

EL MÉTODO DE MONTE-CARLO HÍBRIDO

EN MECÁNICA ESTADÍSTICA

**Raúl Toral**

Antonio Luis Ferreira

DEPARTAMENTO DE FÍSICA

UNIVERSIDAD DE AVEIRO

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dp_n \mathcal{O}(x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n) e^{-\mathcal{H}(x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n)}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dp_n e^{-\mathcal{H}(x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n)}}$$

$$\Gamma = (x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n) = (X, P)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \int dX dP \mathcal{O}(X, P) f(X, P)$$

$$f(X, P) = \frac{e^{-\mathcal{H}(X, P)}}{\mathcal{Z}} \quad ; \quad \mathcal{Z} = \int dX dP e^{-\mathcal{H}(X, P)}$$

- Posibilidad de reducir el número de integrales

$$\mathcal{H}(X, P) = \mathcal{V}(X) + \mathcal{T}(P) = \mathcal{V}(X) + \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m}$$

$$\mathcal{O}(X, P) = \mathcal{O}(X)$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n \mathcal{O}(x_1, \dots, x_n) e^{-\mathcal{V}(x_1, \dots, x_n)}}{\int_{-\infty}^{\infty} dx_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} dx_n e^{-\mathcal{H}(x_1, \dots, x_n)}}$$

Definimos:

$$\phi = (\phi_1, \dots, \phi_N)$$

$$\phi = \begin{cases} (x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n) & \text{en general} \\ (x_1, \dots, x_n) & \text{si } \mathcal{O} \text{ no depende de } P \end{cases}$$

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} d\phi_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_N \mathcal{O}(\phi_1, \dots, \phi_N) e^{-\mathcal{H}(\phi_1, \dots, \phi_N)}}{\int_{-\infty}^{\infty} d\phi_1 \dots \int_{-\infty}^{\infty} d\phi_N e^{-\mathcal{H}(\phi_1, \dots, \phi_N)}}$$

- Métodos aproximados
- Métodos numéricos
- Integrales muy difíciles por estar interesados en el límite  $N \rightarrow \infty$
- $N \sim 10^2 - 10^8$  en la práctica
- Solución= Muestreo Monte-Carlo

$$\int d\phi \mathcal{O}(\phi) f(\phi)$$

1)  $f(\phi) \geq 0$

2)  $\int d\phi f(\phi) = 1$

De manera que  $f(\phi)$  es una función densidad de probabilidad.

- Queremos calcular la media de  $\mathcal{O}$  en una población  $\phi$  distribuida según la

f.d.p.  $f(\phi)$ .

- Hacer un muestreo representativo

- "Experimento": Obtener valores de  $\phi$  distribuidos según  $f(\phi)$ .

$$\phi^{(1)}, \phi^{(2)}, \dots, \phi^{(M)}$$

Aproximamos promedios mediante:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathcal{O}(\phi^{(k)}) \pm \epsilon$$

$\epsilon$  es el error estadístico:

$$\epsilon = \frac{\sigma_{\mathcal{O}}}{\sqrt{M}}(2\tau + 1)$$

La varianza  $\sigma_{\mathcal{O}}^2$  se calcula mediante:

$$\sigma_{\mathcal{O}}^2 = \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathcal{O}(\phi^{(k)})^2 - \left( \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M \mathcal{O}(\phi^{(k)}) \right)^2$$

$\tau$  es el tiempo de correlación. Si los experimentos son independientes, se tiene

$$\tau = 0.$$

- El error disminuye como  $M^{-1/2}$ . En muchos casos  $M \sim 10^3 - 10^4$  da resultados

satisfactorios.

- Método de rechazo

a) Generar  $\phi \in (0, 4)$  aleatoria y uniformemente.

$$\phi^{(k)} = 4 * ran()$$

b) Definir una probabilidad de aceptación:

$$p = \frac{f(\phi)}{2}$$

c) Aceptar con probabilidad  $p$

si  $p < ran()$   $\rightarrow$  Rechazar, generartrovalor

Fácil de implementar:

```
do 100 k=1,M

1      phi=4*ran()

      if (f(phi)/2.lt.ran()) goto 1

      O1 = O1 + O(phi)

      O2 = O2 + O(phi)*O(phi)

100    continue

      O1=O1/M

      O2=sqrt(O2/M-O1*O1)
```

error=02/sqrt(M)

end

- Dos problemas: (1)

$$\phi = (\phi_1, \dots, \phi_N)$$

$$\phi_i \in (-\infty, +\infty)$$

No es demasiado grave:

$$\phi_i = S_i = \pm 1$$

$$\phi_i = x_i \in (0, L)$$

(2)

$$\ln \mathcal{Z} = -F$$

$$f(\phi) = e^{F-\mathcal{H}} = e^{-S} = e^{O(N)}$$

- Solución: No olvidar el pasado.

