Кинетика

Лекция 4

Многомасштабное моделирование

Х.-П. Бройер, Ф. Петруччионе

ТЕОРИЯ ОТКРЫТЫХ КВАНТОВЫХ СИСТЕМ

Теория Вероятностей

$$(\Omega, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$$

вероятностная мера или вероятность

Вероятностное пространство

сигма-алгебра подмножеств,
называемых (случайными) событиями
(о сигма алгебрах, теоремах существования…
больше говорить не будем,
это не актуально в теоретической физике)

$$(\Omega, \mathfrak{A}, \mathbb{P})$$

Вероятностное пространство

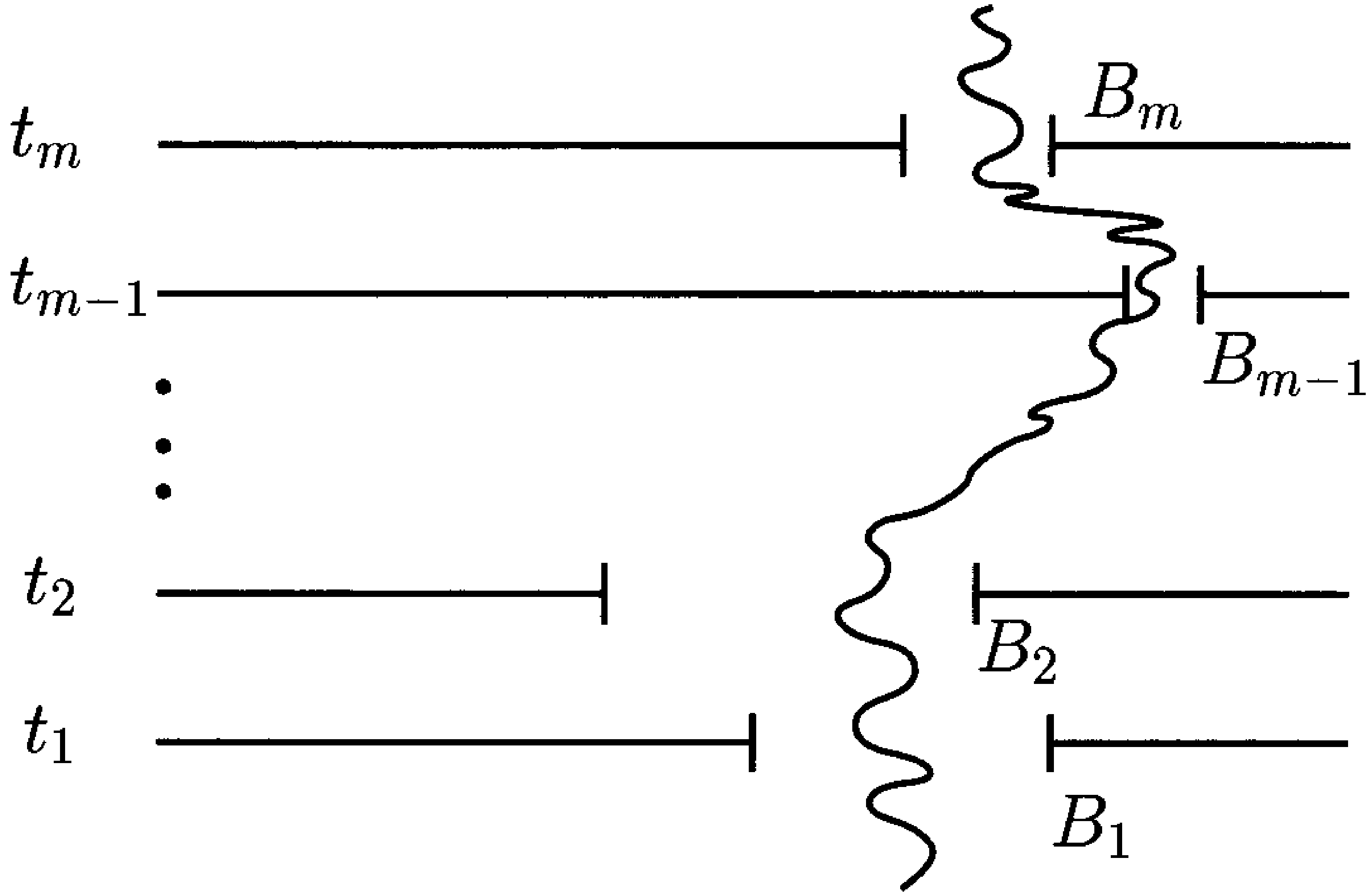
~~сигма-алгебра подмножеств, называемых (случайными) событиями~~

