

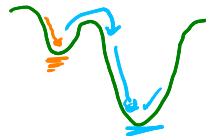
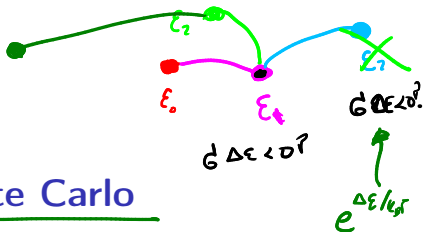


# Método Monte Carlo

Giovanni Ramírez García, PhD

Escuela de Ciencias Físicas y Matemáticas  
Universidad de San Carlos de Guatemala

Guatemala, 7 de mayo de 2021



## Introducción

### Método Monte Carlo por aplicaciones

Integración numérica por el método Monte Carlo

Método Monte Carlo aplicado en Mecánica Estadística

# Introducción

## Método Monte Carlo por aplicaciones

Integración numérica por el método Monte Carlo

Método Monte Carlo aplicado en Mecánica Estadística

## ¿Qué es una simulación Monte Carlo?

- ▶ En una simulación Monte Carlo intentamos seguir la dependencia temporal de un modelo estocástico.
- ▶ Antes de que se usara el método Monte Carlo, las simulaciones se usaban para estudiar problemas deterministas.
- ▶ El experimento de la aguja de Buffon para estimar el valor de  $\pi$  se considera una variante del método Monte Carlo.
- ▶ La versión moderna del método de Monte Carlo fue inventada a finales de los años 1940 por Stanisław Ulam quien trabajaba en el Laboratorio de Los Álamos.
- ▶ John von Neumann diseñó una forma sistemática del método y lo programó en la computadora ENIAC para el estudio de la difusión de neutrones. von Neumann estimó que el cálculo de la acción de 100 neutrones con 100 colisiones cada uno tomaría 5 horas.
- ▶ En 1948 se hizo una de las primeras aplicaciones del método a un problema determinista cuando Enrico Fermi, Ulam y von Neumann estudiaron los valores singulares de la ecuación de Schrödinger.

# ¿Qué problemas pueden resolverse?



La cantidad de problemas a los que se puede aplicar el método Monte Carlo es inmensa. Esta lista sólo muestra algunas aplicaciones a modo ilustrativo

## en las áreas de ciencias

- ▶ movimiento individual de átomos, de partículas coloidales, de moléculas;
- ▶ movimiento de objetos macroscópicos como los fenómenos de difusión o de crecimiento;
- ▶ estudio de transiciones de fase en sistemas magnéticos;
- ▶ modelos de espines; *cadena*
- ▶ optimización



## en otras áreas

- ▶ medicina;
- ▶ biología;
- ▶ economía;



## Introducción

### Método Monte Carlo por aplicaciones

Integración numérica por el método Monte Carlo

Método Monte Carlo aplicado en Mecánica Estadística

# Integración (I)

- ▶ Si se quiere calcular el área bajo la curva  $f(x)$  y limitada por las rectas  $x = a$  y  $x = b$ , dada por la integral

$$\int_a^b dx f(x).$$

- ▶ Se puede usar el teorema del valor medio que establece que si  $\langle f \rangle$  es el valor medio de  $f$  en  $[a, b]$ , entonces

$$\int_a^b dx f(x) = (b - a) \langle f \rangle,$$

esta relación se suele usar para calcular el valor medio

$$\langle f \rangle = \frac{1}{b - a} \int_a^b dx f(x).$$

*✓ Simpson  
✓ Trapezoidal*

- ▶ Esta definición permite el uso de un método numérico de integración para aproximar  $\langle f \rangle$ .

## Integración (II)

- ▶ Tomando un promedio de  $f$  en un conjunto de  $n$  puntos  $\{x_0, \dots, x_{n-1}\}$  se puede aproximar

$$\langle f \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i).$$

- ▶ Se puede aprovechar la libertad en cómo elegir el conjunto de puntos  $\{x_i\}$ . Por ejemplo, si se toman uniformemente espaciados en  $[a, b]$  usando

$$x_i = a + ih + \frac{1}{2}h, \quad \forall i = 0, \dots, n-1,$$

donde  $h = (b - a)(n - 1)^{-1}$ , se obtiene la regla del punto medio para integración numérica.

