

Avance en el proyecto de Monte Carlo de cadena de Markov de muchas configuraciones

José Alfredo de León

En este documento se presentan los resultados del avance del proyecto. Se implementó el método de Monte Carlo de cadena de Markov (MCMC) para resolver el modelo de vidrio de espín de Sherrington-Kirkpatrick. La implementación tiene errores y se deben de corregir antes de implementar el nuevo algoritmo MCMCMC propuesto por Šimkovic y Ross en [1]. Se discuten las hipótesis del error en la implementación y las pruebas realizadas para comprobar o refutar dichas hipótesis. Adicionalmente, el tiempo computacional ocupado para estos resultados es considerable para considerar implementar el prototipo correcto de la implementación del método MCMC y MCMCMC en un lenguaje como FORTRAN.

I. RESUMEN DEL PROYECTO

Se planteó como objetivo implementar el nuevo método de Monte Carlo propuesto por Šimkovic y Ross [1], llamado método de Monte Carlo de cadena de Markov (MCMCMC), y reproducir los resultados de [1] en el que se aplica el nuevo método al modelo de Sherrington-Kirkpatrick y Fermi-Hubbard. El método MCMCMC es una generalización del método de Monte Carlo de cadena de Markov (MCMC) en el que la configuración propuesta en cada paso Monte Carlo se propone una configuración de estados y no un estado sólo.

A. Modelo de Sherrington-Kirkpatrick

El modelo de Sherrington-Kirkpatrick fue propuesto en 1975 como un modelo de vidrios de espín. Es un modelo de Ising en el cual se incluyen interacciones entre todos los espines de la red. A diferencia del modelo de Ising, en el modelo de Sherrington-Kirkpatrick se consideran interacciones de largo alcance. La energía del sistema de espines está dada por

$$E(\{J_{jk}\}, \{S_j\}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{j \leq k} J_{jk} S_j S_k, \quad (1)$$

donde J_{jk} son los parámetros de interacción modelados como números reales gaussianos con media cero y varianza igual a uno, L el tamaño de la cadena y S_k los eigenvalores $\{+1, -1\}$.

II. QUÉ SE HA HECHO

Hasta el momento se ha implementado el método de Monte Carlo de cadena de Markov para resolver el modelo de Sherrington-Kirkpatrick en la temperatura crítica $T = 1$ y utilizando una cadena de tamaño $L = 10^3$.

El objetivo era reproducir el resultado de la gráfica de la Fig. 1 para el método MCMC, es decir, la línea punteada negra.

En la siguiente sección describimos con detalle el algoritmo implementado.

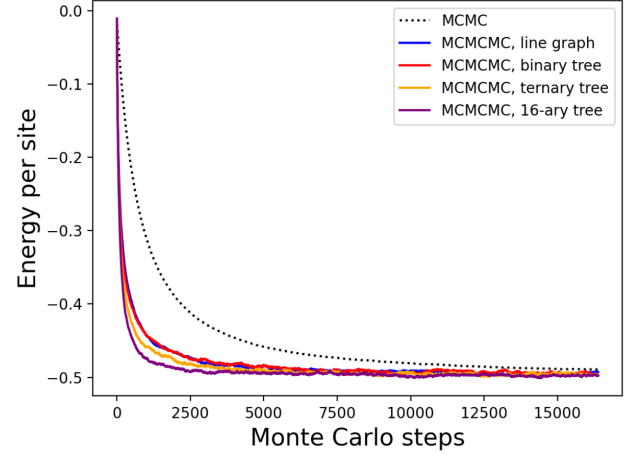


Figure 1. Resultados de Šimkovic y Ross en [1] para el modelo de Sherrington-Kirkpatrick. Los resultados que se quisieron reproducir fue la curva del método MCMC (línea punteada negra).

