 3.7. grafikoetan puntu asko daude ibilbide klasikotik kanpo; berez dutena baino probabilitate altuagoarekin irudikatu baitira. 3.8. grafikoei dagokienez, aldiz, ibilbidearen mugak askoz garbiagoak dira.

Azken simulazio bat ere egingo dugu, zeinetan $p(x, t)$ irudikatuko dugun x -en funtzioan, hainbat aldiunetan. Era horretan, partikula potentzial-langara iristen denean sortzen den interferentzia era bisualagoan ikusi ahal izango dugu. Kasu honetan, partikularen eraso-abiadura $\bar{v} = 0.85v_0$ da, aurreko kasuetan baino energia altuagoa du beraz partikulak, $E = 0.85^2V_0$ hain zuzen. Partikularen ibilbidea $0 \leq t \leq (2l + 1)/\bar{v}$ denbora tartean jazotzen da; hemen horietako sei aldiunetarako irudikatu dugu $p(x, t) = |\psi(x, t)|^2$ funtzioa:



Irudia 3.9: $4\sigma_k^2 = 10^{-2}$, $\bar{v} = 0.85v_0$, $l = 100$. Urdinez Monte Carlo bidezko integrazioarekin kalkulaturakoak. Laranja trapezioaren erregela bidez kalkulaturakoak.

Espero genuen bezala, kasu honetan uhinak probabilitate handiagoa du transmititzeko islatzeko baino, hori garbi ikusten da Trapezioaren erregelaren metodoaren kasuan. Aurreko grafikoetan ere izan ditugun interferentziak ikus daitezke, justu uhina potentzial-langara iristen denean hasten direnak.

Integrala ebazteko erabili dugun metodo bakoitzarekin lortutako emaitzei erreparatu gero, argi ikusten da emaitza biak baliokideak direla, aurreko kasuan lortu dugun moduan. Hala ere, zehatzagoa da trapezioaren erregela erabiliz egin dugun integrala (laranja), espero genuen bezala. Monte Carlo bidezko integrazioa erabiliz ebatzi dugun funtzioak (urdinez) ausazkotasun handiagoa dauka, eta lortutako puntuak ez dira zehazki lerro berean erortzen. Esaterako, $t = 110$ aldiuneari erreparatzen badiogu, ikus dezakegu $x < 0$ zonaldean puntuek errore handiagoa dutela benetako funtzioarekiko, eta lerro lodiagoa osatzen dutela. Baina era egokian ematen ditu aldiune bakoitzeko probabilitateak.

Orokorrean, Monte Carlo metodoak irudi bidezko errepresentazioa egiteko modu egoki eta efizientea eskaintzen digu, $p(x)$ PDF batek deskribatzen duen sistema edo prozesu baten kasurako. Modu aproposa da, guk aztertu dugun moduan, sistema kuantiko bati dagokion uhin-funtzioa edo probabilitatearen dentsitate-funtzioaren ideia kualitatibo bat lortzeko.

3.3 Ising eredua

Atal honetan Ising eredua aztertuko dugu. Ising eredua, 1924an Ernst Ising fisikari germaniarrak ebatzia, fisika estatistikoko eredu aztertuenetako bat da fase-trantsizioak ikertzeko simulazio-metodoen artean [10]. Material magnetiko batek energia termikoaren aurrean duen erantzuna deskribatu ahal izateko modu simple bat da, eta sistema magnetikoen tenperatura finituko fase-trantsizioak aztertzeo erabiltzen da, spin klasikoen elkarrekintzak kontsideratuz.

Helburua Ising ereduaren bitartez material ferromagnetikoen tenperaturaren aldatzarekiko duten jokabidea aztertzea izango da, eredu honek (bi dimentsiotan) aurkezten duen bigarren ordenako fase-trantsizioa ere aztertuz. Eredua aurkeztu aurretik, ordea, garrantzitsua da erabiliko ditugun zenbait kontzeptu azaltzea:

Material ferromagnetikoak:

Metalen nahiz beste edozein materialen magnetismoa parekatu gabeko elektroien spin-egoerek eta egoera orbitalek zehazten dute, eta baita elektroien horien spinekin parekatu gabe dauden gainerako elektroien spinekin duten lerrakuntzak ere.

Material ferromagnetikoen kasuan, parekatu gabeko elektroien spinekin elkarrekin paraleloki parekatzeko joera daukate tenperatura baxuetan eta, horren ondorio bezala, sistemek batez besteko magnetizazio ez-nulua ($\langle \mathcal{M} \rangle \neq 0$) erakusten dute \mathcal{B} kanpo-eremu baten menpe egon gabe ere. Material ferromagnetikoen irismen handiko ordena bat erakusten dute maila atomikoan, parekatu gabeko elektroien spinak domeinu (horien tamaina 0.1mm eta mm gutxi batzuen tartekoa izan ohi da) bategan zehar paraleloki lerrokatzea eragiten duena. Irismen handiko ordena hori maila atomikoko elkarrekintza kuantikoaren ondorioa da, zeinak ondoko atomoen momentu magnetikoak blokeatzen dituen. Momentu magnetikoak finko mantentzen dira, ia agitazio termikoaren eraginik nabaritu gabe. Baina tenperatura jakin batera iristean, *Curie* tenperaturara (T_C), hain zuzen, ordena hori bortizki desagertzen da, spinekin elkarrekin paraleloki lerrokatuta egoteari uzten diote, eta batez besteko magnetizazioa nulua izatera pasatzen da tenperatura horretatik aurrera. $T = T_C$ -n fase-trantsizio bat gertatu dela esaten da, zeinetan material ferromagnetiko izatetik paramagnetiko izatera pasatzen den [3].

Material antiferromagnetikoen kasuan, aldiz, $\mathcal{B} \neq 0$ izanik, spinak antiparaleloki lerrokatuta daude tenperatura baxuetan eta, beraz, batez besteko magnetizazioa nulua da. Material antiferromagnetikoen ere paramagnetismorako fase-trantsizio bat jasango dute, kasu honetan *Néel-en Tenperaturan*, $T = T_N$ -n. Hala ere, atal honetan, material ferromagnetikoetan zentratuko gara.

Fase-trantsizioak:

Sistema bat lege termodinamikoen bitartez aztertu nahi dugunean, sistema hori deskribatzen duten zenbait egoera-propietate agertzen zaizkigu, tenperatura (T), presioa (p), masa (m), bolumena (V), dentsitatea (ρ), barne-energia (U) eta entropia (S), besteak beste. Propietate horiek ez dira elkarrekin independenteak eta, beraz,

propietate bat besteen menpe adieraz daiteke egoera-ekuazioei esker.

Inguruak zehazten dituen baldintzen arabera, egoera-propietate horiek balio jakin batzuk hartuko dituzte, eta balio horien arabera sistemak fase ezberdinak izango ditu. Izan ere, baldintza horiek sistemarengan eragiten dute eskala mikroskopikoan, haren partikulak era batera edo bestera ordenatzera bultzatuz. Propietate makroskopiko ezberdinak dituzten materiaren agregazio-egoera horiei *fase termodinamiko* esaten zaie. *Fase-trantsizio* esaten zaio sistema fase termodinamiko batetik beste batera igarotzeari. Aldaketa hori sistemaren egoera-propietateak eta barne-egitura aldatzearen ondorioa da.

