Buenas tardes !

Proyectos MC+DM

La CoNGA physics

Ernesto Medina

Generación de #'s aleatorios

+ Implementación de Montecarlo

- históricamente se generaban con procesos naturales: decaimiento radiactivo, lanzamiento de dados, roulette

#'s correlacionados / no reproducibles

Metropolis + Ulam

idearon los #'s pseudoaleatorios

#'s generados a partir de una semilla / seed

escogidos de manera conveniente

$$X_{t+1} = a X_t + c \pmod{m}$$

Serie determinista pero impredecible

$X_0 = \text{seed}$

$$\frac{X_t}{m} \in [0,1]$$

Funcion modulo

$$\frac{13}{5} = \underbrace{2}_{\text{parte entera}} \Rightarrow 5 \times 2 = 10 \to 3$$

$$13 \bmod (5) = 3$$

$a = c = \underbrace{X_0}_{\text{seed}} = 3 \qquad m = 5$

$$X_{t+1} = 3 X_t + 3 \pmod 5$$

$$2 = X_1 = 3 \cdot 3 + 3 \pmod 5 = \frac{12}{5} = 2 \to 2$$

$4 = X_2 = 3 \cdot 2 + 3 = 9 \Rightarrow \frac{9}{5} = 1 \to 4$

$0 = X_3 = 3 \cdot 4 + 3 = 15 \Rightarrow \frac{15}{5} \to 3 \to 0$

$3 = X_4 = 3 \cdot 0 + 3 = 3 \Rightarrow \frac{3}{5} \to 0 \to 3$

4

Seed repetición!

$\frac{X_t}{5} \to [0,1)$ ✓

periodo $m - 1 = 5 - 1 = 4$

$a = 7^4 \quad c = 0$

$m = 2^{31} - 1$ //

Generadores recursivos múltiples:

$$X_t = (a_1 X_{t-1} + \dots + a_k X_{t-k}) \bmod m$$

$\vec{X}_0$ seed

periodo $m^k - 1$

Gen. L'Ecuyer Cocina

no son modulo

$$X_t = \quad a_2 = 1403580 \qquad m_1 = 2^{32} - 209$$
$$\qquad a_3 = -810728$$

$$Y_t = \quad a_1 = 527612 \qquad m_2 = 2^{32} - 22853$$
$$\qquad a_2 = -1370589$$

period 3×10^{57} ||

$$U_t = \begin{cases} \dfrac{X_t - Y_t + m_1}{m_1 + 1} & \text{if } X_t < Y_t \\ (X_t - Y_t)/m_1+1 & \text{if } X_t > Y_t \end{cases}$$

{ Matlab
Mathematica

Test U01 → Yo busco algoritmos

Tests de #'s aleatorios

Produce #'s aleatorios uniforme

⇒ EJ generar #'s aleatorios
Gaussian / Poisson

<u>Biblia</u> { Ref. Numerical Recipes
Press + Teukolski

Montecarlo de Metropolis - Hastings

- Objetivo: Generación aproximada de muestras de una distribución arbitraria

- Aplicación a mecánica estadística

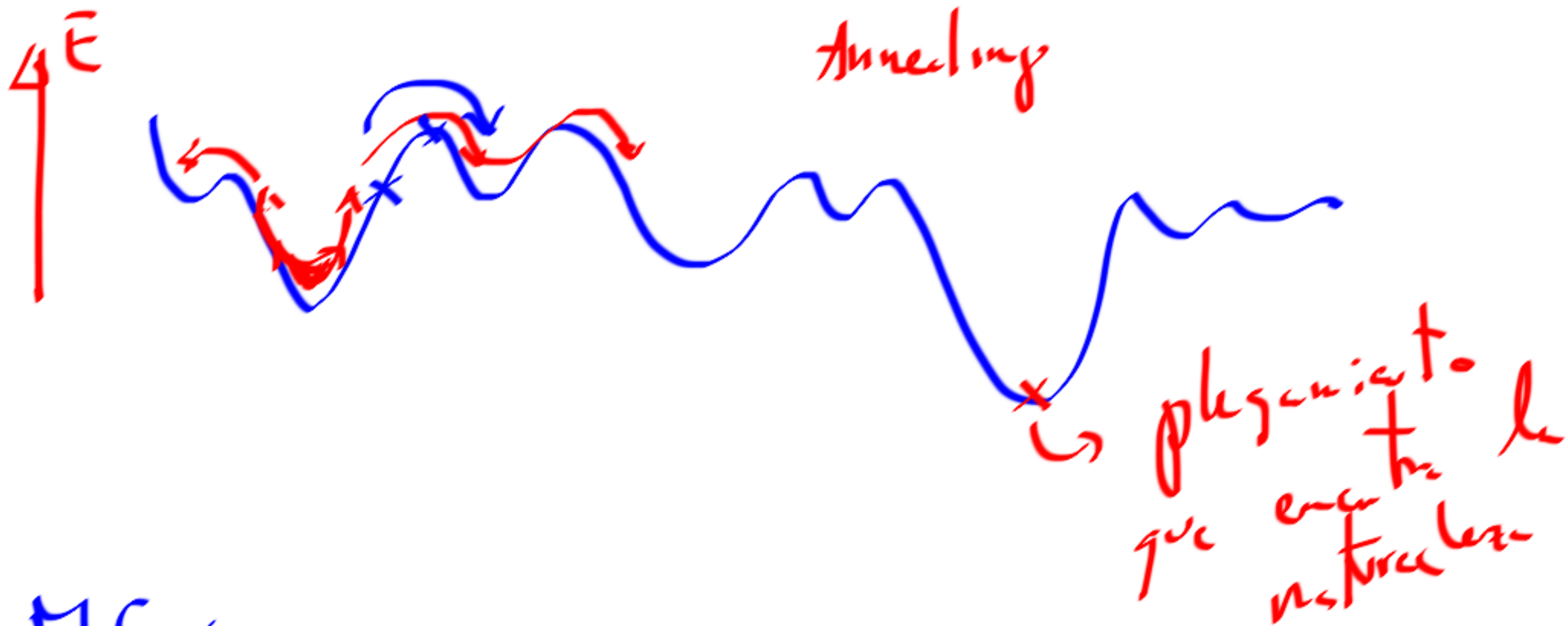
→ Generar una cadena de Markov cuya distribución límite es la del equilibrio del sistema