вероятностная мера или вероятность

Случайные процессы

$$\{X(t,\omega): t \in T, \omega \in \Omega\}$$

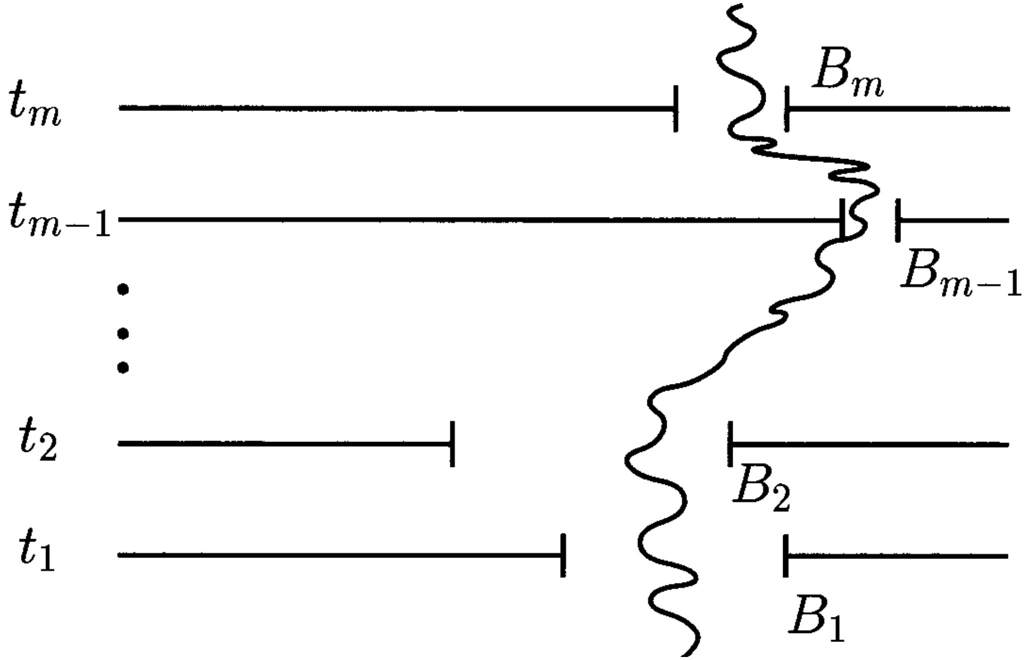
$$P(B_1, t_1; B_2, t_2; \ldots ; B_m, t_m) \equiv \mu\,(X(t_1) \in B_1, X(t_2) \in B_2, \ldots , X(t_m) \in B_m)$$



$$P(B_1,t_1;B_2,t_2;\ldots;B_m,t_m) \equiv \mu\left(X(t_1)\in B_1, X(t_2)\in B_2,\ldots,X(t_m)\in B_m\right)$$

Плотность вероятности:

$$P(B_m,t_m;\ldots;B_1,t_1) = \int\limits_{B_m} dx_m \ldots \int\limits_{B_1} dx_1\, p_m(x_m,t_m;\ldots;x_1,t_1)$$



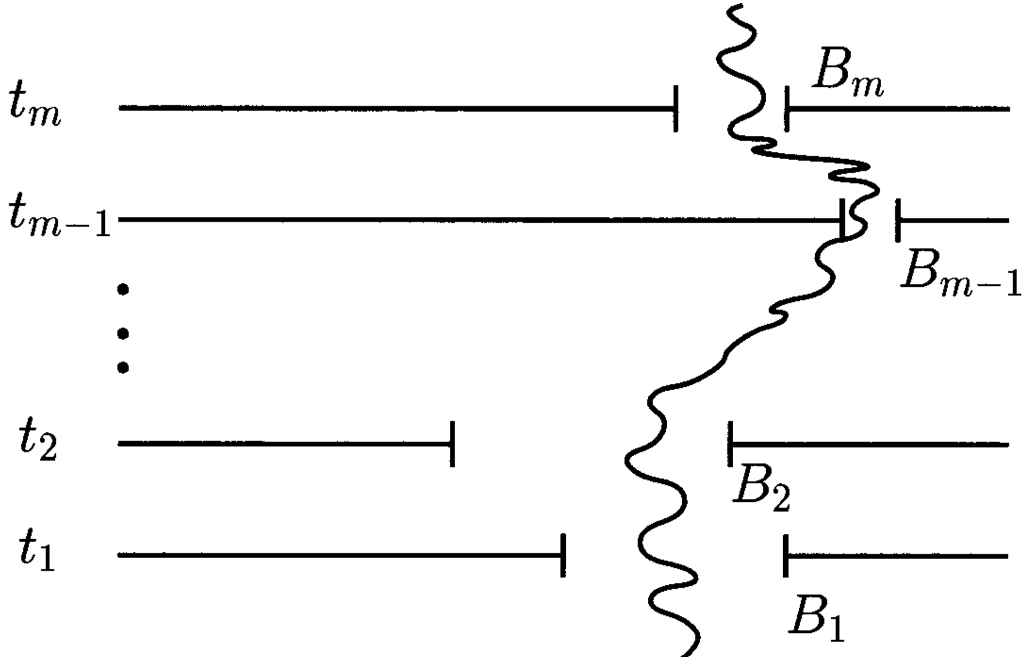
Условная плотность вероятности:

$$p_{l|k}(x_{k+l},t_{k+l};\ldots;x_{k+1},t_{k+1}|x_k,t_k;\ldots;x_1,t_1) \equiv \frac{p_{k+l}(x_{k+l},t_{k+l};\ldots;x_1,t_1)}{p_k(x_k,t_k;\ldots;x_1,t_1)}$$

$$P(B_1, t_1; B_2, t_2; \ldots; B_m, t_m) \equiv \mu\left(X(t_1) \in B_1, X(t_2) \in B_2, \ldots, X(t_m) \in B_m\right)$$

