

Tasas de aceptación (acceptance ratio)

Clase 11 2025

{ Repaso }
{ Clase 8 } * Teniendo en cuenta que $P(\mu \rightarrow \mu)$ puede ser no nula (probó de quedarse en caso) \Rightarrow hacemos $\mu = \nu$ en (5):

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{P_\nu}{P_\mu} = \frac{1}{1} = e^{-\beta(E_\mu - E_\mu)} = 1 \quad //$$

\Rightarrow Balance detallado se cumple para cualquier $P(\mu \rightarrow \mu)$

* Puede elegirse un $P(\mu \rightarrow \nu)$ y ajustar $P(\mu \rightarrow \mu)$ para compensar los cambios y así lograr que $\sum_\nu P(\mu \rightarrow \nu) = 1$ siga siendo válida.

* Hay que confirmar que $P(\mu \rightarrow \mu)$ se mantenga.

* Es útil separar la probabilidad de transición en dos partes:

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \underbrace{g(\mu \rightarrow \nu)}_{\text{Probabilidad de selección}} \cdot \underbrace{A(\mu \rightarrow \nu)}_{\text{Probabilidad de aceptación}}$$

$g(\mu \rightarrow \nu) \equiv \left\{ \begin{array}{l} \text{Probabilidad de que dado un estado inicial} \\ \mu \text{ nuestro algoritmo genere un estado objetivo } \nu \end{array} \right\}$

$A(\mu \rightarrow \nu) \equiv \left\{ \begin{array}{l} \text{Si el sistema está en } \mu \text{ y el algoritmo genera} \\ \text{un estado } \nu, \text{ deberíamos aceptar el estado y cambiar} \\ \text{el sistema a ese estado con probabilidad } A(\mu \rightarrow \nu) \end{array} \right\}$

Terminamos Aquí clase 8

El balance detallado queda entonces:

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu) \Lambda(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu) \Lambda(\nu \rightarrow \mu)} \quad \left(= e^{\frac{-p(E_\mu - E_\nu)}{kT}} \right) \quad (1)$$

* $\frac{\Lambda(\mu \rightarrow \nu)}{\Lambda(\nu \rightarrow \mu)}$ puede tomar cualquier valor en $[0, \infty]$

* $g(\mu \rightarrow \nu)$ y $g(\nu \rightarrow \mu)$ pueden tomar cualquier valor.

* $\sum_{\nu} P(\mu \rightarrow \nu) = 1$ se satisface: el sistema debe terminar en algún estado, pero puede ser también el estado de partida μ .

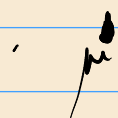
How Monte Carlo \rightarrow Implementar un algoritmo que:

1 - genere nuevos estados ν a partir de los viejos estados μ con probas $g(\mu \rightarrow \nu)$

2 - Aceptar o rechazar los nuevos estados ν con proba $\Lambda(\mu \rightarrow \nu)$, que elegimos de manera tal, que se satisfaga (1).

\Rightarrow Este procedimiento satisface todas las condiciones de las cadenas de Markov y produce una cadena de estados que cualquier estado equilibrio satisface Boltzmann.


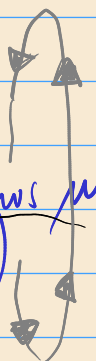
* Esto funciona pero si las probas $\Lambda(\mu \rightarrow \nu)$ de aceptación son muy bajas, el algoritmo es ineficiente.



* Para mantener $A(\mu \rightarrow \nu)$ rigurosos conviene incorporar en $g(\mu \rightarrow \nu)$ lo más posible de las características de los estados μ y ν y lo menos posible en las probas de aceptación $A(\mu \rightarrow \nu)$

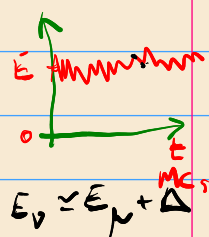
* Un buen algoritmo de MC es aquel en que $A(\mu \rightarrow \nu)$ es lo más alta posible ($A(\mu \rightarrow \nu) \leq 1$)

Algoritmo de Metrópolis (Metrópolis et al. (1953))

- 
- Elegir con una dada $g(\mu \rightarrow \nu)$ un estado ν a partir del μ original
 - Aceptar el estado ν con probabilidad $A(\mu \rightarrow \nu)$
 - si se acepta: cambiamos el sistema al estado ν (y olvidamos μ !)
 - si no se acepta: dejamos al sistema en μ (y olvidamos ν !)
 - Se repite el proceso sucesivamente.
- 

* Las probabilidades de selección $g(\mu \rightarrow \nu)$ deben elegirse para que se cumpla la condición de ergodicidad
(\rightarrow todo estado debe ser accesible desde cualquier otro en un número finito de pasos de la cadena).