III. ALGORITMO DE METRÓPOLIS

1. **Inicializar la configuración.** Se debe inicializar una configuración aleatoria antes de comenzar los pasos Monte Carlo.
 - (a) Generar una configuración aleatoria de L espines $\{\uparrow, \downarrow, \downarrow, \uparrow, \dots, \uparrow\}$.
 - (b) Generar los parámetros de interacción reales J_{jk} con números que obedecen una distribución Gaussiana con media 0 y desviación igual a 1.
 - (c) Calcular la energía inicial de la configuración E_0 , siguiendo la expresión en (1).
 - (d) Elegir aleatoriamente un sitio s para “voltar” al espín en ese sitio ($\uparrow \rightarrow \downarrow$ o $\downarrow \rightarrow \uparrow$).
2. **Pasos de Monte Carlo.** Ahora se deberá repetir el paso Monte Carlo hasta que la fluctuación de la energía por sitio (E/L) sea del orden de 10^{-3} .
 - (a) Calcular la energía E_f de la nueva configuración con el espín en el sitio s invertido.

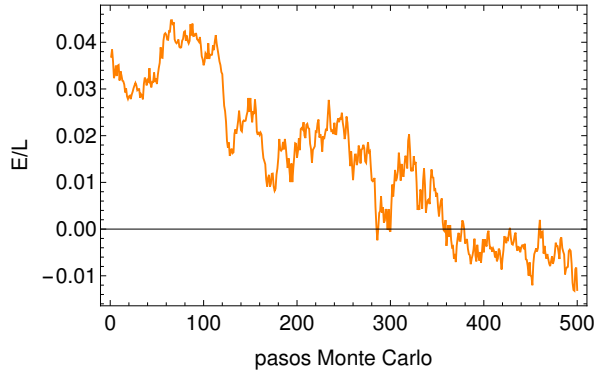


Figure 2. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF constante para escoger sitio en la nueva configuración.

- (b) Si $E_f < E_0$, la nueva configuración es aceptada. Si $E_f > E_0$, entonces la nueva configuración se acepta con una probabilidad de $e^{-(E_f - E_0)/k_B T}$.
- (c) Escoger un nuevo sitio según una probabilidad Gaussiana con media igual al sitio anterior y desviación estándar igual a 3. Para este paso, se deberán considerar condiciones periódicas.

IV. RESULTADOS

En las Figs. 2-14 se muestran los resultados obtenidos hasta ahora de la implementación descrita en la sección IV. Aún sin comparar nuestros resultados con los de Šimkovic y Ross debemos notar que hay un error sistemático en nuestra implementación que se muestran en las gráficas dado que la energía parece aumentar o mantenerse constante.

Se formularon las siguientes hipótesis sobre el error que ocurre:

- La probabilidad con la que se acepta una energía E_f mayor a la energía de la configuración anterior E_0 podría estar incorrecta.
- La función de distribución que obedece la función para escoger el nuevo sitio de cada paso Monte Carlo se está escogiendo incorrectamente.
- En la configuración inicial se están escogiendo desproporcionadamente más espines en una dirección que en otra.

Ahora vamos a comentar sobre cada una de las hipótesis formuladas. Nuestras gráficas de las Figs 2-14 muestran sistemáticamente que nuestra implementación hace que la energía se mantenga constante o aumente en la mayoría de los casos, lo cual nos llevó a pensar que la probabilidad con la que se acepta un paso MC que aumenta la energía es siempre muy grande, por lo tanto, se acepta la mayoría de los casos y está siendo contraproducente para la

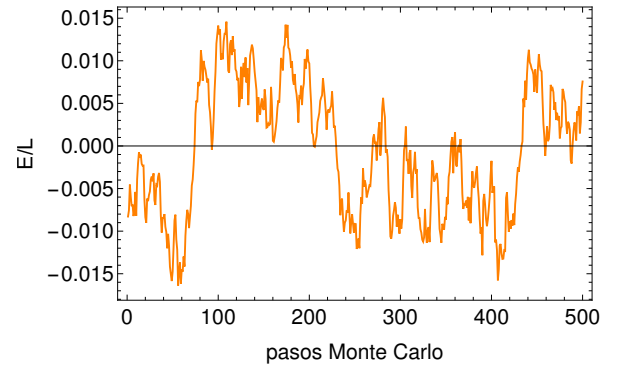


Figure 3. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF constante para escoger sitio en la nueva configuración.

