Markovovy řetězce

- obecně, Markovův řetězec je <u>posloupnost možných událostí</u> nebo náhodných veličin $S^{(k)}$, $k = 1, \dots, \infty$ které jsou vybírány z určité množiny stavů (konfigurací) $\{A_i\}_{i=1,\dots,M}$ (mohla by být i nekonečná, pro jednoduchost budeme uvažovat konečnou množinu stavů)

ovšem jejich výskyt v posloupnosti <u>není nezávislý</u>, protože $S^{(k)}$ závisí na předchozím stavu $S^{(k-1)}$, neboli pokud v „čase" k se stav A_i objeví s pravděpodobností $\pi_i^{(k)}$, pak v „čase" $k+1$ se A_j objeví s pravděpodobností

$$\boxed{\pi_j^{(k+1)} = \sum_{i=1}^{M} \pi_i^{(k)} W_{i \to j}}$$

kde $W_{i\to j} = P(A_i \to A_j)$ = pravděpodobnost přechodu z A_i do A_j

- vektorově můžeme psát

$$\pi^{(k+1)} = \pi^{(k)} W$$

kde W je tzv. <u>matice přechodu</u>, jejíž prvky musí splňovat

$$\boxed{\sum_{j=1}^{M} W_{i\to j} = 1 \quad \text{pro } \forall i = 1, \dots, M}$$

neboli celková pravděpodobnost přechodu z A_i kamkoli musí být rovna 1

Př. viz notebook v Mathematice

1) problémová síť - dvoustavový systém dle skript Nezbeda, Kolafa, Kotrla, str. 46

2) náhodné překlápění kostky přes jednu hranu

- v obou příkladech se po jistém (relativně malém) počtu iterací přestanou pravděpodobnosti π_j stavů A_j měnit (alespoň s dostatečnou přesností), tj.

$$\pi^{(k+1)} \simeq \pi^{(k)} \quad \text{pro velká } k$$

neboli

$$\boxed{\lim_{n\to\infty} \pi^{(n)} = \pi}$$

(systém „ztrácí" paměť)

a π splňuje rovnici pro levé vlastní vektory a čísla matice přechodu

$$\lambda\tau = \tau \cdot W$$

a π je vlastní vektor W s vlastní hodnotou 1

$$\pi = \pi \cdot W$$

Pozn: lze ukázat, že ostatní vlastní čísla matice přechodu jsou v absolutní hodnotě menší než 1.

- co musí splňovat matice přechodu W, aby existovalo limitní rozdělení pravděpodobnosti π?
  - obecně lze ukázat (viz např. W. Feller: An Introduction to Prob. Theory and its Applications)

že pokud 1) všechny stavy (konfigurace) můžou být dosaženy z lib. jiného stavu po konečném počtu kroků s nenulovou pravděpodobností

a 2) žádný stav není tzv. periodický (tj. nesmí $\exists$ m takové, že pro stav A_i bude platit, že je-li $\pi_i^{(k)} = 0$, pak $\pi_i^{(k+m)} = 0$ a je-li $\pi_i^{(k)} \neq 0$, pak $\pi_i^{(k+m)} \neq 0$)

pak pro lib. počáteční rozdělení pravděpodobnosti $\pi^{(1)}$ existuje limita $\pi = \lim_{k\to\infty} \pi^{(k)}$,

[Pozn: takový systém se pak nazývá ergodický]

která splňuje rovnici

$$\pi = \pi \cdot W$$

a je tedy levým vlastním vektorem matice přechodu W

- v Monte Carlo simulacích nekonstruujeme přímo matici přechodu (byly by obrovské), ale pracujeme pouze s limitním rozdělením pravděpodobnosti, které je obvykle dáno nějakou hustotou pravděpodobnosti výskytu stavů systému A_j, např. Maxwellovým-Boltzmannovým rozdělením $\pi_j = \rho(A_j) = \frac{e^{-\beta H(A_j)}}{Z}$, $Z = \sum_j e^{-\beta H(A_j)}$, $\beta = \frac{1}{kT}$

ale $\rho(A_j)$ může být obecně libovolné

- jak zkonstruovat matici přechodu, aby limitní rozdělení bylo právě $\rho(A_j)$?

