

## Método de Monte Carlo

Objetivo: calcular el promedio de una cantidad  $Q$  ó estimador  $\langle Q \rangle$   
 → la mejor forma posible de hacerlo es tomar el promedio de  $Q$  sobre todos los microestados  $\mu$  del sistema, pesando cada uno con su distribución de Boltzmann (Estamos en ensemble canónico):

\* Promedio sobre el ensemble canónico

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{\sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}} \quad (1)$$

$\infty \leftarrow \sum_{\mu}$

\* Recorrer todos los estados es posible sólo en los sistemas más pequeños (o sencillos)

\* En los sistemas más grandes lo mejor que puede hacerse es promediar sobre un subconjunto de microestados ⇒ introducimos índeces.

⇒ El método de Monte Carlo propone elegir el subset de estados al azar utilizando alguna distribución de probabilidades  $P_{\mu i}$  que exponentiamos a priori

\* Si elegimos  $M$  estados,  $\{\mu_1, \dots, \mu_M\}$

⇒ El mejor estimador será:

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} P_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M P_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}} \quad (2)$$

\* Si aumenta  $M$ ,  $\langle Q \rangle$  es más preciso tal que:

$$Q_M \xrightarrow{M \rightarrow \infty} \langle Q \rangle$$

- ¿Cómo elegir bien nuestros  $M$  estados? o mejor aún:
- ¿Cómo elegimos la distribución  $P_\mu$ ?

1. Opción simple: tomar cada estado con igual probabilidad:  $p_i = cte.$

$$\text{Sustituyendo en (2): } Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M p_i e^{-\beta E_{pi}}}{\sum_{j=1}^M e^{-\beta E_{pj}}} \quad (3)$$

Esta elección es muy pobre → sólo puede "samplearse" un número muy pequeño de los fracciones totales de estados y serán aún menos los que tengan una probabilidad significativa

### Ejemplo 1: Modelo de Ising

\* Pensemos Ising en 3D

\* Red cúbica de 10 espines:

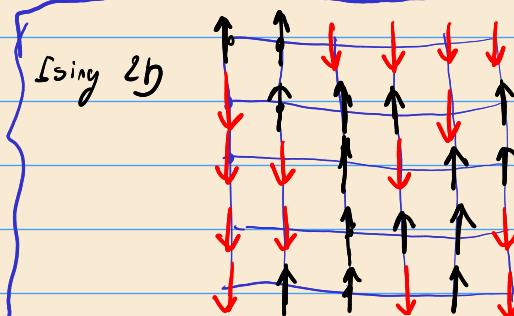
\* N° de espines =  $10 \times 10 \times 10 = 1000$  espines

\* Nro de estados =  $2^{1000} \sim 10^{300}$  estados

\* Una simulación puede muestrear

$\sim 10^8$  estados

⇒ 1 estado en  $10^{292}$



Modelo de Ising: modelo de sistema magnético.

\* Los partículas tienen sólo

un grado de libertad: **spin**

\* El spin tiene sólo 2

estados posibles:

{ Up : ↑  
Down : ↓

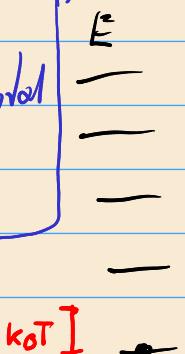
\* El estimador en (1) está dominado por un pequeño número de estados y el resto de los estados (la vasta mayoría!) contribuye marginalmente a un sumando todos juntos.

\* Esto se ve mejor aún a bajas T's cuando estos sumos contribuyen marginalmente porque el sistema está en unos pocos estados (10, 100) porque no hay energía térmica para "sacar" al sistema más allá de los mínimos de energía.

\* Caso extremo: las chances de que uno de los  $10^8$  estados vecinos del fundamental es  $P_{\mu} = \frac{1}{10^{292}}$  ( $\emptyset$  en términos prácticos!)  $\Rightarrow$