Плотность вероятности:

$$P(B_m, t_m; \ldots; B_1, t_1) = \int_{B_m} dx_m \ldots \int_{B_1} dx_1 \; p_m(x_m, t_m; \ldots; x_1, t_1)$$



Марковский процесс:

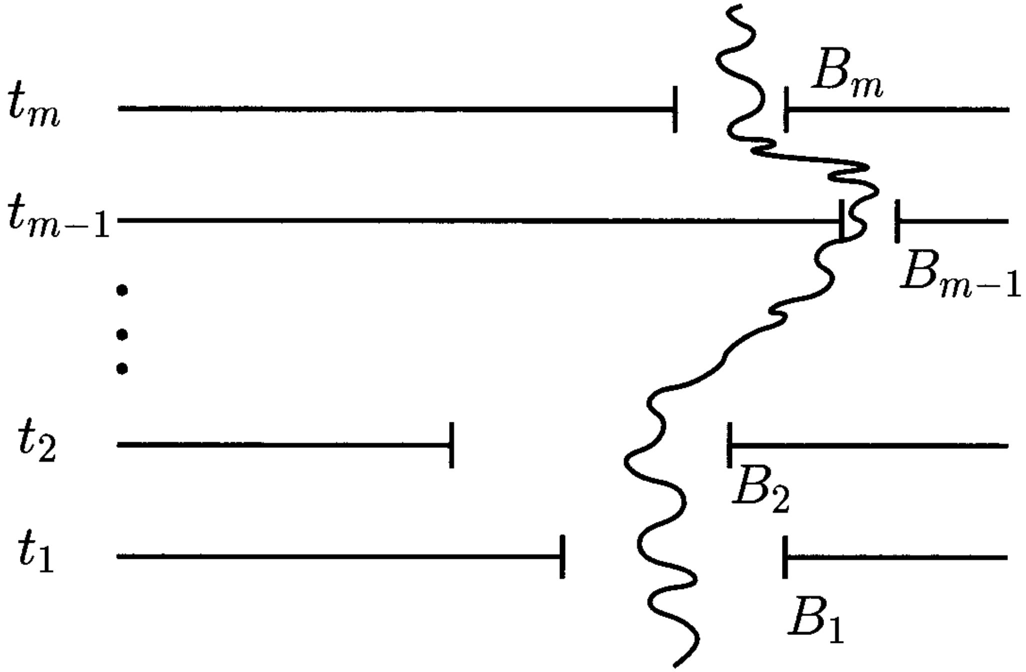
$$p_{1|m}(x, t | x_m, t_m; \ldots; x_1, t_1) = p_{1|1}(x, t | x_m, t_m)$$

Условная плотность вероятности:

$$p_{l|k}(x_{k+l}, t_{k+l}; \ldots; x_{k+1}, t_{k+1} | x_k, t_k; \ldots; x_1, t_1) \equiv \frac{p_{k+l}(x_{k+l}, t_{k+l}; \ldots; x_1, t_1)}{p_k(x_k, t_k; \ldots; x_1, t_1)}$$

Марковский процесс:

$$p_{1|m}(x,t|x_m,t_m;\ldots;x_1,t_1) = p_{1|1}(x,t|x_m,t_m)$$



ПРОПАГАТОР:

