

La simulación de Monte Carlo

Lectura: R. K. Pathria & P. D. Beale, Cap. 16., W. Krauth Cap. 1, The Internet

» Ideas generales

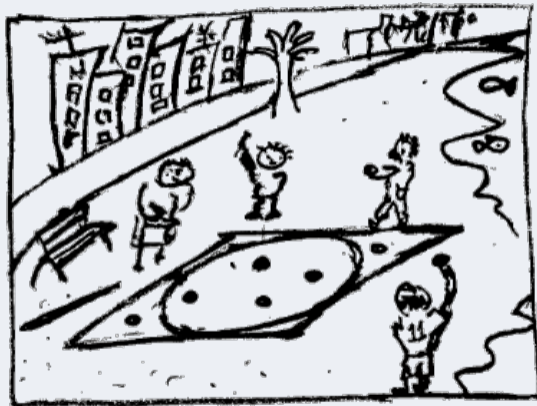
- Evolución: secuencia de números aleatorios.
- Problemas: Mecanica estadística, cuántica, etc.
- Cómputo: Tiempo y memorias limitados.
- Errores: estadísticos y de los otros.



» Juegos populares en Mónaco

Cálculo con 4000 tiros

| Corrida | N_{adentro} | Estimación de π |
|---------|----------------------|---------------------|
| 1 | 3156 | 3.156 |
| 2 | 3150 | 3.150 |
| 3 | 3127 | 3.127 |
| 4 | 3171 | 3.171 |
| 5 | 3148 | 3.148 |



» Muestreo por importancia (Importance sampling)

Las configuraciones de un sistema se generan de acuerdo a una distribución, de manera que los valores de expectación son promedios aritméticos de las mediciones en esas configuraciones.

Si quiero calcular

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L A(x)P(x) \quad \text{con } P(x) \text{ una distribución arbitraria}$$

Si tomo M valores, x_1, \dots, x_M en el dominio $[-L : L]$, comparemos elecciones:

» Muestreo por importancia (Importance sampling)

Las configuraciones de un sistema se generan de acuerdo a una distribución, de manera que los valores de expectación son promedios aritméticos de las mediciones en esas configuraciones.

Si quiero calcular

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L A(x)P(x) \quad \text{con } P(x) \text{ una distribución arbitraria}$$

Si tomo M valores, x_1, \dots, x_M en el dominio $[-L : L]$, comparemos elecciones:

Muestreo al azar uniforme

$$\langle A \rangle \simeq \frac{2L}{M} \sum_{i=1}^M P(x_i)A(x_i)$$

Si $P(x)$ está picada en una región pequeña, tengo muchas fluctuaciones estadísticas (mucho error).

» Muestreo por importancia (Importance sampling)

Las configuraciones de un sistema se generan de acuerdo a una distribución, de manera que los valores de expectación son promedios aritméticos de las mediciones en esas configuraciones.

Si quiero calcular

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L A(x)P(x) \quad \text{con } P(x) \text{ una distribución arbitraria}$$

Si tomo M valores, x_1, \dots, x_M en el dominio $[-L : L]$, comparemos elecciones:

Muestreo al azar uniforme

$$\langle A \rangle \simeq \frac{2L}{M} \sum_{i=1}^M P(x_i)A(x_i)$$

Si $P(x)$ está picada en una región pequeña, tengo muchas fluctuaciones estadísticas (mucho error).

Muestreo por importancia

Si elijo los x_i según una distribución $W(x)$

$$\langle A \rangle \simeq \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{P(x_i)}{W(x_i)} A(x_i)$$

Eligiendo simplemente, $W(x) = P(x)$

$$\langle A \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i) \quad \sigma_P^2[A] = \int (A(x) - \langle A \rangle)^2 P(x) dx$$

Y entonces,

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle_M + \frac{\sigma_P[A]}{\sqrt{M^*}}$$

En mecánica estadística P sabemos que está picada exponencialmente $e^{-\beta E}$

