

# Avance proyecto Método de Monte Carlo de cadenas de Markov de muchas configuraciones (MC<sup>3</sup>)

José Alfredo de León

28 de abril de 2022

# Contenido

Recordatorio del proyecto

Tareas realizadas

Modelo de Sherrington-Kirkpatrick

Algoritmo de Metrópolis-Hastings (MCMC)

Resultados

Conclusiones

De última hora

# Recordatorio del proyecto

El objetivo del proyecto es implementar el nuevo método de Monte Carlo propuesto por Šimkovic y Ross en [arxiv:2103.05613v1](#) en el cual para cada paso Monte Carlo (MC) se explora una configuración de estados y no un único estado. Específicamente, el proyecto consiste en reproducir los resultados de Šimkovic y Ross de su método aplicado para resolver los modelos

- ▶ Sherrington-Kirkpatrick
- ▶ Fermi-Hubbard

# Tareas realizadas

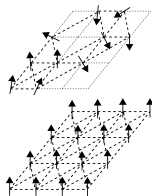
- ▶ Estudiar el modelo de Sherrington-Kirkpatrick.
- ▶ Estudiar el método de Monte Carlo de cadena de Markov (MCMC).
- ▶ Implementar en Mathematica el método MCMC para resolver el modelo de Sherrington-Kirkpatrick.

# Modelo de Sherrington-Kirkpatrick

El modelo de Sherrington-Kirkpatrick es un modelo propuesto en 1975 para modelar vidrios de espín. Es un modelo de Ising en el cual se consideran interacciones ferromagnéticas y paramagnéticas de largo alcance. El Hamiltoniano del modelo está dado por

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j \leq k} J_{jk} \hat{S}_j \hat{S}_k,$$

donde  $L$  es el tamaño de la red,  $J_{jk}$  son los parámetros de interacción y  $\hat{S}_j$  los operadores de espín.



# Algoritmo de Metrópolis-Hastings (MCMC)

## 1. Inicializar la configuración.

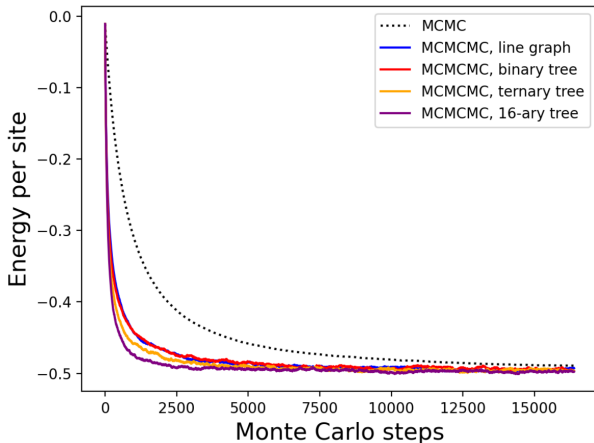
- 1.1 Generar una configuración aleatoria de  $L$  espines  $\{\uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow, \dots, \uparrow\}$ .
- 1.2 Generar los parámetros de interacción reales  $J_{jk}$  con números que obedecen una PDF Gaussiana con media 0 y desviación igual a 1.
- 1.3 Calcular la energía inicial de la configuración  $E_0 = 1/\sqrt{L} \sum_{j \leq k} J_{jk} S_j S_k$ .
- 1.4 Elegir aleatoriamente un sitio  $s$  para “voltear” al espín en ese sitio ( $\uparrow \rightarrow \downarrow$  o  $\downarrow \rightarrow \uparrow$ ).

## 2. Pasos Monte Carlo.

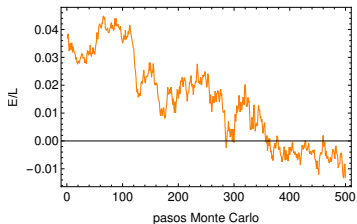
- 2.1 Calcular la energía  $E_f$  de la nueva configuración con el espín en el sitio  $s$  invertido.
- 2.2 Si  $E_f < E_0$ , la nueva configuración es aceptada. Si  $E_f > E_0$ , entonces la nueva configuración se acepta con una probabilidad  $P_{\text{aceptación}} = e^{-(E_f - E_0)/k_B T}$  ( $k_B = 1$ ).
- 2.3 Escoger un nuevo sitio según una PDF Gaussiana con media igual al sitio anterior y desviación estándar igual a 3. Para este paso, se deberán considerar condiciones periódicas.

## Resultados

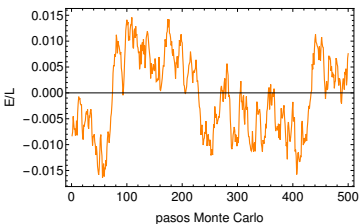
Se implementó el método MCMC para resolver el modelo de Sherrington-Kirkpatrick con una red de tamaño  $L = 10^3$  y a  $T = 1$ .