Fase-trantsizioak lehen ordenakoak edo bigarren ordenakoak izan daitezke, sistemaren *Helmholtzen energia askearen* funtzioaren izaeraren arabera. Energia askeak $F = -k_B T \ln Z$ eran definituta dago, non Z sistemaren partizio-funtzioa den. Lehen ordenako fase-trantsizioen kasuan, F -ren lehen deribatuak ez dira jarraituak $T = T_C$ temperatura kritikoan. Bigarren ordenako fase-trantsizioetan, aldiz, $T = T_C$ temperaturan F energia askearen lehen deribatuak jarraituak dira; F -ren bigarren deribatuak, aldiz, dibergentzia bat daukate $T = T_C$ -n.

Gure sisteman, batez besteko magnetizazioaren funtzioa jarraitua da, baina ez da diferentziagarria, malda infinituz hurbiltzen baita zerora. Izan ere, $\langle \mathcal{M} \rangle = - \left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{B}} \right)_T$ eran definituta dago eta, $\langle \mathcal{M} \rangle$ F -ren lehen deribatua izanik, haren deribatua ez jarraitua izango da $T = T_C$ puntuan. Portaera hori *fenomeno kritiko*en adibide bat da. Fenomeno kritikoetan, aldagai termodinamiko bat edo gehiago zero izatera pasatzen dira puntu kritiko batetik aurrera; kasu honetan, batez besteko magnetizazioa, $\langle \mathcal{M} \rangle$, $T = T_C$ -tik aurrera.

Eredu honetan momentu magnetikoak edo spinak kontsideratzen dira, sareta karra-tu baten puntuetan finko daudenak. Spin bakoitzak har dezakeen norabidea edozein izan daiteke berez, baina eredu honek norabide horiek z ardatzera mugatzen ditu, $s = \pm 1$ izendatu ditugunak (gora eta behera, hurrenez hurren). Spin bakoitzak sareko ondoz ondoko puntuetako spinekin baino ez du elkarrekintzarik izango, lehen bizilagun deritzenekin. Sistemaren azterketa egiteko, hark tenperaturaren balio ezberdinetarako hartzen dituen energiaren eta magnetizazioaren balioak kalkulatu ditugu, horien bitartez fase-trantsizioa aztertu ahal izateko.

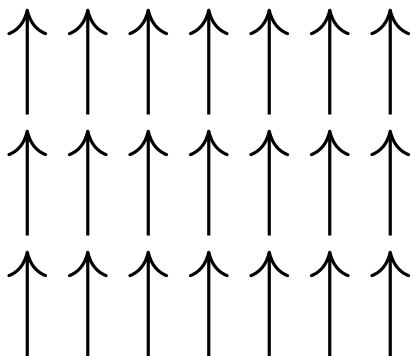
Eredurik sinpleena aztertuko dugu, Heisenberg-en Hamiltondarrak zehazten duena. Honako adierazpen hau dauka Hamiltondarrak:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle kl \rangle}^N s_k s_l - \mathcal{B} \sum_k^N s_k \quad (3.30)$$

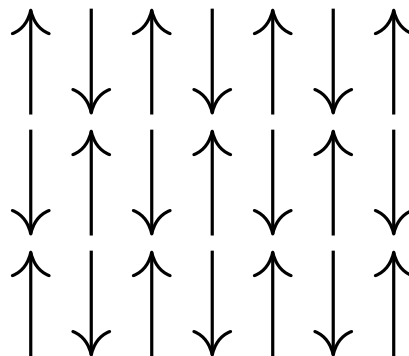
non N sareko spin kopuru totala den; J akoplamendu-konstantea, ondoz ondoz bi spinen arteko elkarrekintzaren indarra zehazten duena; eta \mathcal{B} kanpo-eremu magnetikoa, spinekin elkarrekintzan dagoena. $\langle kl \rangle$ sinboloak adierazten du ondoz ondoko spinen artean baino ez dela egin behar batuketa. Hurbilketa horrekin,

distantzia handiagoko elkarrekintzak arbuiatzen ari gara ondoz ondokoen alboan. Azkenik, lehen esan bezala, $s_k, s_l = \pm 1$ izango dira.

Hamiltondarrari erreparatuz, ikus daiteke energiak bi ekarpen dituela: bate-tik, ondoz ondoko spinen elkarrekintzari dagokiona; eta bestetik, sistema kanpo-eremu baten eraginpean egotearen ondorioz sistemak duen magnetizazioari dagokio-na. Lehenengo terminoak energiari egindako ekarpena J parametroaren araberakoa izango da. J akoplamendu-konstantea izanik, erlazio zuzena du sistemaren energiak ondoz ondoko bi spinen lerrakuntzarengan duen eraginarekin. $J > 0$ denean, energe-tikoki faboragarriena (energia baxuena izango duena) spinen lerrakuntza paraleloa izango da, eta beraz, ferromagnetismoa azalduko da $T < T_C$ den bitartean. $J < 0$ denean, aldiz, energetikoki faboragarriena lerrakuntza antiparaleloa izango da, zein-ak antiferromagnetismoa agertzea eragingo duen $T < T_N$ den bitartean. $J = 0$ den kasuetan, ez da elkarrekintzarik egongo spinen artean.



(a) Kristal ferromagnetikoa.



(b) Kristal antiferromagnetikoa.

Irudia 3.10: Spinen lerrakuntzaren irudi eskematikoa, $2D$ -ko kristal baten kasuan.

Garrantzitsua da azpimarratzea Hamiltondarreko J parametroa konstantetzat hartzea hurbilketa bat baino ez dela. J bi spinen arteko elkarrekintza adierazten duen parametroa da, baina, esan bezala, spinen maila atomikoko fenomeno kuantikoak adierazten ditu, elektroien uhin-funtzioaren gainezarpenarekin lotutakoak, kalkulatzeko oso zailak direnak. Bestalde, ohartu behar gara spinen norabidea berez z ardatzekoa dela, baina y ardatzean irudikatu ditugu grafikoki errazago ikusteko.