$$T(x,t|x',t') \equiv p_{1|1}(x,t|x',t')$$

$$\int dx\, T(x,t|x',t') = 1,$$

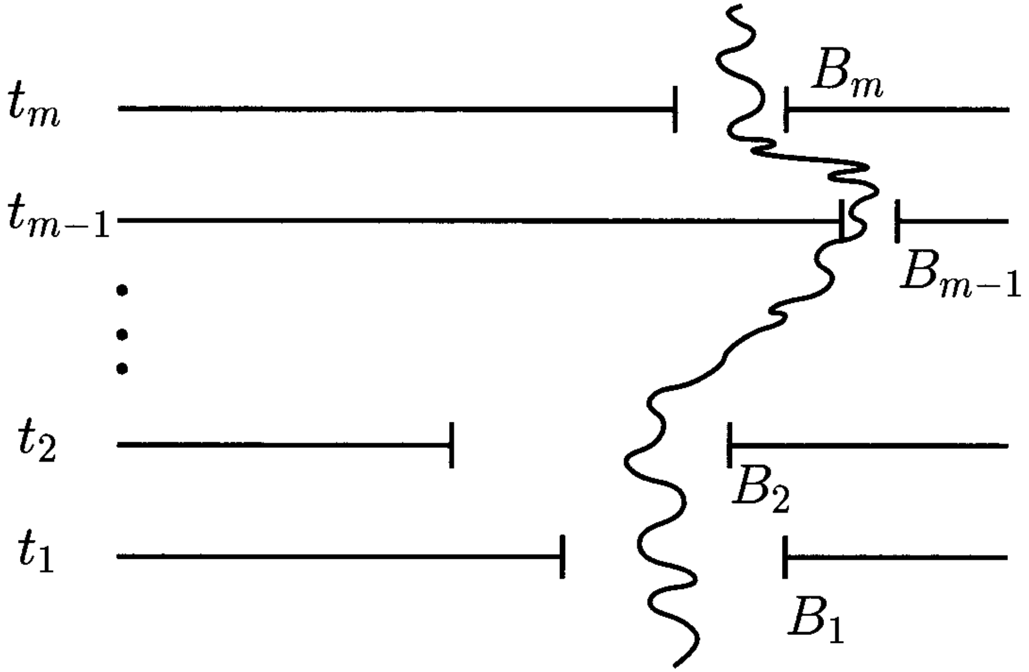
$$\lim_{t\to t'} T(x,t|x',t') = \delta(x-x').$$

Марковский процесс, пропагатор:

$$T(x,t|x',t') \equiv p_{1|1}(x,t|x',t')$$

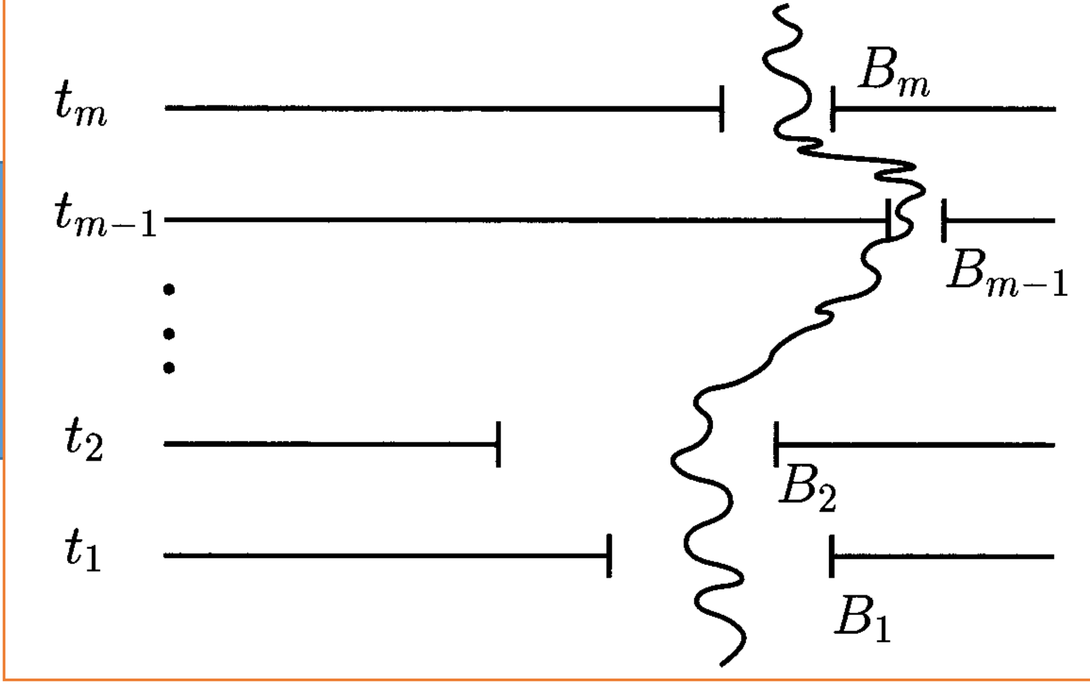
$$p(x,t) \equiv p_1(x,t)$$

$$p(x,t) = \int dx'\; T(x,t|x',t_0)\,p(x',t_0)$$



Марковский процесс:

$$p_{1|m}(x,t|x_m,t_m;\ldots;x_1,t_1) = p_{1|1}(x,t|x_m,t_m)$$



ПРОПАГАТОР:

$$T(x,t|x',t') \equiv p_{1|1}(x,t|x',t')$$

$$\int dx\, T(x,t|x',t') = 1,$$

$$\lim_{t\to t'} T(x,t|x',t') = \delta(x-x').$$

$$\boxed{p(x,t) = \int dx'\, T(x,t|x',t_0)p(x',t_0)}$$

Условная плотность вероятности:

Уравнение Чепмана-Колмогорова

Уравнение Чепмана-Колмогорова

Условная плотность вероятности для любого случайного процесса:

$$p_{l|k}(x_{k+l},t_{k+l};\ldots;x_{k+1},t_{k+1}|x_k,t_k;\ldots;x_1,t_1)\equiv\frac{p_{k+l}(x_{k+l},t_{k+l};\ldots;x_1,t_1)}{p_k(x_k,t_k;\ldots;x_1,t_1)}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{aligned}p_3(x_3,t_3;x_2,t_2;x_1,t_1)&=p_{1|2}(x_3,t_3|x_2,t_2;x_1,t_1)p_2(x_2,t_2;x_1,t_1)\\&=p_{1|1}(x_3,t_3|x_2,t_2)p_{1|1}(x_2,t_2|x_1,t_1)p_1(x_1,t_1).\end{aligned}$$

условие марковости
использовано только здесь!