La aplicación del muestreo por importancia es fundamental

» Cadenas de Markov, y balance detallado

Para nuestro sistema cada estado $\alpha = \{s_i\}$ y para un sistema a T

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} P(\alpha) A(\alpha), \quad \text{con} \quad P(\alpha) = \frac{1}{Z} e^{-E(\alpha)/k_B T}$$

En una simulación uno inicia con algun α_0 y genera un secuencia (cadena...) $\alpha_1, \alpha_2 \dots$ distribuidos segun P (esperablemente).

$$N_1(\alpha_i) = N_0(\alpha_i) + \sum_{j \neq i} [N_0(\alpha_j) P(\alpha_j \rightarrow \alpha_i) - N_0(\alpha_i) P(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)]$$

$$\sum_{j \neq i} P(\alpha_j) P(\alpha_j \rightarrow \alpha_i) = \sum_{j \neq i} P(\alpha_i) P(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)$$

Uno la resuelve, pidiendo término a término,

$$\frac{P(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)}{P(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)} = \frac{P(\alpha_j)}{P(\alpha_i)}$$

» Metropolis et al.

En general, uno no considera todos los cambios posibles en los estados α , sino que descompone

$$P(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) = P^{\text{intentar}}(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) P^{\text{aceptar}}(\alpha_i \rightarrow \alpha_j)$$

donde P^{intentar} es simétrica ($p_{ij}^{\text{intentar}} = p_{ji}^{\text{intentar}}$).

Metropolis/Rosembluth/Rosembluth/Teller

$$P^{\text{aceptar}}(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } W(\alpha_j) \geq W(\alpha_i) \\ \frac{W(\alpha_j)}{W(\alpha_i)} & \text{si } W(\alpha_j) < W(\alpha_i) \end{cases} \quad (\text{para } \alpha_i \neq \alpha_j)$$

Si $\alpha_i = \alpha_j$, lo elegimos por normalización.

¿Sirve así?

» Era Markov

Veamos que las probabilidades de transición cumplen con lo necesario.

Estocástica

$$\sum_j P(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) = 1$$

Reversible - Balance detallado

$$P(\alpha_i)P(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) = P(\alpha_j)P(\alpha_j \rightarrow \alpha_i)$$

Regular/Ergódica

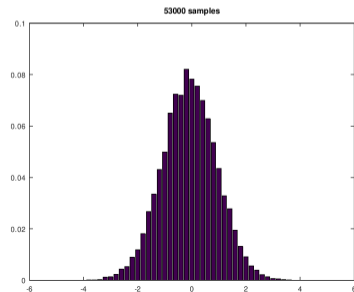
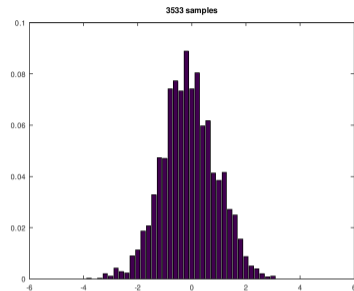
$$\sum_i P(\alpha_i)P(\alpha_i \rightarrow \alpha_j) = P(\alpha_j)$$

» El algoritmo de metropolis

- Elijo un estado inicial x para la cadena.
- Ciclo
 - ▶ Genero un estado distinto de la cadena x'
 - ▶ Calculo $\alpha = \min\left(1, \frac{P(x')}{P(x)}\right)$
 - ▶ Acepto el cambio con probabilidad α .
 - ▶ Guardo x' si acepté, sino repito x .

» El algoritmo de metropolis

- Elijo un estado inicial x para la cadena.
- Ciclo
 - ▶ Genero un estado distinto de la cadena x'
 - ▶ Calculo $a = \min\left(1, \frac{P(x')}{P(x)}\right)$
 - ▶ Acepto el cambio con probabilidad a .
 - ▶ Guardo x' si acepté, sino repito x .



» ¿Cómo hacer para aceptar?