- Necesitamos asegurar que la cadena de Markov sea ergódica
- Balance detallado

$$\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji} \quad // \rightarrow \text{en el equilibrio}$$

- Sampling = muestreo

problema de optimización y busqueda en espacios complejos de mínimos locales



MC:

- Función / distribución de equilibrio

$$f(\bar{X}) = \frac{P(\bar{X})}{Z}$$

$P(\bar{X}) \rightarrow$ necesitamos MC

$Z \rightarrow$ función de partición

- Definimos una densidad $q(\bar{y}|\bar{x})$ de transición Markoviana para ir de $\bar{x} \to \bar{y}$

<u>Algoritmo</u>

1) Inicializamos con $\vec{X}_0$ donde $f(\bar{x}_0) > 0$ y estado del sistema

2) Para cada tiempo $t = 0, 1, 2, \ldots$ ejecutar lo siguiente

a) Dado el estado actual $\vec{X}_t$

generar $\vec{Y} \Leftarrow q(\vec{y} \mid \vec{X}_t)$

b) Generar un # aleatorio $U \in [0,1]$

escoger el $\vec{X}_{t+1}$

función de aceptación

$$\vec{X}_{t+1} = \begin{cases} \vec{Y} & \text{si } U \le \alpha(X_t, U) \\ \vec{X}_t & \text{si de otra manera} \end{cases}$$

loop

$$\alpha(x,y) = \min \left\{ \frac{f(\vec{y})\, q(\vec{x} \mid y)}{f(\vec{x})\, q(\vec{y} \mid \vec{x})}, 1 \right\}$$

si $\vec{Y}$ es mejor que $\vec{X}$

<u>Modelo de Potts</u> (Generalización del modelo de Ising)

Modelo magnético

$$\vec{X} = (x_1, x_2, \dots, x_j)$$

total de sitios de la red

N, V, T
N, P, T
M, P, T

$X_i \in \{1 \dots K\}$

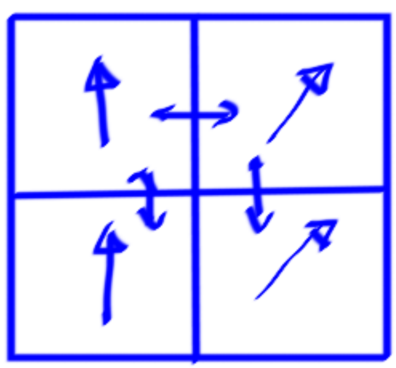
El modelo de Potts de K edos (Ising 2 edos)

$$f(\bar{x}) = \frac{e^{-\beta E(\bar{x})}}{Z}$$ ← ensamble termino

$$E(\bar{x}) = -\beta \sum_{\langle ij \rangle}^{K} \delta_{ij}$$

Ising

$S_i S_j$ ± 1



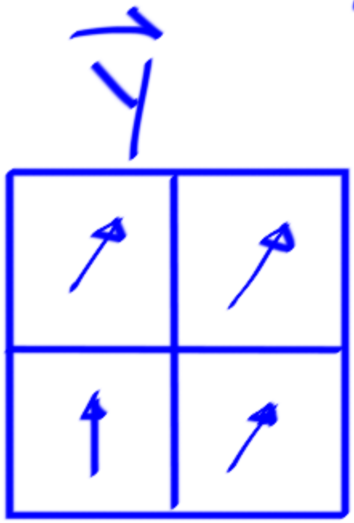
-2β

Red $\{1,\ldots,n\} \times \{1,\ldots,n\}$

$J = n^2$ longitud del vector de prob.

- $\vec{X}_0$ escoger para cada sitio una orientación de spin $(1-K)$

$$f(\bar{X}_0) > 0$$



a) Generar una realización nueva

$q(\vec{Y} \mid \vec{X}_t)$ densidad de Transición

y

movidas para proponer una nueva config

b) Generar # aleatorio $U \in (0,1)$

y escoger $\vec{X}_{t+1}$

$$\alpha(\vec{X}_t, \vec{Y}) = \min\left\{1, e^{-(E_Y - E_X)}\right\}$$

$$\vec{X}_{t+1} = \begin{cases} \vec{Y} & \text{if } U \le \alpha(\vec{X}_t, \vec{Y}) \\ \vec{X}_t & \text{if } \underline{\text{otro caso}} \end{cases}$$