- ▶ Mientras más puntos se tomen mejor será la aproximación de  $\langle f \rangle$ . Haciendo un análisis más detallado se puede ver que el error de aproximación decrece con  $n^{-2}$ .



## Integración (III)

- ▶ También se puede elegir el conjunto  $\{x_i\}$  de una forma distinta, por ejemplo dada por

$$x_i = a + ih, \quad \forall i = 0, \dots, n-1,$$



donde  $h = (b - a)/(n - 1)$ . Esta distribución tiene la ventaja de que los puntos inicial y final coinciden con los extremos del intervalo. Sin embargo, el error de aproximación en este caso decrece sólo con  $n^{-1}$ .

- ▶ Otra opción para elegir el conjunto de puntos  $\{x_i\}$  es usar puntos aleatorios uniformemente distribuidos en  $[a, b]$ . A este método se le llama integración por el método Monte Carlo.
- ▶ El análisis de error muestra que el error de aproximación decrece con  $n^{-1/2}$ , es decir es menos preciso que el método de punto fijo. Sin embargo, cuando se aplica este método a funciones definidas sobre el plano  $\mathbb{R}^2$  o sobre el espacio  $\mathbb{R}^3$ , la integración numérica con el método Monte Carlo es más efectiva.

## Integración (IV)

$$X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$$

- La integral con el método de Monte Carlo se estima como el promedio de las muestras aleatorias. Si se considera que la función de densidad de probabilidad de una variable aleatoria  $X \in [a, b]$  está dada por

$$p(x) = \begin{cases} (b-a)^{-1}, & x \in [a, b], \\ 0, & \text{en otra parte.} \end{cases}$$

$$\begin{array}{r} 1 \ (1/6) \\ 2 \ (1/6) \\ \vdots \\ 6 \ (1/6) \\ \hline 3.5 \end{array}$$

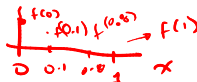
Entonces, la esperanza matemática está dada por

$$\begin{aligned} E(f(X)) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) p(x) \\ &= (b-a) \int_a^b dx f(x), \end{aligned}$$

- Ahora bien, el valor esperado para una muestra grande de números uniformemente distribuidos se aproxima a

$$E(f(X)) \approx \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i),$$

# Integración (V)



- ▶ Entonces, finalmente se tiene el método de integración por el método Monte Carlo

$$\int_a^b dx f(x) \approx \frac{b-a}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i).$$

- ▶ Sin embargo, también podemos usar el método de integración por Monte Carlo para estimar el valor promedio

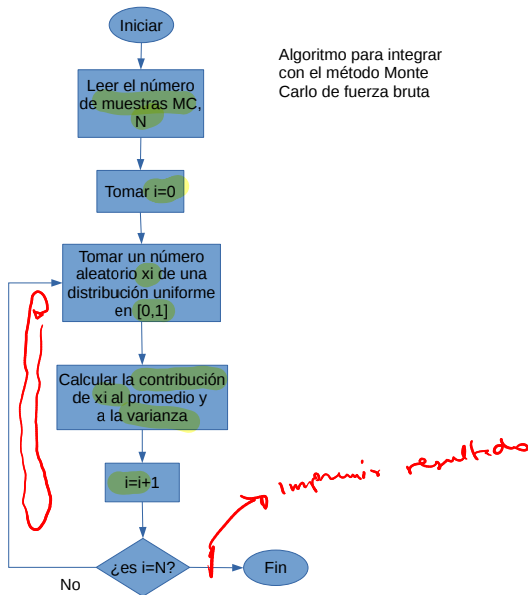
$$\langle f \rangle \approx \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i),$$

y también la varianza  $\sigma^2$ , o la desviación estándar  $\sigma$ , usando  $\sigma^2 = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2$ , es decir

$$\sigma^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)^2 - \left( \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) \right)^2.$$


# Algoritmo de integración por Monte Carlo (fuerza bruta)

Algoritmo para integrar  
con el método Monte  
Carlo de fuerza bruta



## Repaso de conceptos (I)

- ▶ La mecánica estadística en equilibrio se basa en la idea de una función de partición que contiene toda la información esencial del sistema, para un sistema clásico

$$Z = \sum_{\Omega} e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}},$$


donde  $\mathcal{H}$  es el hamiltoniano del sistema a una temperatura  $T$  y  $\Omega$  es el conjunto de todos los estados posibles del sistema.

