1) Mi interessano VALORI di ASPETTAZIONE

$$\boxed{\langle f(X) \rangle = \sum_i f(X_i)\, \Pi(X_i) \equiv \sum_i f(X_i)\, \Pi_i}$$

Somma su tutte le possibili CONFIGURAZIONI (STATI) ovvero su tutti i valori possibili per X, pesati dalla distribuzione di probabilità Π

2) Genero un processo di MARKOV dando una MATRICE W i cui elementi sono PROBABILITA' di TRANSIZIONE

$$\boxed{W_{ij} = P(i \leftarrow j)}$$

Valgono per W le proprietà viste : $W_{ij} \geq 0$

$\sum_i W_{ij} = 1 \quad \forall j$ ... etc...

3) Iterando il processo a partire da una PROBABILITA' INIZIALE P_0, la probabilità dopo N passi è

$$P^{(N)} = W^N P_0 \xrightarrow[N\to\infty]{} \Pi$$

se vale $W\Pi = \Pi$ ovvero Π è la distribuzione stazionaria per il processo (autovettore di W in corrispondenza all'autovalore 1)

Posso allora SOSTITUIRE MEDIE TEMPORALI sulla EVOLUZIONE (asintotica, ovvero a tempi lunghi) STOCASTICA del SISTEMA alle MEDIE su Π.

4) Problema: Data Π, come trovo W tale che $W\Pi = \Pi$?

Notare che, poiché $\sum_i W_{ij} = 1 \quad \forall j$

$$W_{ij}\Pi_j = W_{ji}\Pi_i \quad \text{implica che (sommo su } i\text{)}$$

$$\sum_i W_{ij}\Pi_j = \Pi_j = \sum_i W_{ji}\Pi_i \quad \text{ovvero} \quad \sum_i W_{ji}\Pi_i = \Pi_j$$

che è la condizione che voglio soddisfatta.

5) Ho allora trovato una CONDIZIONE SUFFICIENTE (NB: non NECESSARIA!):

$$\text{BILANCIO DETTAGLIATO} \quad W_{ij}\,\Pi_j = W_{ji}\,\Pi_i$$

(ovvero all'equilibrio la probabilità di transire da j a i se si è in j eguaglia quella di transire da i a j se si è in i...)

6) C'è sempre un modo semplice di soddisfare il BILANCIO DETTAGLIATO (in Fisica è noto come ALGORITMO di METROPOLIS)

$$\text{Dico che } W_{ij} = \underbrace{P^{(0)}_{ij}}_{\text{PROBABILITA' di PROPORRE UNA MOSSA}} \; \underbrace{a_{ij}}_{\text{PROBABILITA' di ACCETTARE LA PROPOSTA}}$$

In pratica: propongo una mossa e la accetto con una probabilità che mi rende soddisfatto il bilancio dettagliato!

Devo avere (BILANCIO DETTAGLIATO)

$$W_{ij}\,\Pi_j = W_{ji}\,\Pi_i \implies P^{(0)}_{ij}\,a_{ij}\,\Pi_j = P^{(0)}_{ji}\,a_{ji}\,\Pi_i$$

$$\text{ovvero} \quad \frac{a_{ij}}{a_{ji}} = \frac{P^{(0)}_{ji}\,\Pi_i}{P^{(0)}_{ij}\,\Pi_j}$$

Se ora le mie PROPOSTE sono SIMMETRICHE $P_{ij}^{(0)} = P_{ji}^{(0)}$

ottengo $$\frac{a_{ij}}{a_{ji}} = \frac{\pi_i}{\pi_j}$$

cerco allora $a_{ij} = F\left(\frac{\pi_i}{\pi_j}\right)$ $\qquad F: [0,\infty] \to [0,1]$

nota $a_{ji} = F\left(\frac{\pi_j}{\pi_i}\right)$

e dunque ottengo una soluzione se trovo F: $\dfrac{F(z)}{F(z^{-1})} = z$

$\left(\text{Chiamo } z = \dfrac{\pi_i}{\pi_j} \qquad \dfrac{a_{ij}}{a_{ji}} = \dfrac{F(z)}{F(z^{-1})} = z = \dfrac{\pi_i}{\pi_j} \text{ che è quello che voglio} \right)$

$$\frac{F(z)}{F(z^{-1})} = z \quad \text{è soddisfatta da} \quad \boxed{F(z) = \min(1, z)}$$

Allora:

1) Proponi la mossa $j \to i$ (SIMMETRICA!)

2) Calcola $z = \dfrac{\pi_i}{\pi_j}$

3) Accetta la mossa con PROB. $\min(1, z)$

ovvero
- se $\dfrac{\pi_i}{\pi_j} > 1$, accetta
- se $\dfrac{\pi_i}{\pi_j} < 1$, estrai r a caso in $[0,1]$ e accetta se $r < \dfrac{\pi_i}{\pi_j}$

In pratica: mosse che vanno in stati più probabili sono sempre accettate; le altre mosse sono accettate "sempre meno" se $\pi_i < \pi_j$ ... $\leftarrow$