# HYBRID MONTE CARLO

Assumiamo di avere un problema di MECC. STATISTICA definito da $Z = \int \prod_i d\phi_i \, e^{-S[\{\phi_i\}]}$

NB Avrei potuto (dovuto?) utilizzare la NOTAZIONE STANDARD per il PESO di GIBBS, i.e. $e^{-\beta H[\{\phi_i\}]}$

Facciamo $\beta H[\{\phi_i\}] \longrightarrow S[\{\phi_i\}]$ perché

1. Nel nostro esempio è la notazione che ci ritroviamo...
2. Nel metodo emergerà un' ALTRA HAMILTONIANA (e alla fine così faremo meno confusione...)

Cerchiamo una MATRICE STOCASTICA, se parliamo formalmente.
Nella pratica cerchiamo una REGOLA per DEFINIRE la (PROBABILITA' di) TRANSIZIONE da una CONFIGURAZIONE ad un' ALTRA $\{\phi_i\} \longrightarrow \{\phi_i'\}$ che

SODDISFI IL BILANCIO DETTAGLIATO

Definiamo la PROBAB. di TRANSIZIONE definendo direttamente la PRESCRIZIONE per passare

$$\{\phi_i\} \longrightarrow \{\phi_i'\}$$

La regola pare stranarella... vediamola

- DEFINISCO un SISTEMA HAMILTONIANO descritto da

$$\mathcal{H}[\{\phi_i, \pi_i\}] = \sum_i \frac{\pi_i^2}{2} + S[\{\phi_i\}]$$

ovvero
- ad ogni grado di libertà $\phi_i$ associo un MOMENTO CONIUGATO $\pi_i$
- tutte le masse sono unitarie
- il termine POTENZIALE in $\mathcal{H}[\{\phi_i, \pi_i\}]$ è dato da $S[\{\phi_i\}]$

- CHI MI FORNISCE le $\{\pi_i\}$, che NON fanno parte del PROBLEMA ORIGINARIO? Le ESTRAGGO con PROBAB. GAUSSIANA

$$P(\{\pi_i\}) = \left(\prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) e^{-\sum_j \frac{\pi_j^2}{2}} \qquad (\bullet)$$

Ora posso definire la REGOLA $\{\phi_i\} \rightarrow \{\phi_i'\}$

1. Estraggo le $\{\pi_i\}$ da $(\bullet)$

2. Faccio evolvere il sistema $\{\phi_i, \pi_i\}$ in accordo alle EQUAZIONI di HAMILTON, ovvero realizzo il FLUSSO HAMILTONIANO

$$\{\phi_i, \pi_i\} \longrightarrow \{\phi_i', \pi_i'\}$$

cioè INTEGRO

$$\begin{cases} \dot{\phi}_K = \dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi_K} = \pi_K \\ \dot{\pi}_K = -\dfrac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi_K} = -\dfrac{\partial S}{\partial \phi_K} \end{cases} \qquad (\bullet\bullet)$$

facendo evolvere il sistema per un tempo $T_0$, a partire dalle CONDIZIONI INIZIALI $\{\phi_i, \pi_i\}$

3. Tengo come $\{\phi_i'\}$ le $\{\phi_i'\}$ così ottenute (notate che "mi dimentico" delle $\{\pi_i'\}$ ...)

Osservazioni

(a) la notazione è infelice perché $\{\phi_i, \pi_i\}$ sono le condiz. iniziali del flusso, ma compaiono nelle equaz. del moto come variabili... Infelice, ma spero non equivoca...

(b) Notate che $T_0$ è un PARAMETRO TECNICO, ad ora non meglio specificato (dovrò chiedermi: come lo scelgo?)

(c) A tutti gli effetti pratici, avrò bisogno di uno SCHEMA NUMERICO per integrare le equaz. di Hamilton. Qui penso indoviniate la risposta

SCELGO di integrare le (••)
con LEAP-FROG

(d) Notare che questo introduce un secondo PARAMETRO TECNICO, il $\delta t$ (passo temporale nella integrazione LEAP FROG)

Perché funziona?