» El caso de Ising

Tenemos la energía

$$E = \mu_0 B \sum_i s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad \Rightarrow \quad W(\alpha) \propto e^{-\beta E(\alpha)}$$

Medimos

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} m e^{-\beta E}, \quad m = M/N, \quad \langle m \rangle = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_{\alpha} m_{\alpha}$$

$$\chi = \frac{d\langle m \rangle}{dB} = \beta \frac{1}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

$$C = \left. \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T} \right|_N = \beta \frac{1}{NT} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad g(r_i - r_j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

» El caso de Ising

Tenemos la energía

$$E = \mu_0 B \sum_i s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j, \quad \Rightarrow \quad W(\alpha) \propto e^{-\beta E(\alpha)}$$

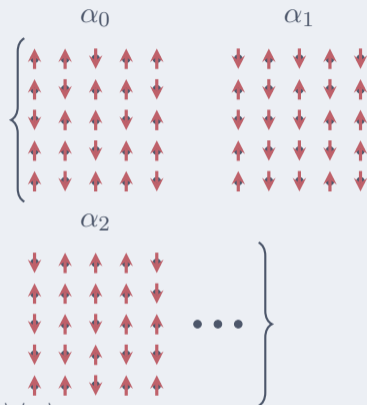
Medimos

$$\langle m \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\alpha} m e^{-\beta E}, \quad m = M/N, \quad \langle m \rangle = \frac{1}{N_{\alpha}} \sum_{\alpha} m_{\alpha}$$

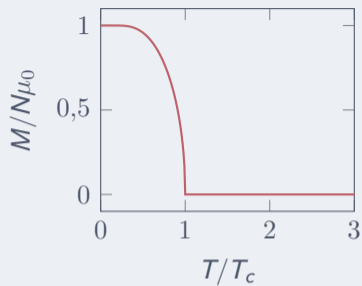
$$\chi = \frac{d\langle m \rangle}{dB} = \beta \frac{1}{N} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$$

$$C = \frac{1}{N} \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_N = \beta \frac{1}{NT} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad g(r_i - r_j) = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle$$

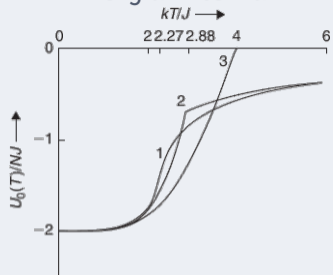
Extraemos exponentes críticos: $m \propto (T_c - T)^{\beta}$, $C \propto |T - T_c|^{\alpha}$, $\chi \propto |T - T_c|^{-\gamma}$,
 $\xi \propto |T - T_c|^{-\nu}$.



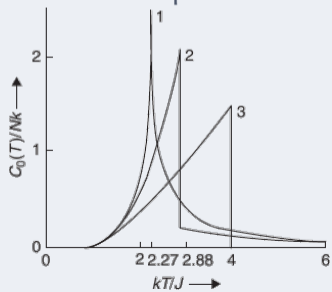
Magnetización



Energía Interna



Calor específico



» Autocorrelación

Pero, cuan estadísticamente independientes son las configuraciones que genera el algoritmo,

$$A_Q(\tau) = \frac{\langle Q_k Q_{k+\tau} \rangle - \langle Q_k \rangle^2}{\langle Q_k^2 \rangle - \langle Q_k \rangle^2}$$

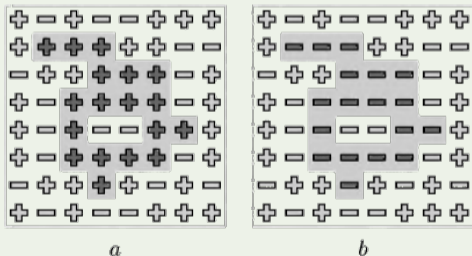
Si son independientes,

$$A_Q(\tau) \longrightarrow e^{-\tau/\Theta}$$

» Tópicos (más) avanzados.

Algoritmos por racimos

Cerca del punto crítico, los tiempos de autocorrelación se hacen cada vez más largos.



Escaleo de tamaño finito

La longitud de correlación no puede crecer más allá del tamaño del sistema.