Ising eredua aztertzen hasteko, lehenik gure sistema deskribatuko duen PDFa aurkitu behar dugu. PDF hori fisika estatistikoan tenperatura jakin bateko batez besteko energia, $\langle E \rangle$, edota magnetizazioa, $\langle M \rangle$, kalkulatzeko erabili behar dugun probabilitate-funtzioa da. Multzo kanonikoan zentratuko gara, zeinetan tenperatura aldagai intentsiboa den, eta energia eta magnetizazioa, aldiz, aldagai estentsiboak, itxarotako balio moduan hartzen direnak. Izan ere, energiak eta magnetizazioak tenperaturaren balio bakoitzerako hartzen dituzten balioak aztertu nahi ditugu. Multzo kanonikoan, sistema i mikroegoeran egoteko probabilitatea, gure sistemaren PDFa izango dena, Boltzmann-en banaketak zehazten du:

$$P_i(\beta) = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z} \quad (3.31)$$

non $\beta = 1/k_B T$ den, k_B Boltzmann-en konstantea izanik; E_i i mikroegoeraren energia, eta Z multzo kanonikoko partizio-funtzioa. M mikroegoera kopuru totala izanik, honela dago definituta partizio-funtzioa:

$$Z = \sum_{i=1}^M e^{-\beta E_i} \quad (3.32)$$

Interesatzen zaigun potentzial termodinamikoa Helmholtzen energia askea izango da, multzo kanonikoan termodinamika eta fisika estatistikoa erlazionatzen dituen. Lehen esan bezala, era honetan lortzen da:

$$F = -k_B T \ln Z \quad (3.33)$$

Sistemaren batez besteko energia eta magnetizazioa (3.33) adierazpenaren bitartez kalkula ditzakegu, eta baita batezbestekoak kalkulatzeko adierazpen orokorra erabiliz ere, (2.11) adierazpenean (3.31) probabilitate-dentsitatea ordezkatzuz:

$$\langle E \rangle = \left(\frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} \right)_{V,N} = \sum_{i=1}^M E_i P_i(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^M E_i e^{-\beta E_i} \quad (3.34)$$

$$\langle \mathcal{M} \rangle = - \left(\frac{\partial F}{\partial \mathcal{B}} \right)_T = \sum_{i=1}^M \mathcal{M}_i P_i(\beta) = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^M \mathcal{M}_i e^{-\beta E_i} \quad (3.35)$$

Horien bitartez sistemaren bero-ahalmena (C_V) eta suszeptibilitate magnetikoa (χ_M) kalkulatu ditugu:

$$C_V = \left(\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right)_V = \frac{\partial}{\partial T} \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^M E_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}} = \frac{1}{k_B T^2} \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^M E_i^2 e^{-\frac{E_i}{k_B T}} - \frac{1}{k_B T^2} \left(\frac{1}{Z} \sum_{i=1}^M E_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}} \right)^2 = \frac{1}{k_B T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (3.36)$$

$$\chi_M = \left(\frac{\partial \langle \mathcal{M} \rangle}{\partial \mathcal{B}} \right)_T = \frac{\partial}{\partial \mathcal{B}} \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^M \mathcal{M}_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}} = \frac{1}{k_B T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2) \quad (3.37)$$

non E_i eta \mathcal{M}_i i mikroegoerak dituen energia eta magnetizazioa diren, hurrenez hurren. Era honetan kalkulatu dira:

$$E_i = -J \sum_{\langle kl \rangle} s_k s_l - \mathcal{B} \sum_k s_k \quad (3.38) \quad \mathcal{M}_i = \sum_{j=1}^N s_j \quad (3.39)$$

χ_M -ren adierazpena lortzeko C_V kalkulatzeko erabili dugun prozeduraren antzekoa erabili dugu.

Atal honetan, material ferromagnetikoetako ($J > 0$) fase-trantsizioen azterketa egiteko, kanpo-eremu nulua duen kasua baino ez dugu kontuan hartuko, $\mathcal{B} = 0$. Izan ere, $T < T_C$ denean gertatzen den bat-bateko magnetizazioa da ikusi nahi duguna. Hau izango da, beraz, lan honetan aztertuko dugun Hamiltondarra:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle kl \rangle} s_k s_l \quad (3.40)$$

3.3.1 Soluzio analitikoa

Ising ereduak sistemak magnetikoak ebazteko erabiltzen den metodorik sinpleena da. Hala ere, ereduaren $1D$ kasuko soluzio analitikoa 1924an lortu bazen ere, $2D$ ko soluzioa ez zen 1944 urtera arte aurkitu. Lars Onsager izan zen ereduaren deskripzio analitikoa lortu zuena. Hiru dimentsioko kasurako ez da oraindik soluzio analitikorik aurkitu.

Soluzioaren ondorioztapenean asko sakonduko ez dugun arren, baliagarria da haren nondik norakoak gaineratik aztertzea, batez ere aurrerago lortuko ditugun emaitza numerikoekin alderatu ahal izateko.

Hauxe da magnetizazioarentzako lortutako adierazpena [11]:

$$\mathcal{M} = \begin{cases} (1 - \{\sinh(2\beta J)\}^{-4})^{1/8}, & T_C \leq 0 \\ 0, & T_C > 0 \end{cases} \quad (3.41)$$

Adierazpen horretatik T_C -ren balio teorikoa lor dezakegu, $\mathcal{M} = 0$ egiten den puntuko tenperatura kalkulatzuz:

$$\sinh\left(\frac{2J}{k_B T_C}\right) = 1 \Rightarrow \frac{J}{k_B T_C} = \frac{1}{2} \ln(\sqrt{2} + 1) \quad (3.42)$$

$J = 1$ eta $k_B = 1$ balioak hartuz, hau da lortzen dugun Curie tenperatura:

$$T_C = \frac{2}{\ln(\sqrt{2} + 1)} \approx 2.2692 \quad (3.43)$$

Bero-ahalmenaren eta suszeptibilitate magnetikoaren adierazpenak hori baino askoz konplikatuagoak dira. Horregatik, magnitude horiek T_C -ren inguruan duten itxuran baino ez gara zentratuko. Tenperatura kritikokoaren inguruan, funtzio termodinamikoak berretura-funtzio gisa adieraz daitezke:

$$G(T) \sim \left| \frac{T - T_C}{T_C} \right|^d \quad (3.44)$$

non d , esponente kritikoa, funtzioaren araberakoa den. Hauek dira \mathcal{M} , C_V eta χ_M -ren adierazpenak T_C puntuaren inguruan:

$$\mathcal{M} \approx 1.2224 \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right)^{1/8} \quad (3.45)$$

$$C_V \approx -0.4945 \ln \left| \frac{T_C - T}{T_C} \right| + kte \quad (3.46)$$

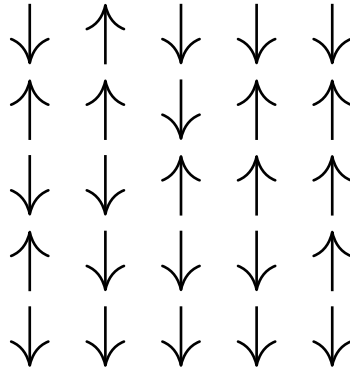
$$\chi_M \propto \frac{N}{k_B T_C} \begin{cases} 0.02554 \left(\frac{T_C - T}{T_C} \right)^{-7/4}, & T \lesssim T_C \\ 0.96258 \left(\frac{T - T_C}{T_C} \right)^{-7/4}, & T \gtrsim T_C \end{cases} \quad (3.47)$$

3.3.2 Inplementazioa

Kontzeptu horiek nahikoa dira Ising ereduaren inplementazioarekin hasteko. Guk $2D$ -ko Ising-en eredia aztertuko dugu. Beraz, $N = n \times n$ spinez osatutako sarea izango da aztertu beharko dugun sistema, $n \times n$ tamainako matrize batekin irudikatuko duguna. Helburua tenperatura ezberdinetarako sistema magnetiko horren zenbait kantitate termodinamiko konputatzea izango da eta, horretarako, Metropolis algoritmoa erabiliko dugu, zeinetan P_i trantsizio-probabilitate moduan hartuko dugun. Eredu honetan, sistemaren errepresentazio egokia egin ahal izateko, $N \rightarrow \infty$ izan beharko genuke, sarearen mugaldean gertatzen diren fenomenoak arbuiatu ahal izateko. Baina hori konputazionalki oso garestia da. Matrizearen tamaina handitu gabe, emaitzen zehaztasuna handitzeko metodo bat mugalde baldintza periodikoak kontsideratzea da. Horiek aplikatu ditugu lan honetan.