Rep. F
(N, V, T)
 \hat{E} fluctúa

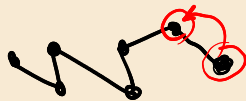


* Sabemos que las energías en el canónico (sistema macroscópico) permanecen en un rango muy angosto \Rightarrow Las fluctuaciones de E son pequeñas respecto de la energía del sistema $\frac{\langle \delta E \rangle}{\langle E \rangle} \ll 1 \approx \frac{1}{\sqrt{N}}$

\Rightarrow El sistema muy rara vez hace transiciones a estados de energía muy distinta. \Rightarrow

Ejemplo:
Ising

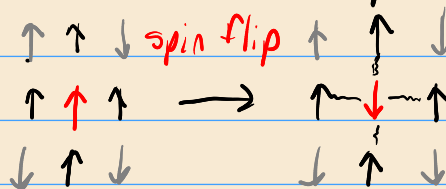
Una forma sencilla de lograr esto en Ising es considerar los estados (nuevos) que difieren del actual sólo en el cambio de un spin (spin flip)



→ Los cambios sucesivos en el sistema, se llaman single-spin-flip dynamics
 Nro. de vecindarios de la red

* Cambiando un spin, el sistema tendrá $E_{\mu} - E_{\nu} \leq 2ZJ$

Ejemplo: Red cuadrada 2-D de espines



Energía: $-4J \rightarrow +4J$

⇒ $|\Delta E| = 8J$ y $\Delta E \leq 8J$, en general.

$$E = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j \in \text{p.v.}} S_i S_j$$

sobre todos los spins
 sobre los primeros vecinos del spin i

* Usando single-spin-flip dynamics también nos aseguramos que se cumple con la condición de ergodicidad: Podemos pasar de un estado a cualquier otro con sucesión de spin-flips y cada nuevo paso de la cadena tiene $P(\mu \rightarrow \nu) \neq 0$ siempre.

Métropolis para el modelo de Ising

- Los $g(\mu \rightarrow \nu)$ se eligen iguales para cada posible ν (estado nuevo con un spin-flip de diferencia con μ).
- Toda otra probabilidad de selección tal que se da vuelta más de un spin tiene $g(\mu \rightarrow \nu) = 0$

Entonces: si tenemos N espines → podemos dar vuelta $N \rightarrow \exists N$ posibles nuevos estados $\nu \Rightarrow$

$$g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{N}$$

→ Nro de espines

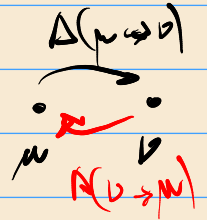
Probabilidad de selección

Conjunto
(NVT)

$$\frac{P_b}{P_\mu} = \frac{e^{-\beta E_b} / \mathcal{Z}}{e^{-\beta E_\mu} / \mathcal{Z}}$$

* La condición de Balance detallado queda:

$$\frac{P(\mu \rightarrow b)}{P(b \rightarrow \mu)} = \frac{\frac{1}{N} g(\mu \rightarrow b) A(\mu \rightarrow b)}{\frac{1}{N} g(b \rightarrow \mu) A(b \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow b)}{A(b \rightarrow \mu)} = e^{-\beta(E_b - E_\mu)} \quad (2)$$



⇒ Tenemos que elegir $A(\mu \rightarrow b)$ para satisfacer (2)

Para tener A lo más grande posible conviene tomar el A más grande de los dos como 1 y ajustar el otro para satisfacer (2)

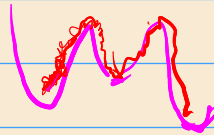
Veamos:

- Si $E_\mu < E_b \Rightarrow$ el más grande de los A es $A(b \rightarrow \mu)$

⇒ Tomamos $A(b \rightarrow \mu) = 1 \Rightarrow A(\mu \rightarrow b) = e^{-\beta(E_b - E_\mu)}$

