2.4. Марковские цепи. Принцип детального равновесия

Принцип детального равновесия. Алгоритм Метрополиса. Эргодические схемы.

Марковские цепи

Марковские цепи

- Марковская цепь: вероятность нахождения системы в данном состоянии зависит только от предыдущего состояния

$$P_{x_0,x_1,\dots,x_{n-1}\to x_n} = P_{x_{n-1}\to x_n}$$

- *Любую* реализацию последовательности состояний $x_1,x_2,\dots,x_n$ можно получить из начального состояния x_0:

$$P = P_{x_0\to x_1} \dots P_{x_{n-2}\to x_{n-1}} P_{x_{n-1}\to x_n}$$

- *Существует инвариантное распределение состояний системы, которое не зависит от начальных условий, и достичь которого позволяет марковская цепь*
- Для канонического ансамбля таким инвариантным распределением является распределение Гиббса

$$P(x_i) \sim e^{-\frac{H(x_i)}{T}}$$

Марковские цепи

- *Инвариантное* распределение вероятностей:

$$P(x_i) > 0; \quad \sum_i P(x_i) = 1; \quad P(x_j) = \sum_i P(x_i) P_{x_i \to x_j}$$

- Абсолютная вероятность каждого состояния складывается из всех возможных переходов системы в это состояние. Матрица $P_{x_i \to x_j}$ ходов называется *стохастической*
- Марковская цепь называется *неприводимой*, если каждое ее состояние может быть получено из каждого другого состояния (возможно, через ряд других состояний и переходов)
- В неприводимой марковской цепи не может быть «ловушек» – состояний или групп состояний, достигнув которых, система уже не выходит из них
- Состояние, входящее в марковскую цепь, называется *периодическим*, если, достигнув этого состояния, система возвращается в него через определенное число шагов (период). Если таких состояний нет, марковская цепь называется *апериодической*

Марковские цепи

- Марковская цепь, состоящая из апериодических и устойчивых с конечным временем возврата состояний называется *эргодической* или *связной*
- *Неприводимая апериодическая марковская цепь имеет инвариантное распределение тогда и только тогда, когда она является эргодической*
- Практическое руководство для реализации эргодической схемы: марковский процесс должен быть сконструирован так, чтобы за некоторое конечное число шагов из любого состояния можно было бы достичь любого другого состояния, при этом число таких шагов не должно быть сравнимо с длиной всей марковской цепи

Принцип детального равновесия

- Основная задача статистической механики – расчет наблюдаемых термодинамических величин из статистическог

$$\langle A \rangle = \frac{\int d\Omega\, A(\Omega)\rho(\Omega)}{Z}; \quad Z = \int d\Omega\, \rho(\Omega)$$

- Допустим, создана цепь случайных состояний с некоторым заданным распре ... едлива оценка

$$\langle A \rangle \approx \frac{\sum_{i=1}^{N} A(\Omega_i)\rho(\Omega_i)P^{-1}(\Omega_i)}{\sum_{i=1}^{N} \rho(\Omega_i)P^{-1}(\Omega_i)}$$

- Если в качестве ... и выбрать функцию распределения:

$$P(\Omega) = \frac{\rho(\Omega)}{Z}$$

- то вычисление сводит ... у арифметическому среднему:

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} A(\Omega_i)$$

Принцип детального равновесия

- Для практической реализации алгоритма необходимо выполнение дополнительных ограничительных условий на вероятности перехода:

$$P_{\Omega' \to \Omega} \geq 0; \quad \sum_{\Omega'} P_{\Omega \to \Omega'} = 1; \quad P(\Omega) = \sum_{\Omega'} P_{\Omega' \to \Omega} P(\Omega')$$

- Каждому шагу марковского процесса можно условно поставить в соответствие промежуток времени, время расчета шага, это время отражает масштаб реального времени релаксации физической системы. Предел отношения вероятности перехода к этому промежутку времени – плотност[...]ерехода:

$$W_{\Omega' \to \Omega} = \lim_{dt \to 0} \frac{P_{\Omega' \to \Omega}}{dt}$$

Принцип детального равновесия

- Эволюцию вероятности можно описать в виде своеобразного *уравнения баланса* или *скоростного уравнения*, описывающего производную по времени – времени расчета – этой величины

$$\frac{dP(\Omega)}{dt} = -\sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega \to \Omega'} P(\Omega) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega' \to \Omega} P(\Omega')$$

- В состоянии равновесия

$$\sum_{\Omega'} W_{\Omega \to \Omega'} P(\Omega) = \sum_{\Omega'} W_{\Omega' \to \Omega} P(\Omega')$$

- Это соотношение называется условием *детального равновесия* или *детального баланса*.

Принцип детального равновесия

- Уравнение Колмогорова (скоростное уравнение):

$$\frac{dP(\Omega)}{dt} = -\sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega \to \Omega'} P(\Omega) + \sum_{\Omega' \neq \Omega} W_{\Omega' \to \Omega} P(\Omega')$$

- На практике применения часто применяют более сильное *уравнение*

$$W_{\Omega \to \Omega'} P(\Omega) = W_{\Omega' \to \Omega} P(\Omega')$$

- Уравнение детального баланса, тем не менее, дает существенную свободу при выборе интенсивности переходов

Алгоритм Метрополиса

- Два наиболее употребительных варианта выбора интенсивности переходов, удовлетворяющей детальному балансу – алгоритмы Метрополиса и тепловой ванны
- Алгоритм Метрополиса:

$$W_{\Omega'\to\Omega} = \begin{cases} \dfrac{P(\Omega')}{P(\Omega)}, & \text{если } \dfrac{P(\Omega')}{P(\Omega)} < 1; \\ 1, & \text{если } \dfrac{P(\Omega')}{P(\Omega)} \geq 1. \end{cases}$$

- Более общий вариант алгоритма Метрополиса:

$$W_{\Omega'\to\Omega} = \min\left(\frac{1}{\tau}; \frac{1}{\tau}\frac{P(\Omega')}{P(\Omega)}\right)$$

- Параметр используется для оптимизации скорости работы алгоритма

Алгоритм тепловой ванны

- Алгоритм тепловой ванны (thermal bath):

$$W_{\Omega' \to \Omega} = \frac{P(\Omega')}{P(\Omega) + P(\Omega')}$$