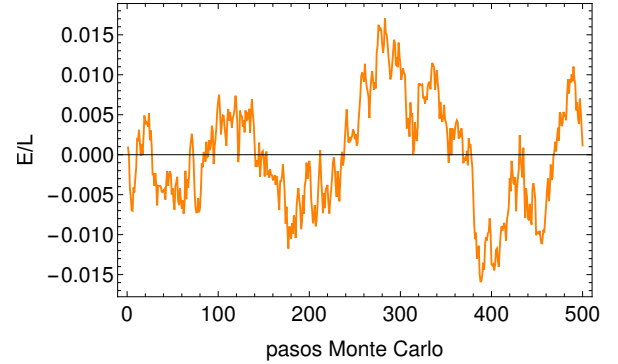


Figure 4. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF constante para escoger sitio en la nueva configuración.

convergencia de la energía. Por esta razón, se corrieron pruebas modificando la probabilidad con la que se acepta un paso MC cuando la nueva configuración aumenta la energía a valores constantes de $1/3$, $1/4$ y $1/5$. Sin embargo, las gráficas en la Figs. 12-14 muestran que el problema no se solucionó de esa manera, lo que nos llevó a inspeccionar las otras hipótesis.

Inicialmente, en el paso MC de la implementación de las gráficas en la Figs. 2-5 se escogió el sitio para invertir

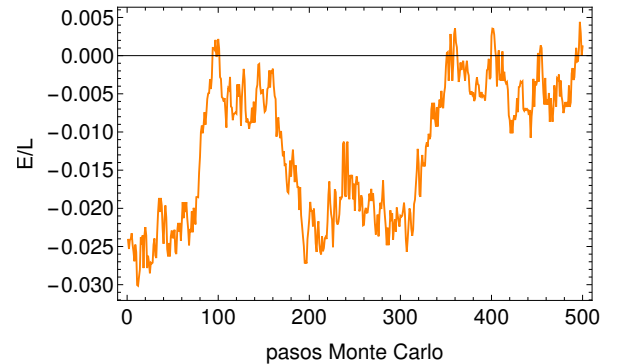


Figure 5. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF constante para escoger sitio en la nueva configuración.

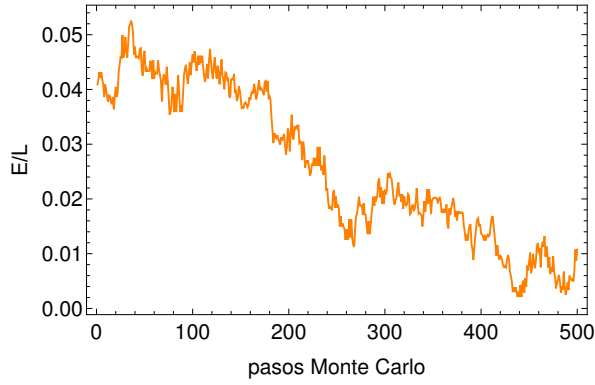


Figure 6. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 2 para escoger sitio en la nueva configuración.

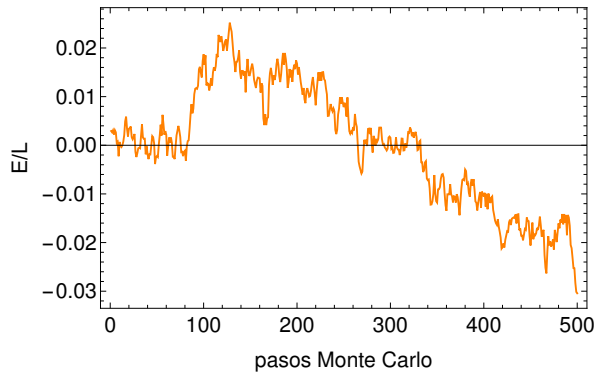


Figure 7. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 5 para escoger sitio en la nueva configuración.