Metropolis algoritmoaren bitartez, tenperaturaren balio bakoitzerako energia minimodun egoera lortu nahi dugu, iterazio bakoitzean aurreko egoerak baino energia baxuagoa duen egoera berri bat lortuz. Iterazio bakoitza ibiltari aske baten pauso bat izango da, eta tenperatura bakoitzeko L ibilbide edo *ziklo* egingo ditu ibiltariak.

Algoritmoa aplikatzen hasteko, hasierako egoera bat finkatu behar dugu, zeinari iterazio bakoitzean aldaketak egiten joango garen (orain aztertuko ditugu). Hasierako egoera hori ausaz aukeratutako konfigurazio bat izango da, hau da, ausazko aldagai bat erabiliko dugu sareko spin bakoitzak $s = +1$ edo $s = -1$ balioa hartzen duen erabakitzeke. Egoera horrek E_0 energia izango du, (3.38) adierazpenarekin kalkulatuko duguna. Egin dugun saiakeretako batean honelako konfigurazioa lortu dugu, $n = 5$ spinen kasurako:

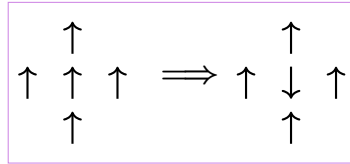


Irudia 3.11: Metropolisen ibilaldietako baten spinen hasierako egoera, ausaz hartua.

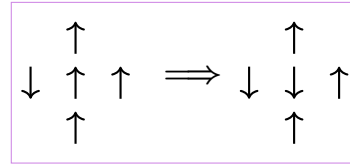
Egoera horretatik abiatuta, 2.5.1 atalean ikusitako pausoak jarraituko ditugu [3]:

1. Iterazio bakoitzean, ausaz aukeratuko dugun spin bati bira emango diogu, $s \rightarrow s'$ egoera berri bat sortuz. Egoera berriaren energia E_b izango da. Baina energia horren balioa kalkulatzeko (3.38) adierazpena erabili ordez, beste metodo bat erabiliko dugu; izan ere, spin guztien batura behin eta berriz kalkulatzeko ez da batere efizientea. Horren ordez, konfigurazio berria finkatu

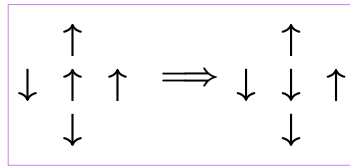
ostean, ΔE kalkulatu dugu, eta $E_b = E_0 + \Delta E$ izango da. $2D$ -n, ΔE -k bost balio baino ezin ditu hartu, bost konfigurazio ezberdin baino ez baitaude ausaz aukeratutako spina eta haren ondoz ondoko lau spinak kontuan hartuta (baliokideak dira spin guztiak gorantz dituen egoera eta denak beherantz dituen):



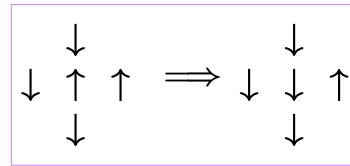
(a) $\Delta E = 8J$



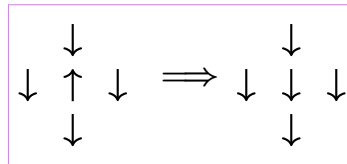
(b) $\Delta E = 4J$



(c) $\Delta E = 0$



(d) $\Delta E = -4J$



(e) $\Delta E = -8J$

Irudia 3.12: ΔE -k har ditzakeen balio posibleak, eta bakoitzaren konfigurazioa.

Era horretan, egoera berriaren energia kalkulatzeko biratu dugun spinaren eta haren ondoz ondoko lau spinen orientazioak baino ez ditugu kontuan izan behar, sareko spin guztien orientazioa aztertu beharrik gabe.

- Egoera berria onartuko dugun ala ez jakiteko, jatorrizko egoeraren probabilitatea eta egoera berriaren probabilitatea alderatu behar ditugu. Horretarako, q aldagai bat definituko dugu, non $q = P_b/P_0$ den: $q \geq 1$ bada, egoera berria onartu egingo dugu. Ohartu, (3.31) adierazpenak erakusten duen moduan, probabilitatea Z partizio-funtzioaren menpe dagoela, eta hori kalkulatzeko oso garestia dela guretzat. Baina, 2.5.1 atalean ikusi dugun moduan, q bi probabilitateen ratioa baino ez da, eta ez dugu Z kalkulatzeko beharrik izango. Honela geratzen zaigu q :

$$q = \frac{P_b}{P_0} = \frac{e^{-\beta E_b}}{e^{-\beta E_0}} = e^{-\beta(E_b - E_0)} = e^{-\beta \Delta E}$$

Beraz, $\Delta E \leq 0$ bada $q \geq 1$ izango da, eta egoera berria onartu egingo dugu. Horrek esan nahi du energia gutxitu egin dela, eta energia minimoko egoeratik gertuago gaudela.

- Aldiz, $\Delta E > 0$ bada, q aldagaia momentuan definituko dugun $r \in [0, 1)$ ausazko zenbakiarekin alderatuko dugu. $q \leq r$ bada, egoera berria onartu egingo dugu; bestela, jatorrizko egoeran geratuko gara.