$$\phi^{(1)} \rightarrow \phi^{(2)} \rightarrow \dots \rightarrow \phi^{(M)}$$

- Introducimos una dinámica en el sistema:

$$\phi \rightarrow \phi'$$

- Dinámica estocástica caracterizada por una probabilidad de transición.

$$w(\phi \rightarrow \phi')$$

- Propuesta + aceptación :

$$w(\phi \rightarrow \phi') = h(\phi \rightarrow \phi')g(\phi \rightarrow \phi')$$

Cadena de Markov. Para que conduzca a un estado estacionario caracterizado

por  $f(\phi)$  es condición suficiente que se satisfaga balance detallado:

$$w(\phi \rightarrow \phi')f(\phi)d\phi = w(\phi' \rightarrow \phi)f(\phi')d\phi'$$

Usualmente se toma una dinámica tal que

$$d\phi = d\phi', \quad J \left( \frac{\phi'_1, \dots, \phi'_N}{\phi_1, \dots, \phi_N} \right) = 1$$

$$h(\phi \rightarrow \phi') = h(\phi' \rightarrow \phi)$$

Para  $f(\phi) = e^{-\mathcal{H}}/\mathcal{Z}$  se tiene:

$$g(\phi \rightarrow \phi')e^{-\mathcal{H}(\phi)} = g(\phi' \rightarrow \phi)e^{-\mathcal{H}(\phi')}$$

Solución:

$$g(\phi \rightarrow \phi') = g(\Delta\mathcal{H}) = e^{-\frac{\Delta\mathcal{H}}{2}} s\left(\frac{\Delta\mathcal{H}}{2}\right)$$

con  $s(z) = s(1/z)$  y  $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\phi') - \mathcal{H}(\phi)$

Solución de Metrópolis:  $s(z) = \min(z, 1/z)$  que conduce a:

$$g(\phi \rightarrow \phi') = \min(1, e^{-\Delta\mathcal{H}}) \in (0, 1)$$

- Problema: Probabilidad de aceptación puede ser muy baja, de orden  $e^{-O(N)}$ .
- Solución: Hacer cambios pequeños  $\phi \rightarrow \phi'$  de manera que  $\Delta\mathcal{H}$  sea pequeño.

Solo cambiar una de las  $N$  variables:

$$\phi \rightarrow \phi'$$

$$(\phi_1, \dots, \phi_{i-1}, \phi_i, \phi_{i+1}, \dots, \phi_N) \rightarrow (\phi_1, \dots, \phi_{i-1}, \phi'_i, \phi_{i+1}, \dots, \phi_N)$$

- Problema: Configuraciones altamente correlacionadas.
- Solución: No existe en general.

- Ejemplo: Modelo de Ising

$$\phi_i = S_i = \pm 1, \quad \mathcal{H} = -J \sum \langle i, j \rangle S_i S_j$$

Propuesta: Escoger  $i$  aleatoriamente.

$$S'_i = -S_i \quad J \left( \frac{S'}{S} \right) = 1$$

$$g(1 \rightarrow -1) = g(-1 \rightarrow 1)$$

/item Ejemplo: Modelo  $\varphi^4$

$$\phi_i = \varphi_i \in (-\infty, \infty)$$

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{-a}{2} \varphi_i^2 + \frac{b}{4} \varphi_i^4 \right) - J \sum_{\langle i, j \rangle} \varphi_i \varphi_j$$

Propuesta: Escoger  $i$  aleatoriamente.

$$\varphi'_i \in (\varphi_i - \delta, \varphi_i + \delta) \rightarrow \varphi'_i = \varphi_i + \delta(2\text{ran}() - 1)$$

- Unidad de tiempo: 1 paso MC = N intentos de actualizar
- Tiempo de correlación en estos algoritmos locales

$$\tau \sim \left(1 - \frac{T}{T_C}\right)^{-z\nu} \sim \xi^z$$

Cerca de  $T = T_C$ ,

$$\tau \sim L^z \quad z \approx 2$$

Intuitivamente: Para descorrelacionar hay que cambiar de signo una región

de tamaño  $\xi$ . Movimiento difusivo de tiempo  $\tau \sim \xi^2$ .