- ▶ En sistemas pequeños, la función de partición se puede escribir exactamente.
- ▶ En sistemas grandes, se puede escribir la función de partición sólo cuando las interacciones son simples. Sin embargo, aunque no se pueda escribir exactamente, en algunos casos se puede extraer información exacta.

*Carner Transfer Matrix*

## Repaso de conceptos (II)

- ▶ La probabilidad de un estado particular,  $\mu$ , del sistema también se determina usando la función de probabilidad

$$P_{\mu} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\mathcal{H}(\mu)}{k_B T}},$$

donde  $\mathcal{H}(\mu)$  es el hamiltoniano cuando el sistema se encuentra en el estado  $\mu$ .

- ▶ El método Monte Carlo es útil para estimar probabilidades y vamos a tomar esto para estimar probabilidades como  $P_{\mu}$ .
- ▶ También se puede hacer conexiones entre la función de partición y cantidades termodinámicas como la energía libre

$$F = -k_B T \ln(Z).$$

- ▶ Usando esta relación se pueden obtener cantidades termodinámicas como la energía interna

$$U = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right).$$

## Repaso de conceptos (III)

- ▶ También se puede encontrar la entropía

$$S = -k_B \ln(P) = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right)_{V, N},$$

donde  $P$  es la probabilidad de ocurrencia de un estado.

- ▶ Esto implica que la probabilidad de que ocurra un *microestado*  $\mu$  es

$$P_\mu = \exp \left\{ \frac{F - \mathcal{H}(\mu)}{k_B T} \right\} = e^{-S/k_B}.$$

- ▶ El número de microestados es muy grande, así que además estudiar las probabilidades de microestados individuales, también se pueden considerar las probabilidades de variables macroscópicas. Por ejemplo, la energía interna promedio es

$$\bar{U}(\beta) = \langle \mathcal{H}(\mu) \rangle \equiv \sum_{\mu} P_{\mu} \mathcal{H}(\mu) = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{H}(\mu) e^{-\beta \mathcal{H}(\mu)}}{\sum_{\mu} e^{-\beta \mathcal{H}(\mu)}},$$

donde  $\beta = 1/(k_B T)$ .

## Repaso de conceptos (IV)

- Ahora, para calcular las fluctuaciones se usa

$$\langle \mathcal{H}^2 \rangle = \frac{\sum_{\mu} \mathcal{H}^{\mu} e^{-\beta \mathcal{H}(\mu)}}{\sum_{\mu} e^{-\beta \mathcal{H}(\mu)}},$$

de modo que

$$-\left(\frac{\partial U(\beta)}{\partial \beta}\right)_V = \langle \mathcal{H}^2 \rangle - \langle \mathcal{H} \rangle^2 = k_B T^2 C_V,$$

donde  $C_V$  es el calor específico.

- También hay relaciones de fluctuación para otras cantidades, por ejemplo las oscilaciones en la susceptibilidad magnética están relacionadas a las fluctuaciones de la magnetización  $M = \sum_i \sigma_i$ , de modo que

$$k_B T \chi = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 = \sum_{ij} \langle \sigma_i \sigma_j \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle,$$

donde  $\sigma_i$  es el espín en la  $i$ -ésima posición.



$$\langle \sigma_1 \sigma_3 \rangle - \langle \sigma_1 \rangle \langle \sigma_3 \rangle$$



## Repaso de conceptos (V)



- ▶ Además de explorar las probabilidades como  $P_\mu$ , el método Monte Carlo se usa para estudiar transiciones de fase, caracterización de diagramas de fase, etc.
- ▶ Las transiciones de fase cuánticas se pueden estudiar con el método de Monte Carlo cuántico.
- ▶ En una transición de fase, una característica importante es la variación del *parámetro de orden*. En una fase ordenada, el parámetro de orden es uno, y en fase desordenada, el parámetro de orden es cero.
- ▶ Ejemplos de las transiciones de fase son: la magnetización espontánea de un ferromagneto, las diferencias la densidad en sistemas líquidos o gaseosos, las transiciones en cristales líquidos.
- ▶ Existen muchas formas experimentales de medir el parámetro de orden ya que puede ser una cantidad escalar o una cantidad vectorial. En algunas ocasiones el parámetro de orden es un parámetro topológico.