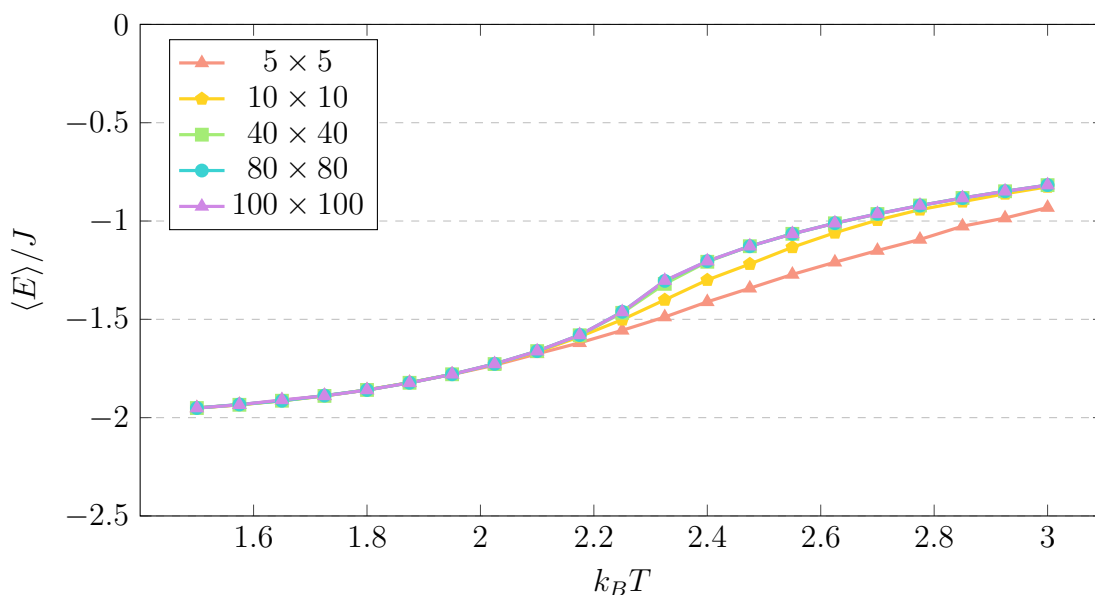
Ohartu behar gara, pauso bakoitzean q kalkulatzeko esponentzial hori ebaluatzea ere ez dela batere efizientea. Horregatik, jakinda ΔE -k bost balio soilik har ditzakeela, Metropolis algoritmoarekin hasi aurretik q -k izan ditzakeen balio posibleekin bektore bat osatuko dugu. Era horretan, egoera bakoitzean daukagun konfigurazioaren arabera, bektoreko zein balio hartu behar dugun baino ez dugu begiratu beharko, esponentziala ebaluatu ordez.

4. Egoera berria finkatu dugunez, kalkulatu nahi ditugun aldagai termodinamikoaren batezbestekoak eguneratu behar ditugu. Energiaren kasurako, jatorrizko balioari ΔE gehitu behar diogu. Magnetizazioa, aldiz, honela aldatuko da: $M_b = M_0 + s' - s$.
5. Matrize osoa zeharkatzen amaitu dugunean, hau da, 1.etik 4.rako pausoak $n \times n$ aldiz egin ostean, Monte Carlo ziklo bat egin dugula esango dugu. L ziklo egingo ditugu guztira, tenperatura bakoitzeko. Ziklo bakoitza neurketa baten moduan uler daiteke eta, beraz, aldagai termodinamikoaren azken balioa neurketa horien batez bestekoa eginez lortuko dugu.

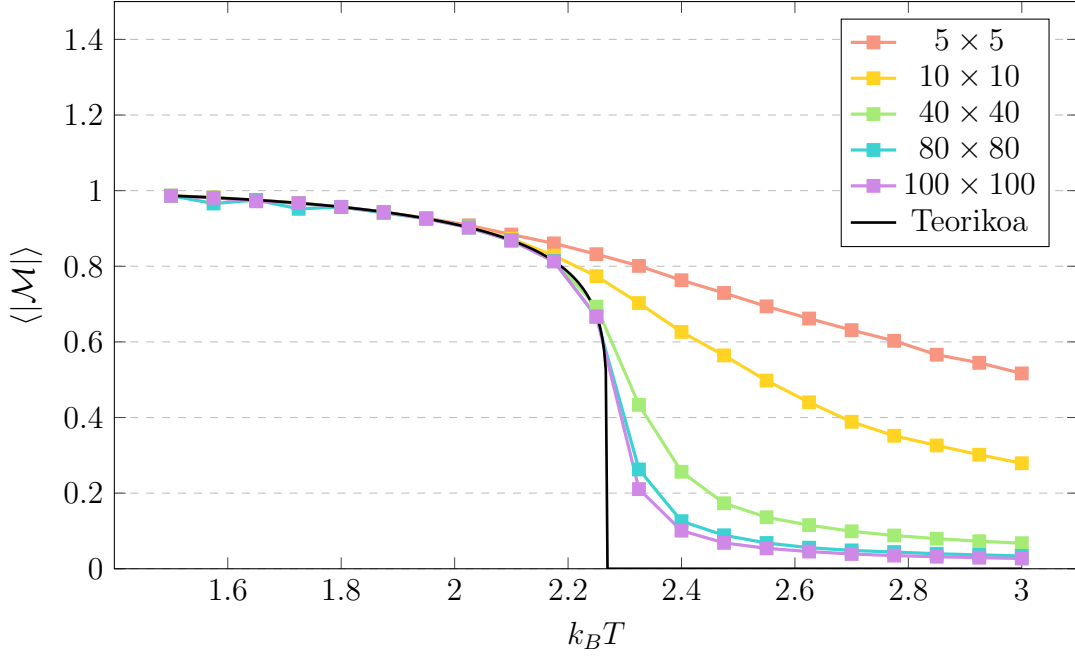
3.3.3 Emaitzak

Egin ditugun simulazioetan, $n = 5$, $n = 10$, $n = 40$, $n = 80$ eta $n = 100$ tamainako sareak kontsideratu ditugu. Egoera *egonkortzeko*, 1×10^4 ziklo egin ditugu tenperatura bakoitzeko, batezbestekoak eguneratzen hasi aurretik, eta $L = 5 \times 10^5$ Monte Carlo ziklo batezbestekoak lortzeko. $J = 1$ eta $k_B = 1$ balioak erabili ditugu. Lortu ditugun energiaren eta magnetizazioaren balioak eta batezbestekoak tenperatura bakoitzeko bero-ahalmena, C_V , eta suszeptibilitatea, χ_M , kalkulatzeko erabili ditugu [12].

Hauek izan dira aldagai bakoitzerako lortu ditugun emaitzak:



Irudia 3.13: Spin bakoitzeko batez besteko energia, $\langle E \rangle$, T-ren menpe.



Irudia 3.14: Spin bakoitzeko batez besteko magnetizazioa, $\langle |\mathcal{M}| \rangle$, T -ren menpe.