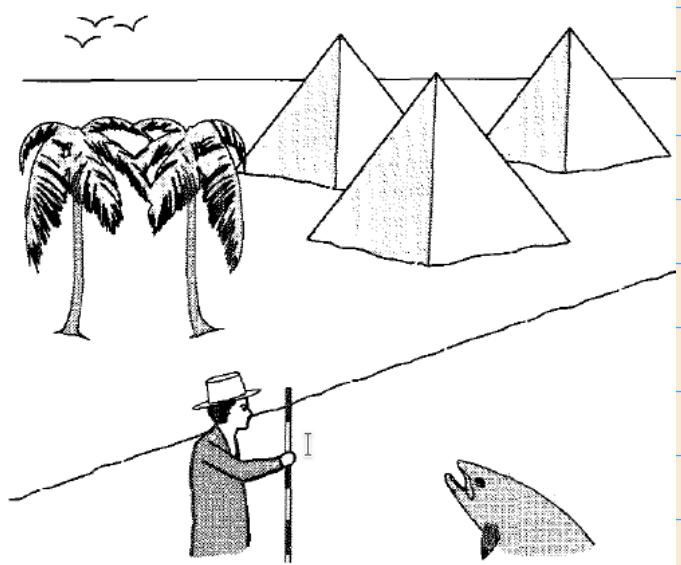
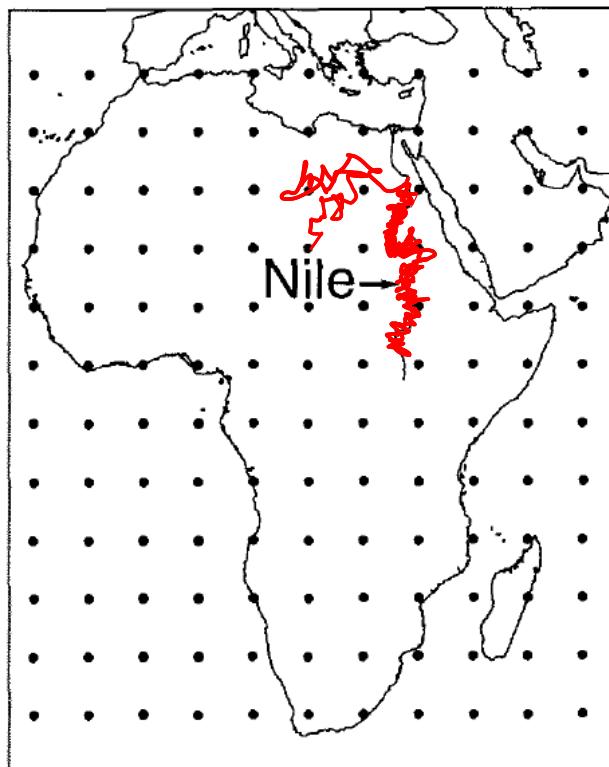
si el sistema está marginando en el estado fundamental (baja temperatura, estados discretos de energía)

$\Rightarrow Q_m$  será muy mal estimación de  $\langle Q \rangle$ , si los sumos están dominados por el fundamental



### Ejemplo 2: Profundidad media de río Nilo

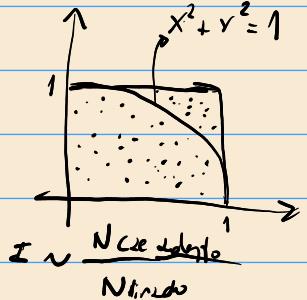
¿Cómo sampleamos para medir eficientemente la profundidad del Nilo?



→ Si pudieramos tomar los  $M$  estados sólo de los "probables", podríamos obtener una buena estimación de  $\langle Q \rangle$  con "pocos"  $M$ .

→ Esa es la idea del método de Monte Carlo → tomar los estados importantes de los muchísimos microestados del sistema → **Muestreo de Importancia** (Importance Sampling)

Otro ejemplo: Cálculo de una Integral Unidimensional



Queremos evaluar una integral 1D:

$$I = \int_a^b dx f(x) \quad (4)$$

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

puede escribirse como:  $I = (b-a) \langle f(x) \rangle$

⇒ podemos evaluar el promedio usando un número muy alto de pasos al azar  $L$ . Verá ser preciso si  $L \rightarrow \infty$

⇒ Si tenemos una función que vale casi 0 en todos lados (la probabilidad del Niño!) y mucho en una pequeña región ⇒ sumar allí es influyente  
⇒ Quisiéramos tirar más puntos en las regiones en donde el integrando es significativo → Importance Sampling  
¿Cómo hacemos?

\* Tomamos el intervalo  $(0,1)$

\* Elegimos una densidad de probabilidad no negativa  $w(x)$  ⇒ (4) puede reescribirse de la forma:

(\*  $w(x)$  está normalizada)  
(por conveniencia tomamos  $a=0, b=1$ )

$$I = \int_0^1 dx w(x) \frac{f(x)}{w(x)} \quad (5)$$

Supongamos que  $w(x)$  es la derivada de otra función  $u(x)$  (no negativa, no creciente de  $x$ ) ⇒  $w(x) = u'(x) \Rightarrow dU = w(x) dx \Rightarrow$

$$\left. \begin{array}{l} u(0)=0 \\ u(1)=1 \end{array} \right\} \quad I = \int_0^1 \frac{dU f[x(u)]}{w[u]} \quad (6)$$

\* Si consideramos a  $U$  como variable de integración  $\Rightarrow x$  debe expresarse como función de  $U$

$\Rightarrow$  Si generamos  $L$  números aleatorios de  $U$  distribuidos uniformemente  $\Rightarrow$

$\Rightarrow$  Estimamos  $I$  como:

$$I \approx \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L \frac{f[x(u_i)]}{w[x(u_i)]}$$

$$\frac{1}{w} \dashrightarrow p_\mu^{-1}$$

\* Lo bueno que sea la aproximación, depende crucialmente de la elección de  $w(x)$ .