$$\langle f(x)g(x) \rangle = \int dx f(x)g(x-z)$$

Convolution

- ▶ En el caso de una fase no ordenada, el material podría mostrar regiones donde algunas de sus características están correlacionadas, por ejemplo el correlador de dos puntos

$$\Gamma(r) = \langle \rho(0)\rho(r) \rangle,$$

donde  $r$  es una distancia y  $\rho$  es la cantidad cuya correlación se está midiendo.

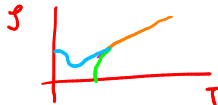
- ▶ También existen funciones de correlación que dependen del tiempo, como las que se usan en el estudio de sistemas dinámicos. Sin embargo, sólo vamos a estudiar funciones de correlación independientes del tiempo.
- ▶ Una función de correlación en una fase desordenada decae con la distancia y se hace cero cuando la distancia tiende al infinito.

## Repaso de conceptos (VII)

Lifshitz - Landau

- ▶ Las transiciones de fase de sistemas en equilibrio pueden ser de primer orden cuando la primera derivada de la función de energía libre es discontinua en un valor de temperatura,  $T_c$ , llamada la temperatura de transición.
- ▶ En las transiciones de segundo orden la primera derivada de la función de energía es continua. Sin embargo, a la temperatura de transición  $T_c$ , la transición se caracteriza por singularidades en la segunda derivada de la función de energía libre.
- ▶ En algunas ocasiones las transiciones de fase no se describen en términos de la temperatura absoluta sino en términos de la *temperatura reducida*

$$t = \left| 1 - \frac{T}{T_c} \right|.$$



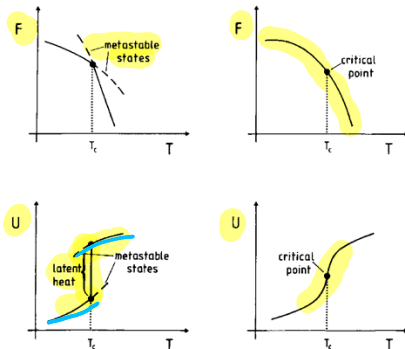
- ▶ Hay que notar que en algunos textos, previos a las ideas de la teoría del grupo de renormalización, la temperatura reducida se representa con  $\epsilon$ .

$$\epsilon = 4 - d \quad \checkmark$$

# Repaso de conceptos (VIII)

Fig. 2.3 (left)  
Schematic temperature dependence of the free energy and the internal energy for a system undergoing a first order transition; (right) schematic temperature dependence of the free energy and the internal energy for a system undergoing a second order transition.

$\mathcal{U}(\tau)$



[Landau y Binder, Segunda edición, 2000.]

- ▶ En una transición de fase de primer orden, las curvas de la energía libre para la fase ordenada y desordenada se cruzan y permiten algunos estados metaestables.
- ▶ En una transición de fase de segundo orden, las dos curvas de la energía libre se encuentran tangencialmente.

# Repaso de conceptos (IX)

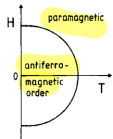
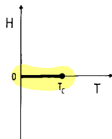
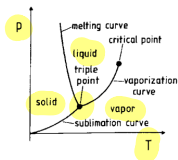


Fig. 2.4 (left) Simplified pressure-temperature phase diagram for water; (center) magnetic field-temperature phase diagram for an Ising ferromagnet; (right) magnetic field-temperature phase diagram for an Ising antiferromagnet.

[Landau y Binder, Segunda edición, 2000.]