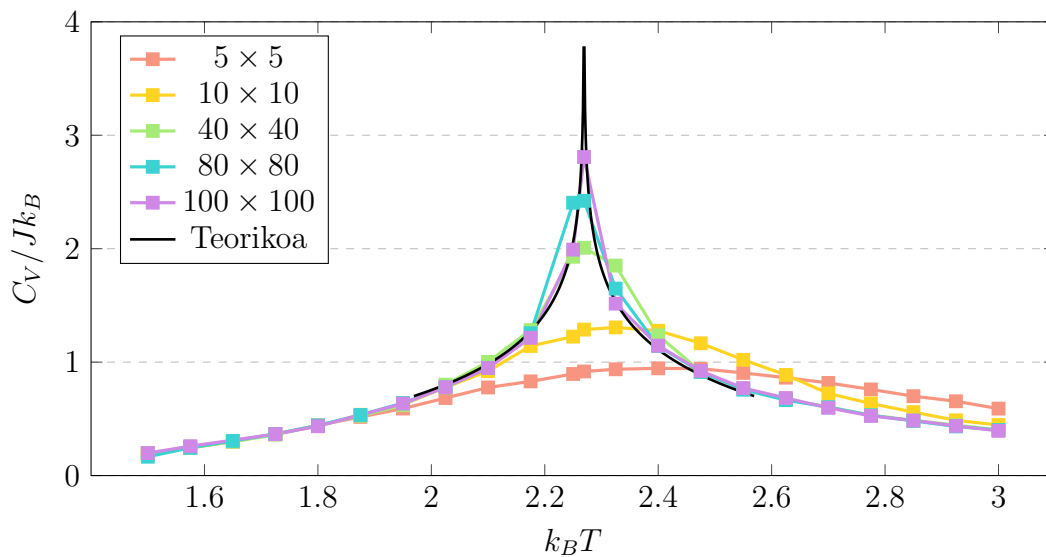
Hasieran aipatu bezala, \mathcal{B} kanpo-eremu nuluko $2D$ -ko Ising ereduak bigaren ordenako fase-trantsizio bat jasaten du, zeinak sistemaren bat-bateko magnetizazioa eragiten duen $T < T_C$ denean. Hori bat dator grafikoetatik ondoriozta ditzakegun emaitzekin.

3.13 grafikoari erreparatzen badiogu, ikusi daiteke nola joan den energiaren balioa egonkortzen sarearen tamaina handitu ahala; eta azken hiru balioetarako ezin dugu begi bistaz bereizketarik igarri. Kasu guztietan, emaitzek energiaren kurba leun bat irudikatzen dute, tenperaturarekin batera igotzen dena, $T \approx T_C$ inguruan duen malda zerbait handiagoa izanik.

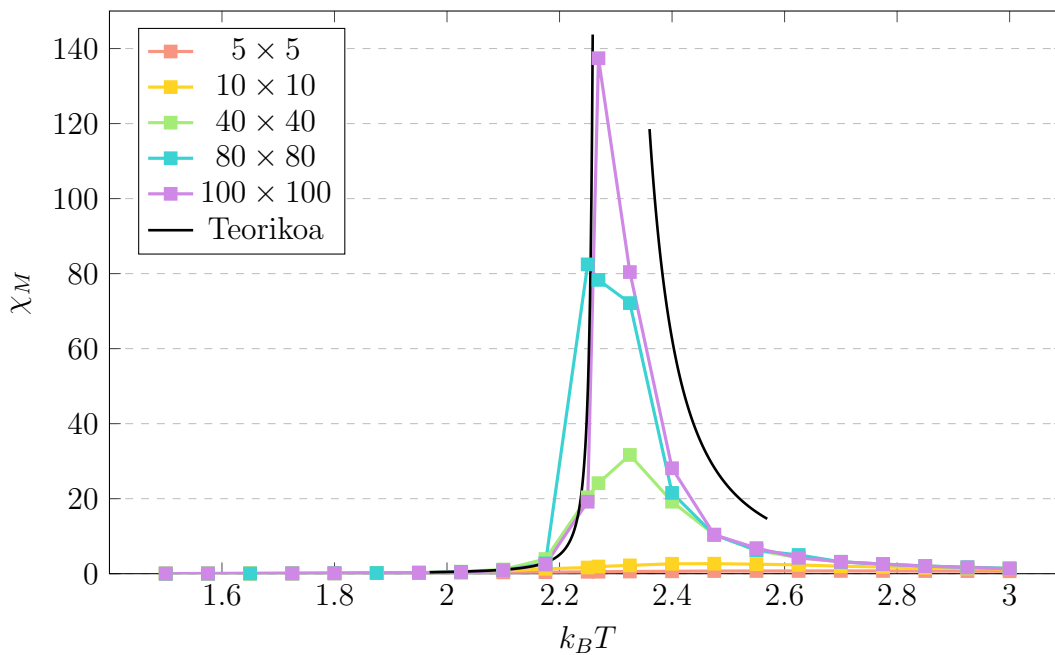
3.14 grafikoan, $|\mathcal{M}|$ -ren batez bestekoa da kalkulatu duguna, eta ez zuzenean \mathcal{M} -rena. Izan ere, $T < T_C$ eremuan, sistemak probabilitate bera du \mathcal{M} -ren balio positiboarekin edo balio negatiboarekin magnetizatzeke. $\mathcal{B} = 0$ kasuan, sistemak ezin du bat-bateko magnetizazioaren balio positibotik negatibora (edo alderantziz) salto egin; baina hori ez da egia tamaina finituko sistemaren kasuan, zeinetan denbora karakteristiko baten buruan sistemak \mathcal{M} -ren balio positiboetatik negatiboetara salto egin dezakeen. Zuzenean balio horien batezbestekoa kalkulatu bagenu, ez genuke $\langle \mathcal{M} \rangle$ -ren balio egokia lortuko. Horregatik kalkulatu dugu $\langle |\mathcal{M}| \rangle$ [13].

Magnetizazioaren balio absolutua sarearen tamaina ezberdinetarako irudikatu dugu. n handitu ahala, funtzioak $T \approx T_C$ inguruan daukan malda gero eta handiagoa da, eta magnetizazioaren balio txiki batetik handiago batera dagoen trantsizioa gehiago hurbiltzen da espero genuen bat-bateko trantsiziora, soluzio teorikoak adierazten duen moduan. Hori fase-trantsizio baten adierazgarria izan daitekeen ezaugarria da, non sistema spinen arteko ordena altua duen fasetik (spin guztiek noranzko bera dutena) desordena maila altuko fasera (spinek probabilitate bera dute $s = 1$ edo $s = -1$ balioa hartzeko) igarotzen den. Horregatik, magnetizazioa ordena-parametro gisa uler daiteke.

Sistemaren bero-ahalmena eta suszeptibilitatea ere irudikatu ditugu eta, hauetan ere nabaria da fase-trantsizioaren presentzia:



Irudia 3.15: Sistemaren bero-ahalmena, C_V , T-ren menpe.



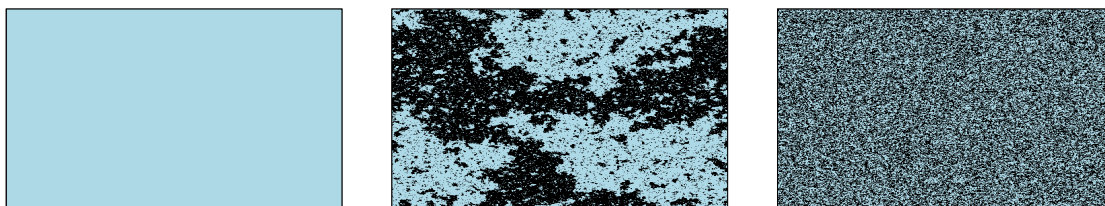
Irudia 3.16: Sistemaren suszeptibilitate magnetikoa, χ_M , T-ren menpe.