- Dinámica Molecular
- Integrar ecuaciones de Newton.

$$\frac{dx_i}{dt} = p_i$$

$$\frac{dp_i}{dt} = F_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i}$$

- Colectividad microcanónica  $\mathcal{H}(X, P) = E = \text{constante}$
- Integración numérica. Diferentes algoritmos:

Salto de la rana ("leap-frog"):

$$x_i(t + \delta t) = x_i(t) + \delta t \left( p_i(t) + \frac{\delta t}{2} F_i(t) \right)$$

$$p_i(t + \delta t) = p_i(t) + \frac{\delta t}{2} (F_i(t) + F_i(t + \delta t)), \quad i = 1, \dots, n$$

- Este algoritmo respeta dos propiedades exactas de la dinámica Hamiltoniana:

(1) Reversibilidad. Si:

$$(X(t), P(t)) \xrightarrow{\delta t} (X(t + \delta t), P(t + \delta t))$$

entonces:

$$(X(t + \delta t), -P(t + \delta t)) \xrightarrow{\delta t} (X(t) + 2\delta t, P(t) + 2\delta t) = (X(t), -P(t))$$

(2) Invariancia de área:

$$J \left( \frac{X(t + \delta t), P(t + \delta t)}{X(t), P(t)} \right) = 1$$

- No respeta conservación de energía:

$$\Delta cH = \mathcal{H}(t + \delta t) - \mathcal{H}(t) \neq 0 \quad O[(\delta t)^m]$$

- Problemas de estabilidad,  $\delta t$  ha de ser pequeño.
- Errores sistemáticos. No se muestrea la colectividad microcanónica exacta-

mente.

- La temperatura se determina a posteriori.

- La integración numérica introduce una dinámica en el espacio de las fases que

”casi” conserva energía.

- Monte-Carlo Híbrido

Sistema=  $\phi = (\phi_1, \dots, \phi_N), \mathcal{H}(\phi)$

Variables auxiliares, ”momentos”  $Q = (q_1, \dots, q_N)$

Hamiltoniano:  $\hat{\mathcal{H}}(\phi, Q) = \mathcal{H}(\phi) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N q_i^2$

$$e^{-\hat{\mathcal{H}}} = e^{-\mathcal{H}} e^{-\sum_{i=1}^N \frac{q_i^2}{2}}$$

Desde el punto de vista estadístico,  $(q_1, \dots, q_N)$  son variables aleatorias gaus-

sianas independientes de las  $\phi$ .

- Dinámica:

- Balance Detallado:

$$dQe^{-\frac{Q^2}{2}}d\phi e^{-\mathcal{H}(\phi)}g(\phi \rightarrow \phi') = dQ'e^{-\frac{Q'^2}{2}}d\phi' e^{-\mathcal{H}(\phi')}g(\phi' \rightarrow \phi)$$

(1) Si se verifica reversibilidad temporal:  $Q'' = -Q'$

(2) Si se conserva el área:  $dQd\phi = dQ'd\phi' = dQ''d\phi'$

$$e^{-\frac{Q^2}{2}}e^{-\mathcal{H}(\phi)}g(\phi \rightarrow \phi') = e^{-\frac{Q'^2}{2}}e^{-\mathcal{H}(\phi')}g(\phi' \rightarrow \phi)$$

$$e^{-\hat{\mathcal{H}}(\phi, Q)}g(\phi \rightarrow \phi') = e^{-\hat{\mathcal{H}}(\phi', Q')}g(\phi' \rightarrow \phi)$$

Posible solución:

$$g(\phi \rightarrow \phi') = \min(1, e^{-\delta\hat{\mathcal{H}}}), \quad \delta\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(t + \delta t) - \hat{\mathcal{H}}(t)$$

$\delta\hat{\mathcal{H}}$  es controlable.  $\delta\hat{\mathcal{H}} \sim O[N(\delta t)^m]$

- Implementación:

1) Generar momentos aleatoria gaussianos independientes  $Q$ .

2) Evolucionar sistema  $(\phi, Q)$  usando leap-frog u otro método adecuado, durante  $\Delta t = n\delta t$ .

3) Calcular  $\Delta\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}(t + \Delta t) - \hat{\mathcal{H}}(t)$

4) Aceptar la configuración  $\phi'$  con probabilidad  $\min(1, e^{-\Delta\hat{\mathcal{H}}})$

- Esfuerzo ocputacional:

$$\langle \Delta \hat{\mathcal{H}} \rangle = O[1] \rightarrow N(\delta t)^m = O[1] \rightarrow \delta t \sim N^{-1/m} = L^{-d/m}$$

$$\Delta t = O[1] \rightarrow n\delta t = O[1] \rightarrow n \sim L^{d/m} = L^c$$

Esfuerzo computacional:

$$\tau_{\mathcal{O}} \sim L^{c+z}$$

- $\phi$  ha de ser variable real
- Fácil de implementar para cualquier sistema
- Actualización global. Sólo un cálculo de  $\hat{\mathcal{H}}$  por paso Monte-Carlo
  - SU(n)
  - Lennard-Jones

-  $\varphi^4$

- X-Y

- ...