Уравнение Чепмана-Колмогорова

$$p_3(x_3,t_3;x_2,t_2;x_1,t_1) = p_{1|2}(x_3,t_3|x_2,t_2;x_1,t_1)p_2(x_2,t_2;x_1,t_1)$$
$$= p_{1|1}(x_3,t_3|x_2,t_2)p_{1|1}(x_2,t_2|x_1,t_1)p_1(x_1,t_1).$$

условие марковости

$$p_2(x_3,t_3;x_1,t_1) = p_1(x_1,t_1)\int dx_2 p_{1|1}(x_3,t_3|x_2,t_2)p_{1|1}(x_2,t_2|x_1,t_1)$$

$$p_{1|1}(x_3,t_3|x_1,t_1) = \int dx_2 p_{1|1}(x_3,t_3|x_2,t_2)p_{1|1}(x_2,t_2|x_1,t_1)$$

$$\boxed{T(x_3,t_3|x_1,t_1) = \int dx_2\, T(x_3,t_3|x_2,t_2)T(x_2,t_2|x_1,t_1)}$$

В качестве упражнения докажите, что для произвольного немарковского случайного процесса справедливо тождество:

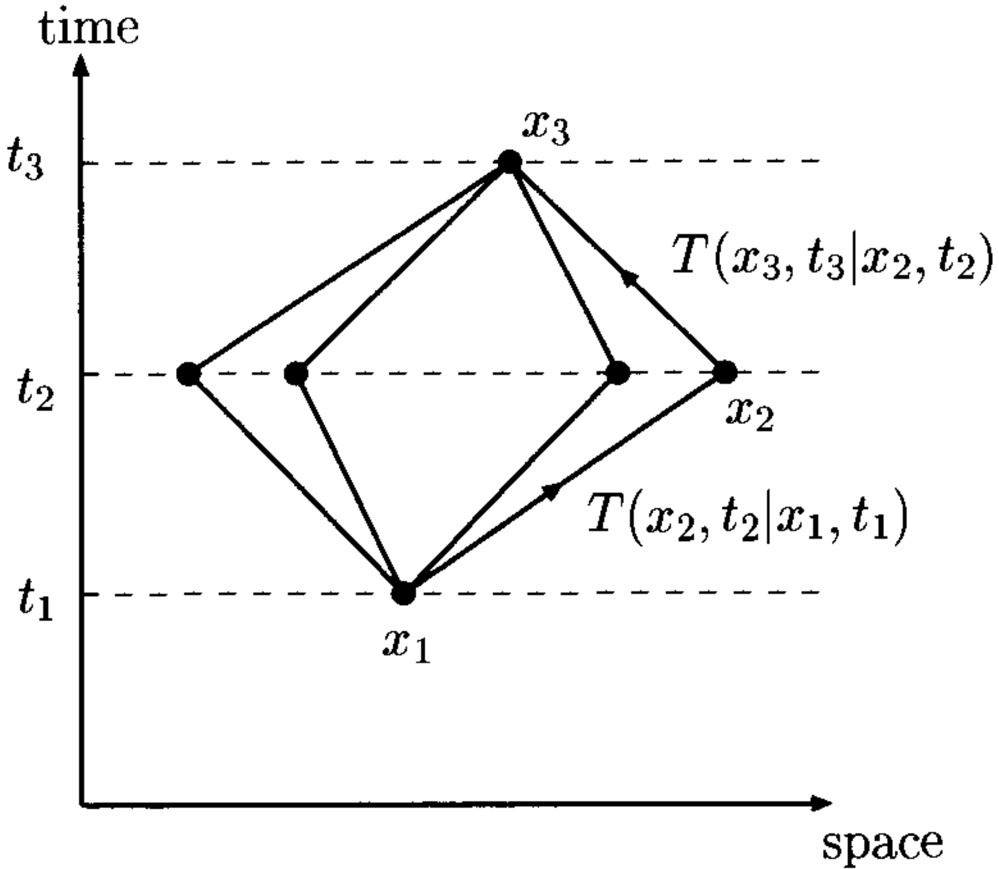
$$T(x_3, t_3 \mid x_1, t_1) = \int dx_2 P(x_3, t_3 \mid x_2, t_2, x_1, t_1) T(x_2, t_2 \mid x_1, t_1)$$

условие Марковости

$$T(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int dx_2 \, T(x_3, t_3 | x_2, t_2) T(x_2, t_2 | x_1, t_1)$$