Bai bero-ahalmena bai suszeptibilitate magnetikoa Helmholtzen energia askearen (F) bigarren ordenako deribatuak dira, temperaturarekiko eta kanpo-eremuarekiko, hurrenez hurren. Sistemak jasaten duen fase-trantsizioa bigarren ordenakoa izanik, badakigu $T \approx T_C$ inguruan F -ren bigarren ordenako deribatuak ez-jarraituak izango direla, edo dibergentzia bat izango dutela. C_V -k, esaterako, dibergentzia logaritmikoa bat dauka $T \approx T_C$ -n, (3.46) adierazpenean ikus daitekeen moduan. Sa-rearen tamaina handitu ahala, funtzioak daukan forma zorrotzagoa eta altuagoa

da. χ_M -ren kasuan antzerako zerbait gertatzen da. (3.47) adierazpenak esaten digu χ_M berretura-funtzio gisa idatzita dibergentzia bat izango duela, $d = -7/4$ izanik. Funtzioak forma zorrotzagoa hartuko du n handitu ahala.

Orokorrean, ondoriozta dezakegu n -ren balio handietarako lortutako emaitzak bat datoze la soluzio teorikoak emandako adierazpenarekin, T_C puntutik gertu ez gauden bitartean. Tenperatura kritikoaren inguruan, ostera, lortutako emaitzak ez dira hain zehatzak; funtzioak eduki beharko lukeen formaren ideia bat lortu dugu, baina emaitza kuantitatiboak behar ditugun kasuetan ez zaizkigu hain baliagarriak egingo. Metropolis algoritmoa, beraz, ez da hain efizientea zonalde horretan aplikatzeko. n txikietarako lortutako emaitzak ez dira baliagarriak, kasu horretan mugalde baldintza periodikoak aplikatzea ez baita nahikoa $N \rightarrow \infty$ -ren hurbilketa ona egiteko.

Grafikoetatik ondorioztatu ahal izan dugun bezala, material ferromagnetikoak fase ezberdinetan egongo dira T -ren arabera: fase ferromagnetikoa $T < T_C$ denean, eta paramagnetikoa $T > T_C$ denean. $T = T_C$ -n gertatuko da fase-trantsizioa. Fase horietako bakoitzean gure sistemako spinek izango duten egoera aztertu nahi dugu. Horretarako, tenperatura bakoitzean egoera egonkor bat lortzeko haina ziklo egin ditugu, $N = 1 \times 10^4$. Konfigurazio horietako bakoitzean sareko spinek duten noranzkoa irudikatu dugu, urdinez $s = +1$ eta beltzez $s = -1$. Hauek izan dira lortu ditugun konfigurazioak:



(a) $T = 1.0$

(b) $T = T_C \approx 2.2692$

(c) $T = 5.0$

Irudia 3.17: 500×500 spineko sarearen konfigurazioak, T ezberdinetarako.

Espero genuen bezala, $T < T_C$ kasuan (3.17a grafikoa), spin guztiak paraleloki lerrotatuta daude, sistemak jasaten duen bat-bateko magnetizazioa dela eta: sistema fase ferromagnetikoan dago. Probabilitate bera dago spin guztiek $s = +1$ edo $s = -1$ balioa hartzeko eta, kasu honetan, balio positiboa hartu dute. Konfigurazio hori kasu idealari dagokiola azpimarratu beharra dago, sistema erreal batean $T = 0$ -rekin lortuko genukeenari; izan ere, fluktuazio termikoak direla eta, ez genuke inoiz lortuko spin guzti-guztiak lerrotatuta egotea. $T > T_C$ kasuan, aldiz, fase paramagnetikora pasa da sistema (3.17c). Batez besteko magnetizazioa nulua da, ez baita spinen lerrakuntzarekin lotutako ordenarik ageri sisteman. $T = T_C$ -n fase-trantsizioa gertatzen ari da. (3.17b) grafikoa, noranzko bera duten spinek domeinuak osatzen dituzte [14], baina domeinu horien tamaina txikiagoa da 3.17a grafikoa baino, zeinetan domeinuak sistema guztia hartzen duen. Tenperatura igo ahala, spinen arteko ordenaren irismena txikitzen joan da, domeinuen tamaina gero eta txikiagoa izanik, desagertu arte; eta $T > T_C$ -n ordenarik gabeko fasera iristen da sistema.

4. kapitulua:

Ondorioak

Gradu amaierako lan honetan Monte Carlo metodoen sarrera bat egin da, eta horiek fisikaren arloan dituzten aplikazioetako batzuk aztertu dira: ekuazio diferentzialen ebazpena, sistema probabilitikoen irudikapena, eta sistema magnetikoen fase-trantsizioen azterketa (Ising eredua).

Hasteko, Poissonen ekuazioaren problema ebatzi dugu, $2D$ -ko sarean zehar hedatzen den ibiltari aske sinplearen metodoa erabiliz. Monte Carlo ziklo kopuru ezberdinetarako emaitzak lortu ditugu, eta ikusi dugu ziklo kopurua handia denean lortzen den emaitza diferentzia finituekin lortu dugunaren oso parekoa dela. Adibide konkretu horretan, Monte Carlo metodoak behar izan duen konputazio-denbora handiagoa izan da diferentzia finituenak behar izan duena baino; baina aipatu dugun moduan, dimentsio kopurua handitu ahala ohiko metodo numerikoak baino askoz efizienteagoa izatera iristen da. Horrez gain, metodo hau oso erabilgarria izango zaigu $\Phi(x, y)$ -ren balioa puntu jakin batzuetan soilik kalkulatu nahi dugunean, puntu horretako $\Phi(x, y)$ -ren balioa lortzeko ez baitugu beharrik izango gainontzeko puntuetan duen balioa kalkulatzeko. Oso interesgarria da metodo probabilitiko baten bitartez problema determinista baten soluzio egokia lortu daitekeela ikustea.