el espín con una función de distribución de probabilidad constante, es decir, todos los sitios en la red eran igual de probables de escogerse. Posteriormente, se modificó la función de distribución para escoger únicamente a los vecinos próximos del sitio anterior. No obstante, la energía seguía sistemáticamente haciéndose constante o aumentando. Lo último que se intentó fue considerar una función de distribución Gaussiana alrededor del sitio escogido anteriormente. Los resultados no son concluyentes para asegurar o refutar que el inconveniente sea la función de distribución de probabilidad con la que se escoge cada nuevo sitio en cada paso MC.

Por último, se verificó que la función de distribución de la cual se escogía la configuración inicial fuese constante, de tal manera que aproximadamente el 50% de los espines se escojan en una dirección y el otro 50% en la otra.

En lo que inmediatamente sigue en el proyecto deberá de detectarse cuál es el error en la implementación del método MCMC antes de implementar el método MCMC. Debe también de comentarse que el tiempo de ejecución, aunque no se midió sistemáticamente ni se presentan los resultados aquí, es de algunos minutos para hacer más de 2000 pasos Monte Carlo para una red de

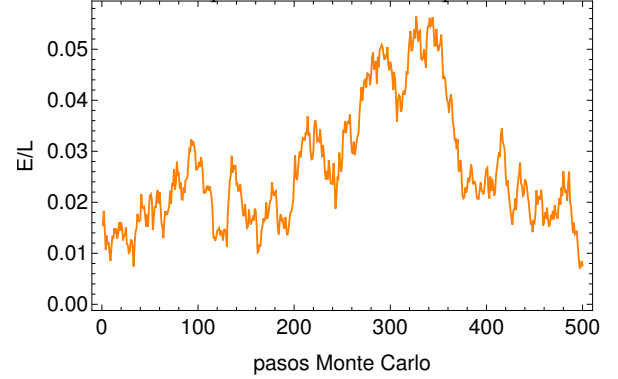


Figure 8. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 10 para escoger sitio en la nueva configuración.

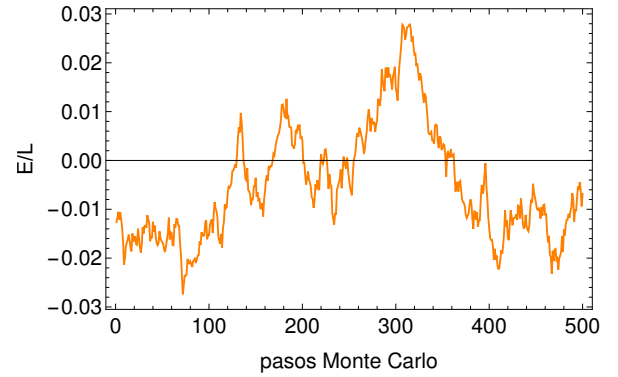


Figure 9. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 50 para escoger sitio en la nueva configuración.

1,000 sitios. Por esa razón, para alcanzar el tamaño de la red de 2^{10} y más de 10,000 pasos MC podría ser deseable implementar el método en un lenguaje no interpretado, como FORTRAN.

En resumen, se debe de revisar una vez más la implementación del método MCMC, implementarlo en un lenguaje no interpretado para poder hacer un prototipo de implementación del método MCMC, que es el objetivo de este proyecto.

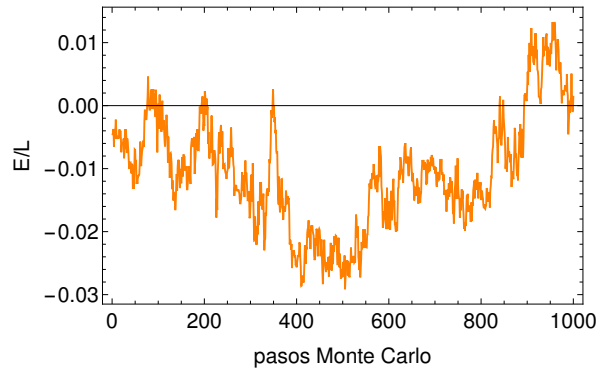


Figure 10. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 3 para escoger sitio en la nueva configuración.