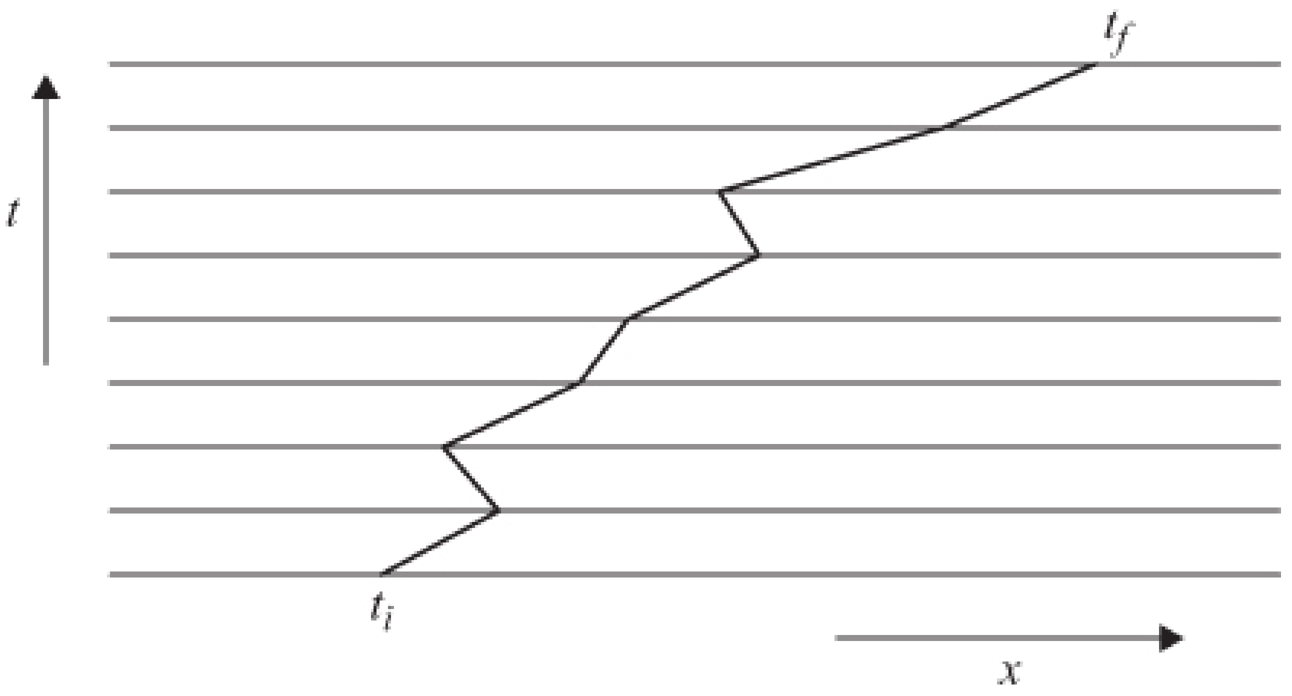
Уравнение Чепмана-Колмогорова

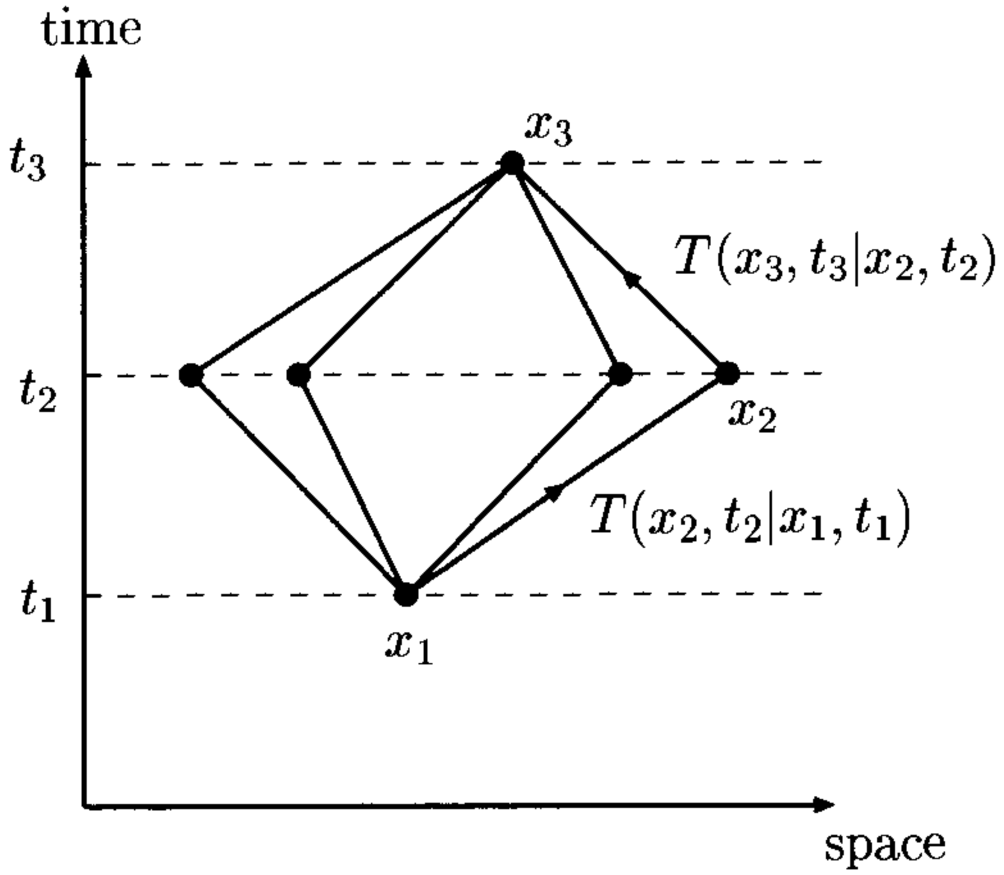
$$T(x_3, t_3 | x_1, t_1) = \int dx_2 \, T(x_3, t_3 | x_2, t_2) T(x_2, t_2 | x_1, t_1)$$