● Problemas:  $z \approx 2$

● Relación con dinámica estocástica de Langevin

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial \tau} = -\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \phi_i} + \xi_i(\tau) = F_i(\tau) + \xi_i(\tau)$$

$$\langle \xi_i(\tau) \xi_j(\tau') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(\tau - \tau')$$

Solución estacionaria:

$$P_{st}(\phi) = \frac{e^{-\mathcal{H}}}{\mathcal{Z}}$$

Solución numérica (algoritmo de Euler):

$$\phi_i(\tau + \delta\tau) = \phi_i(\tau) + \delta\tau F_i(\tau) + \sqrt{(2\delta\tau)}q_i(\tau)$$

Que es análoga a la solución leap-frog si hacemos la correspondencia:  $\delta\tau =$

$\delta t^2/2$ .

- Monte-Carlo Híbrido es como Langevin, pero se acepta o rechaza la configuración después de  $n$  pasos.
- Se eliminan así los errores de discretización.

## EL METODO DE MONTE-CARLO HIBRIDO GENERALIZADO

- Aplicación:

$$(\phi, Q) \rightarrow (\phi', Q')$$

(1) Reversible temporal

(2) Conserva área

(3)  $\Delta\hat{\mathcal{H}} \approx 0$

Solución leap–frog de la dinámica hamiltoniana

Asignar a cada variable  $\phi_i$  un vector  $\vec{q}_i = (q_i^1, \dots, q_i^D)$

Ecuaciones dinámicas:

$$\frac{d\phi_i}{dt} = \sum_{s=1}^D \sum_{j=1}^N (\mathcal{A}^s)_{ij} q_j^s$$

$$\frac{dq_i^s}{dt} = \sum_{j=1}^N (\mathcal{A}^s)_{ji} F_j, \quad s = 1, \dots, D$$

O en notación vectorial más compacta:

$$\frac{d\phi}{dt} = \sum_{s=1}^D \mathcal{A}^s q^s$$

$$\frac{dq^s}{dt} = (\mathcal{A}^s)^T F$$

$\mathcal{A}^s$  operadores lineales. Matriz  $(\mathcal{A}^s)_{ij}$

$$F_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi_i}$$

Conservan energía:

$$\frac{d\hat{\mathcal{H}}}{dt} = 0$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \mathcal{H}(\phi) + \sum_{i=1}^N \sum_{s=1}^D \frac{(q_i^s)^2}{2}$$

$q_i^s$  son variables aleatorias Gaussianas independientes.

Para la integración numérica usamos leap-frog:

$$\phi' = \phi + \delta t \sum_{s=1}^D \mathcal{A}^s q^s + \frac{(\delta t)^2}{2} \sum_{s=1}^D \mathcal{A}^s (\mathcal{A}^s)^T F(\phi)$$

$$q^{s'} = q^s + \sum_{s=1}^D (\mathcal{A})^T [F(\phi) + F(\phi')]$$

Aceptar  $\phi'$  con probabilidad  $\min(1, e^{-\delta \hat{H}})$

- Monte-Carlo híbrido normal se recupera con

$$D = 1 \quad \mathcal{A}^s = 1$$

- Cualquier conjunto de matrices  $\mathcal{A}^s$  es válido siempre que se permita recorrer

todo el espacio  $(\phi)$ .

- Actualizaciones globales con correlaciones de largo alcance.

- Posibilidad de introducir leyes de conservación

Modelo  $\varphi^4$  con parámetro de orden conservado:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{-a}{2} \varphi_i^2 + \frac{b}{4} \varphi_i^4 \right) - J \sum_{\langle i,j \rangle} \varphi_i \varphi_j$$

$\varphi_i$  = diferencia de concentraciones de dos metales en una aleación binaria.

Elección  $D = d$ :

$$(\mathcal{A}^1, \dots, \mathcal{A}^d) = (\partial_1, \dots, \partial_d)$$

Hay una ley de conservación exacta:

$$\Phi = \sum_{i=1}^N \varphi_i$$

Ecuaciones de leap-frog

$$\varphi'_i = \varphi_i - \frac{\delta t^2}{2} \nabla^2 F_i(\varphi) + \delta t \vec{q}_i$$

- Hace exacto métodos de integración de la ecuación de Langevin con un paso

temporal matricial

- Implementación exacta de aceleración de Fourier