Calculemos la varianza  $\sigma_I^2$

$$\sigma_I^2 = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \left\langle \left( \frac{f[x(u_i)]}{w[x(u_i)]} - \left\langle \frac{f}{w} \right\rangle \right) \cdot \left( \frac{f[x(u_j)]}{w[x(u_j)]} - \left\langle \frac{f}{w} \right\rangle \right) \right\rangle$$

\* Como son muestras distintas  $i$  y  $j$  son independientes  $\Rightarrow$  Son  $\otimes$  todos los términos conjugados

$$\Rightarrow \sigma_I^2 = \frac{1}{L^2} \sum_{i=1}^L \left\langle \left( \frac{f[x(u_i)]}{w[x(u_i)]} - \left\langle \frac{f}{w} \right\rangle \right)^2 \right\rangle$$

$$\sigma_I^2 = \frac{1}{L} \left[ \left\langle \left( \frac{f}{w} \right)^2 \right\rangle - \left\langle \frac{f}{w} \right\rangle^2 \right]$$

$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{f(x)}{w(x)} = \text{cte} \\ g(30000) &\sim 0.9 g(0.01) \end{aligned}$$

\*  $\sigma_I^2 \propto \frac{1}{L}$  pero la magnitud de la varianza puede reducirse significativamente eligiendo  $w(x)$  de forma tal que  $f(x)/w(x)$  sea una función suave de  $x$

\* En una situación ideal si  $f(x)/w(x) = \text{cte.}$   $\Rightarrow$  la varianza se hace  $\otimes$  idénticamente.

\* Si  $w(x) = \text{cte.}$  (Monte Carlo fuerza bruta), el error puede hacerse muy grande

$$\text{Tenemos } \langle Q \rangle = \frac{\int d\bar{p}^N d\bar{r}^N \delta(\bar{p}^N, \bar{r}^N) e^{-\beta H(\bar{p}^N, \bar{r}^N)}}{\int d\bar{p}^N d\bar{r}^N e^{-\beta H(\bar{p}^N, \bar{r}^N)}} \quad (7)$$

El integrando del numerador de (7) es no nulo sólo para los casos en los cuales el factor de Boltzmann es no nulo  $\Rightarrow$   
 conviene hacer un muestreo no uniforme de forma que la función de peso  $w(x)$  sea aproximadamente proporcional al factor de Boltzmann

\* No podemos usar ese muestreo ponderado porque no conocemos explícitamente como pasar de:

$$\int_0^1 dx w(x) \frac{f(x)}{w(x)} \rightarrow \int_0^1 du \frac{f[x(u)]}{w[x(u)]}$$

Por ejemplo obtendremos sobre la función de partición. Si la supiéramos no necesitaríamos simulaciones en primer lugar!

$$\text{factor de Boltzmann} = \frac{e^{-\beta E}}{Z_C} \quad \text{No lo sabemos}$$

### Estrategia de Importance Sampling

En lugar de cada estado sea elegido con probabilidad equiprobable (random sampling) con cualquier otro estado, los elegimos tal que la probabilidad de que un estado  $\mu$  particular sea elegido es

$$p_\mu = \frac{1}{Z_C} e^{-\beta E_\mu} \Rightarrow p_\mu^{-1} = Z_C e^{\beta E_\mu}$$

El estimador (2) queda:

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^m Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^m p_{\mu_j}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_j}}} =$$

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^m Q_{\mu_i} \cancel{\frac{p_{\mu_i}^{-1}}{Z_C}} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{j=1}^m \cancel{Z_C} e^{\cancel{\beta E_{\mu_j}}} e^{-\cancel{\beta E_{\mu_i}}}}$$

$$Z_C = Z_C(N, V, T)$$

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{pi}}{\sum_{i=1}^M 1} \Rightarrow Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{pi}$$

\* Esta expresión  $Q_M$  funciona muchísimo mejor que el muestreo equiprobable!

→ Cadena Markov, Método de Metropolis

Bibliografía:

1) Newman y Barkema

2) Smit y Frenkel

Understanding Molecular Simulation  
(Segunda Edición)