- ▶ En un diagrama de fases se muestra la localización de todos los puntos donde ocurren transiciones de fase en el dominio de las variables termodinámicas.
- ▶ En el **diagrama del agua** hay tres transiciones de fase de primer orden en el **punto triple** y una transición de segundo orden en el punto crítico donde termina la línea líquido-vapor.
- ▶ El **diagrama de fases del ferromagneto de Ising** muestra que sin campo a hay una transición de fase a partir de  $T_c$ .
- ▶ El **diagrama de fases del antiferromagneto de Ising**, muestra que la fase antiferromagnética se mantiene aunque  $H \neq 0$ .

## Repaso de conceptos (X)

- ▶ Las singularidades que aparecen en las transiciones de fase se explican expresando las variables termodinámicas como un conjunto de leyes de potencias en la vecindad de la temperatura crítica.
- ▶ Por ejemplo, para una muestra magnética con parámetro de orden  $m$ , calor específico  $C$ , susceptibilidad  $\chi$  y longitud de correlación  $\xi$  se cumple

$$m = m_0 t^\beta,$$

$$C = C_0 t^\alpha,$$

$$\chi = \chi_0 t^{-\gamma},$$

$$\xi = \xi_0 t^{-\nu}.$$

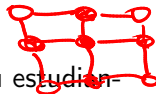
$\langle R^2 \rangle$



donde  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\alpha$  y  $\nu$  son los exponentes críticos. No confundir el exponente  $\beta$  con  $\beta = k_B T$ .

- ▶ La teoría de Landau permite calcular algunos de los exponentes críticos  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 1/2$ ,  $\gamma = 1$ . La teoría de Ginzburg-Landau se obtienen los otros,  $\eta = 0$  y  $\nu = 1/2$ . Aunque estas teorías no se aplican en sistemas de baja dimensionalidad.

# Modelo de Ising (I)



- ▶ El modelo de Ising fue propuesto por Wilhelm Lenz a su estudiante, Ernst Ising, quien lo resolvió en 1D y lo presentó en su tesis [Ising, Z. Physik 31, 253–258 (1925)].
- ▶ El modelo describe el fenómeno de ferromagnetismo en términos de variables discretas que representan el momento dipolar magnético de los átomos que están dispuestos sobre una red.
- ▶ El modelo 1D no presenta transiciones de fase. El modelo 2D si tiene transiciones de fase y fue resuelto por Lars Onsager en 1924.
- ▶ Considere un sistema magnético compuesto por  $N$  partículas con espín  $\sigma_i$  cuya dinámica está dada por el hamiltoniano de Ising

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

donde el espín  $\sigma_i = \pm 1$  apunta hacia arriba o hacia abajo en la dirección del eje de fácil magnetización, cuando hay anisotropía magneto-cristalina.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_{i=1}^N \sigma_i$$



## Modelo de Ising (II)

$$\langle ij \rangle = i, i+1$$

- ▶ Además, la energía de *intercambio*  $J$  se restringe solamente a la interacción entre próximos vecinos.
- ▶  $H$  es un campo magnético y el segundo término representa la energía de Zeeman.
- ▶ El modelo de Ising permite muchas variantes, por ejemplo si se toma el espín cuántico. También se puede estudiar el efecto de interacciones de largo alcance, o de interacciones  $J$  no uniformes, o de campos  $H$  no uniformes.
- ▶ Se puede estudiar el modelo de Ising como una cadena de Markov si se considera que la probabilidad  $P_{\beta}(\nu)$  de pasar al estado  $\nu$  sólo depende del estado de partida  $\mu$ .
- ▶ El algoritmo de Monte Carlo comúnmente usado para resolver el modelo de Ising es el de Metropolis-Hastings, que es una versión de una simulación Monte Carlo basada en una cadena de Markov.