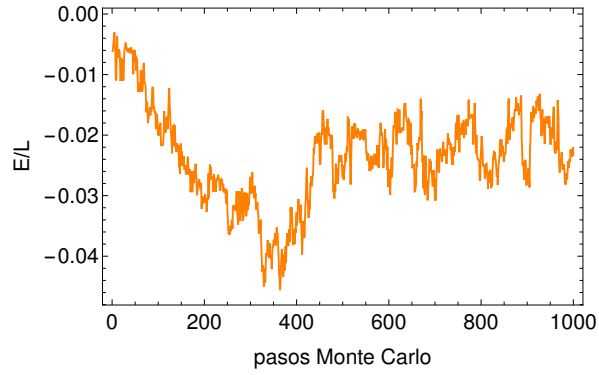


Figure 11. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 2 para escoger sitio en la nueva configuración.

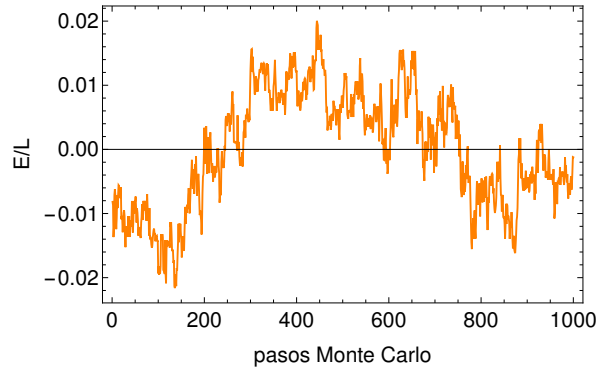


Figure 12. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 2 para escoger sitio en la nueva configuración y probabilidad es aceptar configuraciones de mayor energía igual a $1/3$.

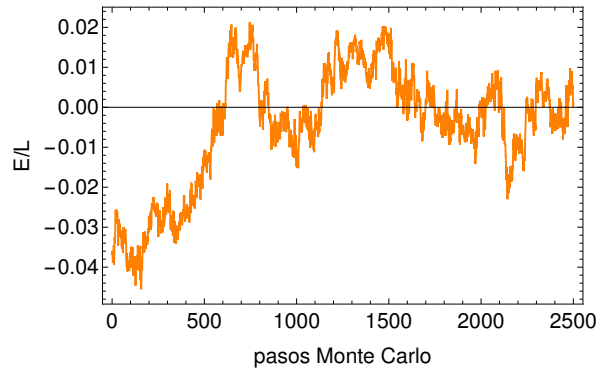


Figure 13. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 3 para escoger sitio en la nueva configuración y probabilidad es aceptar configuraciones de mayor energía igual a $1/4$.

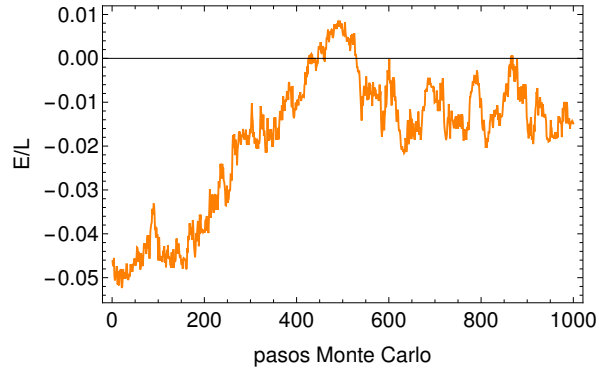


Figure 14. Energía por sitio en función de pasos MC. PDF Gaussiana con desviación = 5 para escoger sitio en la nueva configuración y probabilidad es aceptar configuraciones de mayor energía igual a $1/5$.