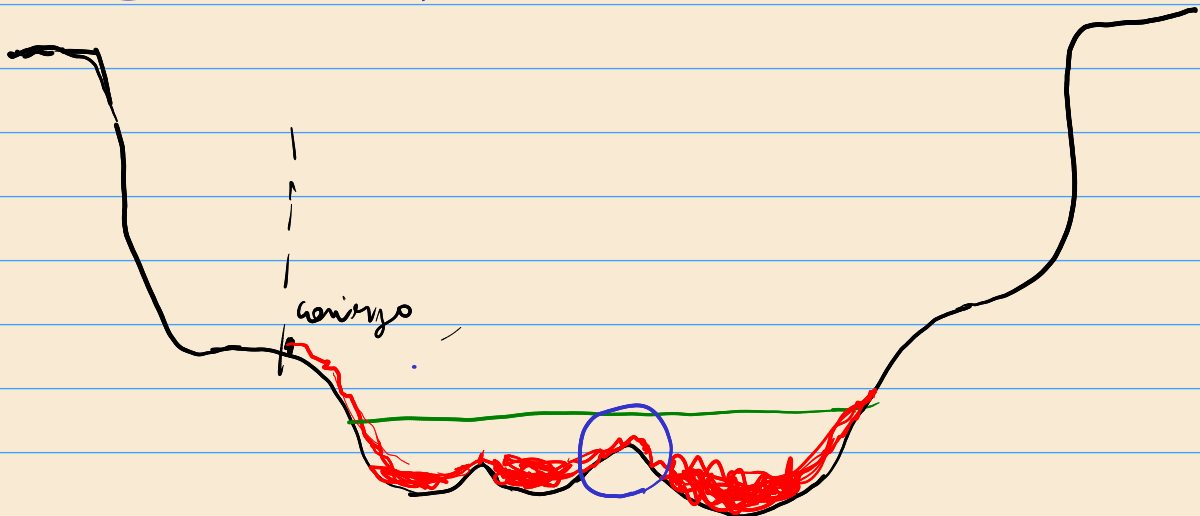
⇒ La probabilidad de aceptar queda:

$$A(\mu \rightarrow b) = \begin{cases} e^{-\beta(E_b - E_\mu)} & \text{si } E_b - E_\mu > 0 \\ 1 & \text{si } E_b - E_\mu \leq 0 \end{cases}$$



* Si elegimos un b con $E_b \leq E_\mu \Rightarrow$ Aceptamos siempre la transición a ese estado

* Si $E_b > E_\mu$ podemos llegar aceptar con probabilidad $e^{-\beta(E_b - E_\mu)}$



Resumen de Metropolis Monte Carlo

1. Elegir una partícula al azar (spin). Calcular E_μ
2. Dar vuelta el spin y calcular E_ν
3. Aceptar la nueva configuración de espines (metriz) con probabilidad

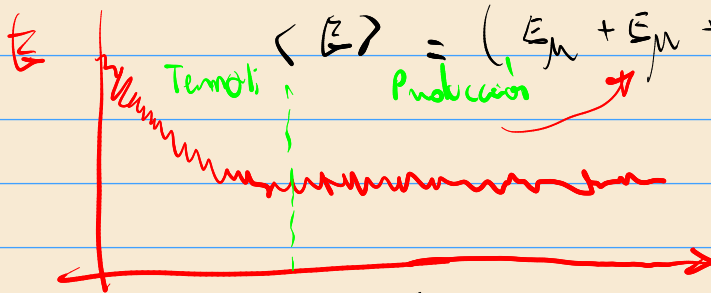
$\mu \xrightarrow{\uparrow} \nu$
 $E_\mu \quad E_\nu$

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min(1, e^{-\beta(E_\nu - E_\mu)})$$

Rutinas del programa de Monte Carlo (bloques de código)

- ciclo sobre pasos de MC (será nuestra cadena de Markov)
- Elegir una partícula al azar
- Calcular la energía de una configuración (calcular la diferencia de energía entre E_ν y E_μ).
- Tirar otro número al azar para decidir si se acepta la nueva configuración
- si aceptamos la nueva configuración \Rightarrow Pasar el sistema a ν (y olvidar μ)
- si no se acepta ν . Dejar el sistema en μ . y olvidar la configuración ν
- Calcular variables de interés. Cantidades físicas.

$$\langle E \rangle = \left(E_\mu + E_\nu + E_\nu + \dots \right) \frac{1}{N}$$



500
 1000
 1500
 2000
 2500
 3000
 3500
 4000
 4500
 5000
 5500
 6000
 6500
 7000
 7500
 8000
 8500
 9000
 9500
 10000