- máme tři podmínky: $W_{i \to j} \geq 0$ pro $\forall i,j = 1, \dots, M$

$$\sum_{j=1}^{M} W_{i \to j} = 1 \quad \text{pro } \forall i = 1, \dots, M \qquad (*)$$

a $\pi \cdot W = \pi$ (tj. $\exists$ levý vlastní vektor s $\lambda = 1$)

- poslední se nazývá <u>podmínkou detailní rovnováhy</u> a je nezbytnou podmínkou, abychom dostali limitní (stacionární) rozdělení pravděpodobnosti

- tuto podmínku lze nahradit silnější podmínkou tzv. <u>mikroskopické reverzibility</u> (pravděpodobnost přechodu z A_i do A_j je v rovnováze stejná jako z A_j do A_i)

$$(**) \qquad \pi_i W_{i \to j} = \pi_j W_{j \to i}$$

neboť pak

$$(\pi \cdot W)_j = \sum_{i=1}^{M} \pi_i W_{i \to j} = \pi_j \sum_{i=1}^{M} W_{j \to i} = \pi_j$$

- podmínky $(*)$ neurčují W jednoznačně (pouze $2M$ podmínek pro M^2 neznámých)

- z $(**)$ máme podmínky na poměry

$$\frac{W_{j \to i}}{W_{i \to j}} = \frac{\pi_i}{\pi_j} = \frac{\rho(A_i)}{\rho(A_j)}$$

nebo $W_{j \to i} = 0 = W_{i \to j}$.

(všimněte si, že je důležitý pouze podíl, normalizace se vykrátí a nemusíme tedy znát např. Z)

- stále je však velká volnost ve volbě $W_{i\to j}$

a) <u>Metropolisova metoda</u> - nejpoužívanější

$$W_{i\to j} = \begin{cases} \alpha_{i\to j} & \text{pro } i\neq j,\ \pi_j \geq \pi_i \\ \alpha_{i\to j}\dfrac{\pi_j}{\pi_i} & \text{pro } i\neq j,\ \pi_j < \pi_i \\ 1-\sum\limits_{k\neq i} W_{i\to k} & \text{pro } i=j \end{cases}$$

kde $\alpha_{i\to j}$ je <u>libovolná symetrická</u> stochastická matice splňující $\alpha_{i\to j} \geq 0$ pro $\forall i,j$

a $\sum\limits_{j=1}^{M} \alpha_{i\to j} = 1$

díky čemuž jsou splněny první dvě podmínky (*)

a navíc pro $\pi_j \geq \pi_i$ máme

$$\pi_i W_{i\to j} = \pi_i \alpha_{i\to j} \underset{\substack{\uparrow \\ \text{symetričnost } \alpha}}{=} \pi_j \alpha_{j\to i} \frac{\pi_i}{\pi_j} = \pi_j W_{j\to i}$$

a pro $\pi_j < \pi_i$

$$\pi_i W_{i\to j} = \pi_i \alpha_{i\to j}\frac{\pi_j}{\pi_i} = \pi_j \alpha_{j\to i} = \pi_j W_{j\to i}$$

a je tedy splněna i podmínka mikroskopické reverzibility

b) <u>Barkerova metoda</u> (též Glauberova)

$$W_{i\to j} = \begin{cases} \alpha_{i\to j}\dfrac{\pi_j}{\pi_i+\pi_j} & \text{pro } i\neq j \\ 1-\sum\limits_{k\neq i}^{M} W_{i\to k} & \text{pro } i=j \end{cases}$$

kde $\alpha_{i\to j}$ je opět <u>libovolná symetrická</u> stochastická matice

nyní $\pi_i W_{i\to j} = \pi_i \alpha_{i\to j}\dfrac{\pi_j}{\pi_i+\pi_j} = \pi_j \alpha_{j\to i}\dfrac{\pi_i}{\pi_i+\pi_j} = \pi_j W_{j\to i}$

[Pozn. existují i další možnosti, viz např. metoda „tepelné lázně", Creutz et al., Phys. Rev. Lett. 42 (1979) 1390]

- jak volit $\alpha_{i\to j}$? - to záleží na simulovaném systému
  - jde o pravděpodobnosti s jakými „vygenerujeme" z A_i novou konfiguraci A_j, různé strategie - překlopení spinu (náhodného), náhodné posunutí atomu apod.