Функциональный интеграл по траекториям…

О функциональном интеграле





$$T(x_f, t_f \mid x_i, t_i) = \int dx_n \ldots dx_3 dx_2 dx_1 T(x_f, t_f \mid x_n, t_n) \ldots T(x_3, t_3 \mid x_2, t_2) T(x_2, t_2 \mid x_1, t_1) T(x_1, t_1 \mid x_i, t_i)$$

О функциональном интеграле

$$T(x_f,t_f\,|\,x_i,t_i)=\int dx_n\ldots dx_3dx_2dx_1T(x_f,t_f\,|\,x_n,t_n)\ldots T(x_3,t_3\,|\,x_2,t_2)T(x_2,t_2\,|\,x_1,t_1)T(x_1,t_1\,|\,x_i,t_i)$$

$$T(x_2,t_2\,|\,x_1,t_1)\propto\exp\left(-S[x_2,t_2\,|\,x_1,t_1]\right).$$

$$S[x_2,t_2\,|\,x_1,t_1]\approx L[x_2,t_2]dt,\quad dt=t_2-t_1\to 0,$$

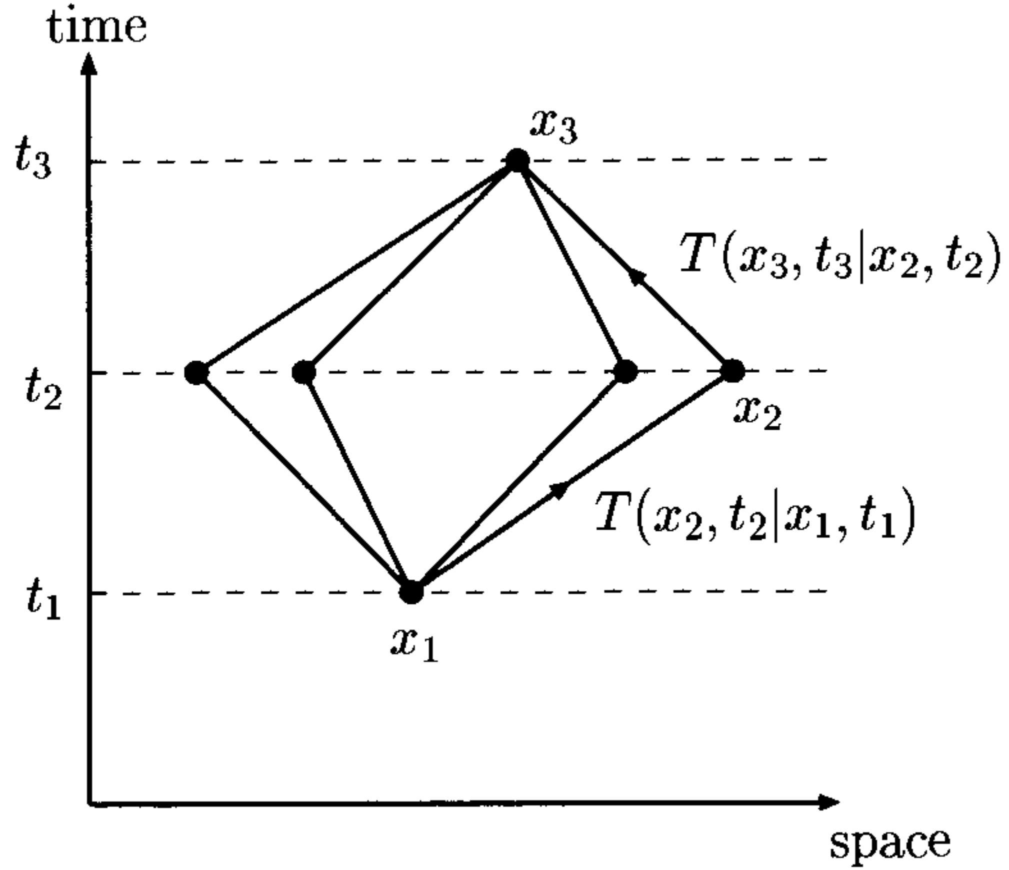
$$T(x_2,t_2\,|\,x_1,t_1)\approx A(x_2,t_2,dt)\exp\left(-L[x_2,t_2]dt\right)\to\delta(x_2-x_1),\quad dt=t_2-t_1\to 0,$$