## Modelo de Ising (III)

- ▶ Usando el hamiltoniano del modelo se pueden encontrar magnitudes como la energía promedio

$$E = \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle_T,$$

o la magnetización promedio, *o normalizada*

$$m = M = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i \sigma_i \right\rangle_T.$$

- ▶ En general, el promedio térmico de cualquier observable  $A(\vec{x})$  en el ensamble canónico, en el vector  $\vec{x}$  del espacio de fases, es

$$\langle A(\vec{x}) \rangle_T = \frac{1}{Z} \int d\vec{x} \underbrace{e^{-\mathcal{H}(\vec{x})/(k_B T)}}_{\text{red line}} \underbrace{A(\vec{x})}_{\text{red line}},$$

con

$$Z = \int d\vec{x} e^{-\mathcal{H}(\vec{x})/(k_B T)}.$$

✓

## Modelo de Ising (IV)

- ▶ La densidad de probabilidad está dada por el factor de Boltzmann normalizado

$$p(\vec{x}) = \frac{1}{Z} e^{-\mathcal{H}(\vec{x})/(k_B T)}.$$

- ▶ Sin embargo, o no se está interesado en conocer toda la información que puede darnos  $p(\vec{x})$  o no es posible hacer las integrales en este espacio de fase. El último es el caso más general.
- ▶ Se puede usar el método Monte Carlo para hacer una aproximación para encontrar en valor promedio  $\langle A(\vec{x}) \rangle_T$  mediante un muestreo simple o mediante un *muestreo con importancia*.

# Muestreo simple (I)

- ▶ El método Monte Carlo aplicado en Mecánica Estadística en equilibrio se basa en la idea de aproximar la integral para calcular el valor promedio  $\langle A(\vec{x}) \rangle_T$ .
- ▶ La integral exacta se hace sobre todo el conjunto de estados  $\{\vec{x}\}$  con sus respectivos pesos  $p(\vec{x})$ .
- ▶ Un valor aproximado de la integral se obtiene con un conjunto de  $M$  puntos  $\{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_M\}$  de modo que

$$\overline{A(\vec{x})} = \left( \sum_{\ell=1}^M \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}(\vec{x}_\ell)}{k_B T} \right\} A(\vec{x}_\ell) \right) \left( \sum_{\ell=1}^M \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}(\vec{x}_\ell)}{k_B T} \right\} \right)^{-1},$$

que cuando  $M \rightarrow \infty$  se obtiene el valor exacto.

- ▶ Sin embargo no se pueden aplicar los métodos usados para resolver las integrales de funciones que dependen solo de una variable donde se elegía una red regular de puntos.

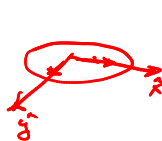
## Muestreo simple (II)

cuántico  
 $S = \frac{1}{2} \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$

clásico  $\sigma_i = S_i$

- Considere el modelo de Ising XY donde  $N$  espines clásicos  $S_i = \pm 1$  interactúan en el plano xy y cuya dinámica está dada por el hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) - H_x \sum_i S_i^x,$$

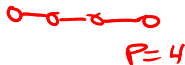


sujeto a  $(S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 = 1$ .

- Dada la restricción en cada sitio  $i$ , es posible hacer una sustitución de variables

$$S_i^x = \cos(\phi_i),$$

$$S_i^y = \sin(\phi_i),$$



de modo que  $0 \leq \phi_i \leq 2\pi$  es la variable que caracteriza los grados de libertad del sistema.

$$2\pi \frac{0}{4}, 2\pi \frac{1}{4}, 2\pi \frac{3}{4}, 2\pi$$

- Usando una red regular  $\phi_i = 2\pi(\gamma_i/p)$ , donde  $p \in \mathbb{N}$  caracteriza la red y  $\gamma_i = 1, 2, \dots, p$ , se usaría un total de  $p^N$  puntos.

## Muestreo simple (III)

$$\frac{\ln}{\mu} \leftarrow \text{c.v.} \quad \frac{\sigma}{\mu} \leftarrow$$

- ▶ Si se toman puntos aleatorios, se obtiene el método de Monte Carlo por muestreo simple.
- ▶ Haciendo un análisis de caminatas aleatorias auto-excluyentes se puede encontrar que la fluctuación relativa

$$\text{c.v.} := \frac{\sigma}{\mu} \propto \frac{1}{N^{1/2}}$$

$$\frac{\langle \mathcal{H}^2 \rangle_T - \langle \mathcal{H} \rangle_T^2}{\langle \mathcal{H} \rangle_T^2} \propto \frac{1}{N}$$

$$\frac{\sigma^2}{\mu^2} \propto \frac{1}{N}$$

- ▶ Esto implica que la distribución de probabilidad de la energía  $E$  por grado de libertad es

$$p(E) = \frac{1}{Z} \int d\vec{x} \delta(\mathcal{H}(\vec{x}) - NE) \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}(\vec{x})}{k_B T} \right\}$$