Ricordate il BILANCIO DETTAGLIATO?

$$W_{ij}\,\pi_j = W_{ji}\,\pi_i$$

La nostra $\pi$ è il PESO di GIBBS $e^{-S[\{\phi_i\}]}$

(Ricordate che in $W_{ij}$ vale $W_{ij} = P(i \leftarrow j)$)

Devo mostrare che

$$e^{-S[\{\phi_i\}]}\,P(\{\phi_i\}\to\{\phi_i'\}) = e^{-S[\{\phi_i'\}]}\,P(\{\phi_i'\}\to\{\phi_i\})$$

Ora $\quad P(\{\phi_i\}\longrightarrow\{\phi_i'\}) = \int D\pi\, D\pi'\; P_G(\{\pi_i\})\, P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i,\pi_i\}\to\{\phi_i',\pi_i'\})$

dove
- devo integrare sulla prob. di estrarre i momenti $\{\pi_i\}$ in accordo a $P_G(\{\pi_i\})$
- devo SOMMARE sulle $\{\pi_i'\}$ perché "NON LE GUARDO" (probabilità marginale)
- $P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i,\pi_i\}\to\{\phi_i',\pi_i'\})$ è la PROB. che si realizzi il FLUSSO HAMILTONIANO

$$\{\phi_i,\pi_i\}\longrightarrow\{\phi_i',\pi_i'\}$$

(NB $D\pi = \prod_j d\pi_j$)

<u>ATTENZIONE!</u> Dalle proprietà delle equazioni di HAMILTON

$$P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i,\pi_i\}\to\{\phi_i',\pi_i'\}) = P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i',-\pi_i'\}\longrightarrow\{\phi_i,-\pi_i\})$$

Dal fatto che $P_G(\{\pi_i\}) = P_G(\{-\pi_i\})$

e dal fatto che $e^{-S[\{\phi_i\}]} P_G(\{\pi_i\}) = \left(\prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i, \pi_i\}]} =$

$$= \left(\prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right) e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i', \pi_i'\}]} = e^{-S[\{\phi_i'\}]} P_G(\{\pi_i'\})$$

discende ora (c'è in mezzo un cambio di variabili $\pi \to -\pi$ ...)

$$e^{-S[\{\phi_i\}]} P(\{\phi_i\} \to \{\phi_i'\}) = e^{-S[\{\phi_i'\}]} P(\{\phi_i'\} \to \{\phi_i\})$$

che è il BILANCIO DETTAGLIATO!

Tutto bene, allora, salvo che ABBIAMO USATO la CONSERVAZIONE di $\mathcal{H}(\{\phi_i, \pi_i\}) = \mathcal{H}(\{\phi_i', \pi_i'\})$. Ma abbiamo già visto che LEAP FROG la VIOLA! Che fare?

Ci basta sostituire la prescrizione 3. con la NUOVA

3. Accetto la $\{\phi_i', \pi_i'\}$ con PROB. di ACCETTAZIONE

$$P_A(\{\phi_i, \pi_i\} \to \{\phi_i', \pi_i'\}) = \min\left\{1, e^{-\delta\mathcal{H}}\right\}$$

$$\text{con } \delta\mathcal{H} = \mathcal{H}(\{\phi_i', \pi_i'\}) - \mathcal{H}(\{\phi_i, \pi_i\})$$

Quindi, in caso di accettazione, tengo $\{\phi_i'\}$ come nuova configurazione. Se non passo questo TEST di METROPOLIS, la mossa diventa $\{\phi_i\} \to \{\phi_i\}$

Ora vale

$$P(\{\phi_i\}\to\{\phi_i'\}) = \int \mathcal{D}\pi\mathcal{D}\pi' P_G(\pi)\, P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i,\pi_i\}\to\{\phi_i',\pi_i'\})\, P_A(\{\phi_i,\pi_i\}\to\{\phi_i',\pi_i'\})$$

che ci consente di provare il BIL. DETT. a motivo del fatto che

$$e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i,\pi_i\}]}\, P_A(\{\phi_i,\pi_i\}\to\{\phi_i',\pi_i'\}) = e^{-\mathcal{H}[\{\phi_i',\pi_i'\}]}\, P_A(\{\phi_i',\pi_i'\}\to\{\phi_i,\pi_i\})$$

NB  Mentre posso CORREGGERE per NON-CONSERVAZIONE dell' ENERGIA, devo invece VERIFICARE che valga ancora la REVERSIBILITA'

$$(*)\quad P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i,\pi_i\}\to\{\phi_i',\pi_i'\}) = P_{\mathcal{H}}(\{\phi_i',-\pi_i'\}\to\{\phi_i,-\pi_i\})$$

NB 2  La (*) sulla carta (ovvero in PRECISIONE NUMERICA INFINITA) vale. Dobbiamo però verificare esplicitamente che non fallisca per ERRORI di ROUN-OFF

$\downarrow$

- Questo è uno dei CRITERI che ci deve guidare nella SCELTA dei PARAMETRI TECNICI $T_0$ e $\delta t$
- L'altro criterio che ci deve guidare in questa scelta di $T_0$ e $\delta t$ è la OTTIMIZZAZIONE del (dei) TEMPO (TEMPI) di AUTOCORRELAZIONE INTEGRATO (I)