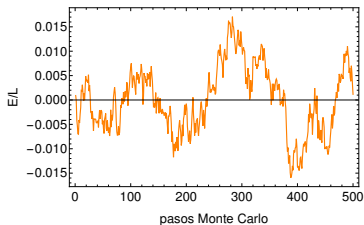
# Resultados



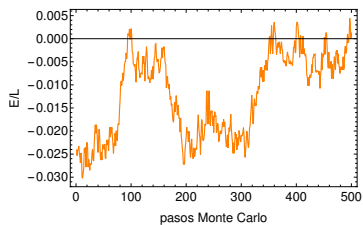
(a)



(b)



(c)



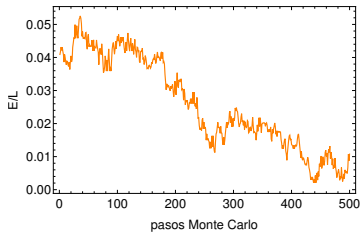
(d)

Figura: PDF constante para escoger sitio en la nueva configuración.

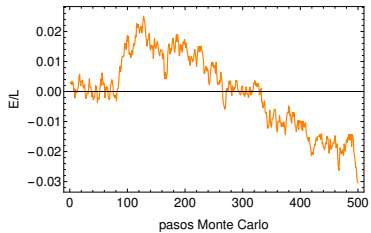


# Hipótesis sobre los errores

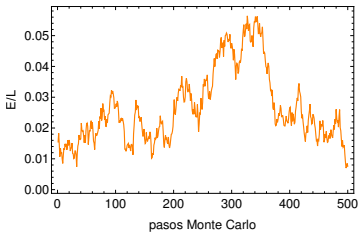
- ▶ La función de distribución de probabilidad que obedece la forma de elegir un nuevo sitio en la red está incorrecto.
- ▶ La probabilidad de aceptación  $P_{\text{aceptación}}$  de una nueva configuración de espines cuando esta aumenta la energía está chueca (acepta demasiados pasos que aumentan la energía).
- ▶ En la configuración inicial se escogen desproporcionadamente más espines en una dirección que en otra.



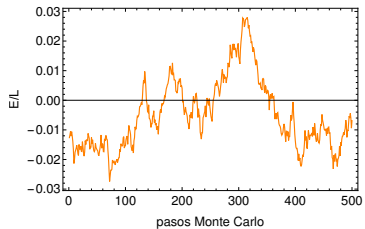
(a)  $\sigma = 2$



(b)  $\sigma = 5$

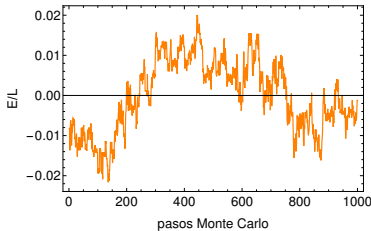


(c)  $\sigma = 10$

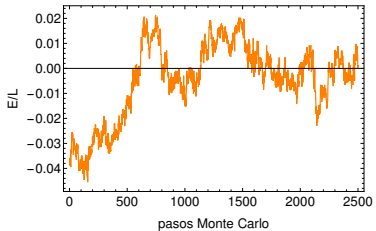


(d)  $\sigma = 50$

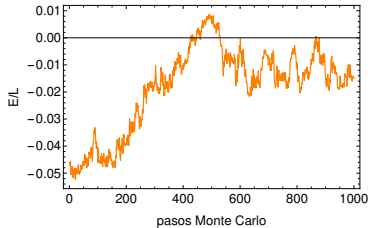
Figura: PDF Gaussiana para escoger sitio en la nueva configuración.



(a)  $P_{\text{aceptación}} = 1/3$



(b)  $P_{\text{aceptación}} = 1/4$



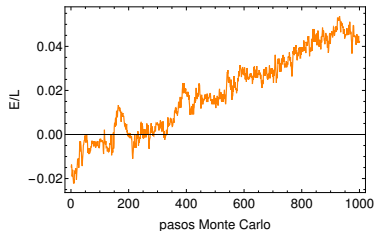
(c)  $P_{\text{aceptación}} = 1/5$

**Figura:** Energía por sitio en función de pasos MC. PDF constante para escoger sitio en la nueva configuración.

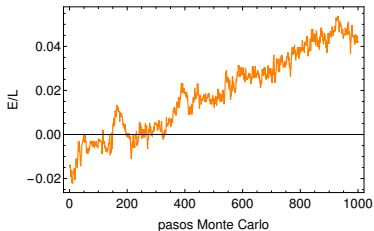
# Conclusiones

- ▶ No hay evidencia para decir si tomar una PDF constante o Gaussiana es mejor para escoger el nuevo sitio.
- ▶ No hay evidencia para sostener la hipótesis de que la  $P_{\text{aceptación}} = e^{-(E_f - E_0)}$  sea la culpable de los resultados.
- ▶ Se revisó que para la configuración inicial se utilice una PDF constante para escoger los espines en ambas direcciones.

## De última hora



(a)



(b)

Figura: El código está chueco. Método MCMC con  $P_{\text{aceptación}} = 0$ .