- ▶ Y, fuera de temperaturas donde ocurren transiciones de fase de primer o de segundo orden,  $p(E)$  tiene una forma gaussiana

$$p(E) \propto \exp \left\{ -\frac{(E - \langle \mathcal{H} \rangle_T / N)^2}{2 C k_B T^2} N \right\}.$$

## Muestreo simple (IV)

$$\int dx f(x) g(x)$$

- ▶ Entonces, el método de muestreo simple significa que la generación de puntos en el espacio de fase  $\{\vec{x}\}$  con una distribución de probabilidad gaussiana  $p(E)$  con un pico en  $E = 0$  y un ancho  $1/\sqrt{N}$ .
- ▶ La probabilidad de generar estados con  $E \sim \langle \mathcal{H}/N \rangle$  es exponencialmente pequeña.
- ▶ Entonces, es necesario buscar una forma distinta de elegir los puntos  $\vec{x}$ .
- ▶ Si los puntos  $\{\vec{x}_\ell\}$  se toman con una distribución de probabilidad  $P(\vec{x}_\ell)$ , el promedio térmico se convierte en

$$\overline{A(\vec{x})} = \left( \sum_{\ell=1}^M \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}(\vec{x}_\ell)}{k_B T} \right\} \frac{A(\vec{x}_\ell)}{P(\vec{x}_\ell)} \right) \left( \sum_{\ell=1}^M \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}(\vec{x}_\ell)}{k_B T} \right\} \frac{1}{P(\vec{x}_\ell)} \right)^{-1}.$$

# Muestreo por importancia (I)

- La función  $P(\vec{x}_\ell)$  más simple y natural es tomar

$$P(\vec{x}_\ell) \propto \exp\left\{-\frac{\mathcal{H}(\vec{x}_\ell)}{k_b T}\right\},$$

para cancelar el factor de Boltzmann, de modo que el promedio térmico es

$$\overline{A(\vec{x})} = \frac{1}{M} \sum_{\ell=1}^M A(\vec{x}).$$

- El algoritmo de Metropolis consiste en tomar estados sucesivos tal que el estado  $\vec{x}_{\ell+1}$  esté relacionado con el estado inmediato anterior  $\vec{x}_\ell$  mediante una probabilidad de transición  $W(\vec{x}_\ell \rightarrow \vec{x}_{\ell+1})$ . [N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, E. Teller: J. Chem. Phys. 21, 1087 (1953)]

## Muestreo por importancia (II)

- ▶ Según Metropolis et al. es posible elegir la probabilidad de transición  $W$  de modo que en el límite  $M \rightarrow \infty$  la distribución de probabilidad  $P(\vec{x}_\ell)$  de los estados generados por este proceso markoviano tiende a la distribución de equilibrio

$$P_{eq}(\vec{x}_\ell) = \frac{1}{Z} \exp \left\{ -\frac{\mathcal{H}(\vec{x}_\ell)}{k_B T} \right\}.$$

- ▶ La condición suficiente para que se llegue a la distribución de equilibrio es imponer el *principio de balance detallado*

$$P_{eq}(\vec{x}_\ell) W(\vec{x}_\ell \rightarrow \vec{x}_{\ell'}) = P_{eq}(\vec{x}_{\ell'}) W(\vec{x}_{\ell'} \rightarrow \vec{x}_\ell),$$

que implica que la razón de probabilidades de transición para ir de  $\vec{x}_\ell \rightarrow \vec{x}_{\ell'}$  y la inversa, para ir de  $\vec{x}_{\ell'} \rightarrow \vec{x}_\ell$  sólo depende del cambio de energía  $\delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\vec{x}_{\ell'}) - \mathcal{H}(\vec{x}_\ell)$ .