Aztertu dugun bigarren problema uhin-funtzioaren irudikapena izan da. Ikusi dugun moduan, oso metodo sinplea eta baliagarria da uhin-funtzioak izan dezakeen itxura era bisualago batean ulertzeko. Guk potentzial-langa baten kasuan aplikatu dugun arren, edozein sistema kuantiko irudikatzeke erabil daiteke: hidrogeno-atomoaren orbitalak, Stark eta Zeeman efektuak, etab. [8]. Problema honetan, uhin-funtzioaren adierazpena integral baten bidez kalkulatu behar izan dugu, eta aukera hori erabili dugu Monte Carlo bidezko integrazio metodoa ohiko integrazio metodoetako batekin alderatzeko: Trapezioaren erregelarekin. Azken metodo hau zehatzagoa izan den arren, MC metodoarekin lortutako emaitzak ere bat etorri dira fisikoki espero genuenarekin, eta tunel-efektuaren azterketa egokia egitea ahalbidetu digu. Gainera, 2.4 atalean esan dugun moduan, metodo hau askoz aproposagoa da dimentsio kopuru handia duten integralak ebazteko. Dimentsio kopurua handitu ahala, Trapezioaren erregelarekin izango dugun arazoa diferentzia finituetako metodoen kasuan izango genukeenaren berbera da. Trapezioaren erregela konposatuaren kasuan, integralean egindako errorea erabilitako pausuen proportzionala da, $\varepsilon = kh^2$, non k funtzioaren bigarren deribatuaren proportzionala den konstante bat den [9]. Konputazio-denbora, T_{konp} , puntu kopuruaren proportzionala da, eta balioan ε ordezkatuz gero, adierazpen hau lortuko dugu N dimentsioko integral baterako: $T_{\text{konp}} \propto N_{\text{puntu}} \propto \left(\frac{1}{h}\right)^N \propto \varepsilon^{-N/2}$. Monte Carlorentzat, aldiz, (2.23) adierazpenetik abiatuz, $T_{\text{konp}} \propto \frac{\sigma^2}{\varepsilon^2} \propto \varepsilon^{-2}$ lortzen dugu. Balio hori ez dago N -ren menpe eta, beraz, $N > 4$ dugunean, Monte Carlo metodoa Trapezioaren erregela baino azkarragoa izango da.

Amaitzeko, Ising ereduaren azterketa egin dugu, zeinak sistema magnetikoen fase-trantsizioak aztertzeko metodo sinplea eskaini digun. Lortu ditugun emaitzek sistemak fase-trantsizio bat jasaten duela adierazten dute. 3.14 grafikoan ikusten denez, $T > T_C$ denean magnetizazioa nulua izatera pasatzen da, malda infinituz, teorikoki; hortik ondoriozta daiteke magnetizazioa ordena-parametro bezala uler daitekeela. Oro har, lortu ditugun grafikoak bat datoz soluzio analitikoak aurre-sandakoarekin. Zenbait puntutan, gure emaitzek duten errorea nabarmenagoa da, 3.16 grafikoan, esaterako; baina hori metodoaren ausazkotasunaren ondorioetako bat da. Bestalde, 3.17 irudian, atalaren hasieran azaldu ditugun domeinuak oso argi erakustea lortu dugu. Egindako azterketa kanpo-eremu nuluko izan da, material ferromagnetikoetako spinen lerrakuntza aztertu nahi baikenuen, $\mathcal{B} = 0$ kasuan ere gertatzen dena. Interesgarria litzateke kanpo-eremu ez nulu batek sisteman izango lukeen eragina aztertzea. Hala ere, auresan dezakegu eremuaren eraginak spinen lerrakuntza areagotuko lukeela; era horretan, T_C tenperaturatik gora ere, elkarreki-ko lerroatuta egoten jarraituko lukete, agitazio termikoaren eragina handiegia den tenperaturara iritsi arte; hortik aurrera fase paramagnetikoan sartuko litzateke.

Lanaren hasieran ezarri ditugun helburuak bete ditugula esan genezake; izan ere, aztertu ditugun hiru problemak Monte Carlo metodoen bitartez ebatzitez gain, lortutako emaitzak beste metodo numeriko eta analitiko batzuekin alderatu ditugu, lortutako emaitzen baliagarritasuna frogatzea ahalbidetu digutenak. Oro har, lortutako emaitzak bat etorri dira beste metodoek auresaten zituzten balioekin, bai eta fisikoki espero genuenarekin ere; beti ere, kontuan hartuz metodo probabilistiko bat erabiltzen ari garela, eta horrek dakarren errorea, kasuaren arabera, kontuan hartu beharrekoa izango dela.

Hala ere, beti daude moduak emaitzak hobetzeko; edo hobetzeko ez bada ere, metodo efizienteagoak implementatzeko. Oro har, guk implementatu ditugun metodoak oso orokorrak izan dira, Monte Carlo metodoaren funtsa ulertzen lagundu digutenak, azken finean hori baitzen lanaren helburua. Hala ere, hobekuntzak egin daitezke implementatutako metodoetan, metodo orokorrak problema bakoitzaren ezaugarrietara gehiago egokituz. Ising ereduaren, adibidez, tenperaturaren balio bakoitzerako egin diren Monte Carlo zikloak hasieratik finkatu ordez, egoera egonkorrera bategen bestean zenbatgarren zikloan iristen den aztertu genezakeen, eta beharrezkoak ziren zikloak baino ez egin, konputazio-denbora murrizteko. Poissonen ekuazioa ebatzian, esaterako, efizienteagoak izan daitezkeen ibiltari asken aldaera ezberdina frogatzea interesgarria litzateke (*floating random walk*, adibidez), guk lortutako balioekin eta konputazio-denborarekin alderatzeko. Horrez gain, lana osatzeko asmoz, Monte Carlo metodoak dituen beste zenbait aplikazio aztertu daitezke: fisika kuantikoa, adimen artifiziala, soziologia, finantzak...

Bibliografia

- [1] David P. Landau and Kurt Binder. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. 4th ed. Cambridge University Press, 2014.
- [2] Malvin H. Kalos and Paula A. Whitlock. *Monte Carlo methods. Vol I, Basics*. 2nd ed. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, 2008.
- [3] Morten. H. Jensen. *Computational Physics*. University of Oslo, 2010.
- [4] William H. Press et al. *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. 3rd ed. Cambridge University Press, 2007.
- [5] B. K. Øksendal. *Stochastic differential equations: an introduction with applications* 6th ed. Berlin: Springer, 2003.
- [6] Benjamin A. Stickler and Ewald Schachinger. *Basic Concepts in Computational Physics*. 2nd ed. Springer International Publishing, 2016, xvi, 409 p.
- [7] P. K. MacKeown and D. J. Newman. *Computational Techniques in Physics*. Taylor & Francis, 1987.
- [8] Veríssimo De Aquino Manoel et al. “Monte Carlo image representation”. In: *American Journal of Physics - AMER J PHYS* 69 (July 2001), pp. 788–792.
- [9] J. O. Scherer. *Computational Physics: Simulation of Classical and Quantum Systems*. 3rd ed. Springer International Publishing, 2017.
- [10] J. S. Amaral, J. N. Gonçalves, and V. S. Amaral. “Thermodynamics of the 2-D Ising Model From a Random Path Sampling Method”. In: *IEEE Transactions on Magnetism* 50.11 (2014), pp. 1–4.
- [11] R. K. Pathria. *Statistical mechanics*. 1st ed. Pergamon Press Oxford, New York, 1972, xiii, 527 p.
- [12] Jacques Kotze. “Introduction to Monte Carlo methods for an Ising Model of a Ferromagnet”. In: *arXiv: Statistical Mechanics* (2008).
- [13] Eduardo Ibarra-García-Padilla, Carlos Gerardo Malanche-Flores, and Freddy Jackson Poveda-Cuevas. “The hobbyhorse of magnetic systems: the Ising model”. In: *European Journal of Physics* 37.6 (2016), p. 065103.
- [14] J. C. Walter and G. T. Barkema. “An introduction to Monte Carlo methods”. In: *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 418 (2015), pp. 78–87.