## Muestreo por importancia (III)

- ▶ Entonces

$$\frac{W(\vec{x}_\ell \rightarrow \vec{x}_{\ell'})}{W(\vec{x}_{\ell'} \rightarrow \vec{x}_\ell)} = \exp\left\{-\frac{\delta\mathcal{H}}{k_B T}\right\}.$$

- ▶ Aunque esta ecuación no especifica la probabilidad de transición de forma unívoca, frecuentemente se suelen usar

$$W(\vec{x}_\ell \rightarrow \vec{x}_{\ell'}) = \frac{1}{\tau_S} \left( \frac{\exp\{-\delta\mathcal{H}/(k_B T)\}}{1 + \exp\{-\delta\mathcal{H}/(k_B T)\}} \right),$$

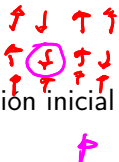
o,

$$W(\vec{x}_\ell \rightarrow \vec{x}_{\ell'}) = \begin{cases} \frac{1}{\tau_S} \exp\{-\delta\mathcal{H}/(k_B T)\} & \delta\mathcal{H} > 0, \\ 1/\tau_S & \text{en otra parte.} \end{cases}$$

donde  $\tau_S$  es un factor arbitrario que cuando se denomina *tiempo Monte Carlo*, a  $W$  se le llama *probabilidad de transición por unidad de tiempo*.

# Algoritmo del método Monte Carlo para el Modelo de Ising

**Entrada:** las dimensiones de la red cuadrada  $W \times H$  y las condiciones de frontera ( $BC = 0$ : abiertas;  $BC = 1$ : cerradas 1D;  $BC = 2$ : cerradas 2D) se leen del archivo `lattice.data`; el número de iteraciones, *samples*, y dos semillas aleatorias se leen del archivo `simulation.data`. **Salida:** la configuración de equilibrio para el sistema se guarda en el archivo `lattice.equiv`. **Requiere:** funciones `CalcularEnergia` y `GenerarConfiguracion`

1. Iniciar.
2. Leer  $W$ ,  $H$ ,  $BC$ , *samples*, *seed1* y *seed2*.
3. Fijar *seed1*. ✓
4. Definir la configuración inicial aleatoria. 
5. Fijar *seed2*. ✓
6. CalcularEnergia. ✓

6. Hacer para  $1 \leq k \leq \textit{samples}$ :
  - 6.1 Elegir un sitio  $i$  aleatorio para considerar un cambio  $S_i \rightarrow -S_i$ .
  - 6.2 Calcular el cambio de energía por el cambio del espín en  $i$ . ✓
  - 6.3 Calcular la probabilidad de transición  $\tau_S W$  para el cambio del espín en  $i$ . ✓
  - 6.4 Elegir un número aleatorio  $r$ .

# Algoritmo del método Monte Carlo para el Modelo de Ising

## 6. *continuación de 6*

6.5 Si  $r < \tau_S W$ , cambiar el espín en  $i$ ; si no dejar la configuración original.

6.6 Hacer la medición que se desee, por ejemplo la magnetización

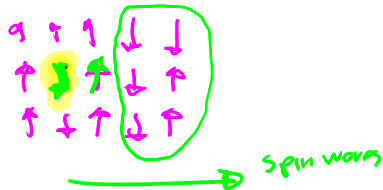
## 7. Guardar la configuración final.

## 8. Fin.

## Comentarios

- ▶ El cambio de espín siempre se acepta con probabilidad  $\tau_S W$ . Es decir, si  $\delta\mathcal{H} < 0$  siempre se acepta la nueva configuración.
- ▶ La diferencia entre configuraciones consecutivas es de solo un espín es por eso que sus propiedades físicas están fuertemente correlacionadas.

## Otros temas



- ▶ Algoritmos de clústers.
- ▶ Optimización con el método Monte Carlo.
- ▶ Aplicación en simulaciones radioactivas.
- ▶ Aplicación para simulaciones de propiedades de transporte
- ▶ Problemas de percolación.
- ▶ Otros modelos de red, modelos *fuera de la red*.
- ▶ Métodos para el estudio de diagramas de fase y transiciones de fase de primer orden.
- ▶ Monte Carlo cuántico.

¡Muchas gracias!

Contacto:

Giovanni Ramírez García, PhD

[ramirez@ecfm.usac.edu.gt](mailto:ramirez@ecfm.usac.edu.gt)

<http://ecfm.usac.edu.gt/ramirez>