$$T(x_f,t_f\,|\,x_i,t_i)=\int A_ndx_n\ldots A_3dx_3A_2dx_2A_1dx_1\exp\left(-dt\left(L[x_f,t_f]\ldots+L[x_2,t_3]+L[x_2,t_2]+L[x_1,t_1]\right)\right)=$$

$$=\lim_{n\to\infty}\iint\prod_{i=1,\ldots,n}A_idx_i\exp\left(-\int_{t_i}^{t_f}L[x(t),t]dt\right)\equiv\int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)}Dx\exp\left(-\int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)}L[x,t]dx\right).$$

О функциональном интеграле (выводы)

$$T(x_f, t_f \mid x_i, t_i) = \lim_{n\to\infty} \iint \prod_{i=1,\ldots,n} A_i dx_i \exp\left(-\int_{t_i}^{t_f} L[x(t),t]dt \right) \equiv \int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)} Dx \exp\left(-\int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)} L[x,t]dx \right)$$



Мера Винера…

$$T(x_f, t_f \mid x_i, t_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t_f - t_i)}} \exp\left(-\frac{\|x_f - x_i\|^2}{2D(t_f - t_i)} \right).$$

Мера Винера…

$$T(x_f, t_f \mid x_i, t_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D(t_f - t_i)}} \exp\left(-\frac{\|x_f - x_i\|^2}{2D(t_f - t_i)} \right).$$

$$T(x_f, t_f \mid x_i, t_i) = \lim_{n\to\infty} \iint \prod_{i=1,\ldots,n} A_i dx_i \exp\left(-\int_{t_i}^{t_f} L[x(t), t]dt \right) \equiv \int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)} Dx \exp\left(-\int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)} L[x,t]dx \right) =$$

$$= \int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)} D_W x \exp\left(-\int_{(x_i,t_i)}^{(x_f,t_f)} \frac{1}{2D} \dot{x}^2 dt \right), \quad D_W x = \lim_{n\to\infty} \prod_{i=1,\ldots,n} \frac{dx_i}{\sqrt{2\pi D dt}}$$

Дифференциальная форма уравнений Чепмена-Колмогорова

Дифференциальная форма уравнений Чепмена-Колмогорова

$$\boxed{T(x,t\,|\,x',t') = \int dx_2 T(x,t\,|\,x_2,t_2) T(x_2,t_2\,|\,x',t')}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} T(x,t\,|\,x',t') = \int dx_2 \lim_{\Delta t\to 0, t_2\to t} \frac{1}{\Delta t}\left(\mathrm{T}(x,t+\Delta t\,|\,x_2,t_2) - T(x,t\,|\,x_2,t_2)\right) T(x_2,t_2\,|\,x',t') =$$

$$= \int dx_2 \lim_{\Delta t\to +0} \frac{1}{\Delta t}\left(\mathrm{T}(x,t+\Delta t\,|\,x_2,t) - \delta(x-x_2)\right) T(x_2,t_2\,|\,x',t') = -\hat{\mathrm{L}}\, T(x,t\,|\,x',t').$$

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} T(x,t\,|\,x',t') = -\hat{\mathrm{L}}(x,t)\cdot T(x,t\,|\,x',t').}$$

$$\hat{\mathrm{L}}(x,t)\cdot\varphi(x) = -\int dz \lim_{\Delta t\to 0} \frac{1}{\Delta t}\left(\mathrm{T}(\mathrm{x},t+\Delta t\,|\,\mathrm{z},t) - \delta(x-z)\right)\varphi(\mathrm{z})$$

Дифференциальная форма уравнений Чепмена-Колмогорова

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} T(x,t\,|\,x',t') = -\hat{\mathrm{L}}(x,t)\cdot T(x,t\,|\,x',t').}$$

Начальное условие:

$$\boxed{T(x,t+0|x',t) = \delta(x-x')}$$

$$\hat{\mathrm{L}}(x,t)\cdot\varphi(x) = -\int dz \lim_{\Delta t\to 0}\frac{1}{\Delta t}\Big(\mathrm{T}(\mathrm{x},t+\Delta t\,|\,\mathrm{z},t) - \delta(x-z)\Big)\varphi(\mathrm{z}) =$$

$$= -\int dz \lim_{t\to t'}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{T}(\mathrm{x},t\,|\,\mathrm{z},t')\varphi(\mathrm{z})$$

Стационарный случайный процесс -- это когда

$$\boxed{T(x,t+\tau\,|\,x',t'+\tau) = T(x,t\,|\,x',t').}$$

В этом случае $T(x,t|x',t') = T_{t\text{-}t'}(x|x')$ и $\hat{L}(x,t)$=$\hat{L}(x)$.
Откуда следует: $T_t(x|x')$=exp(-$\hat{L}(x)$t) $\delta(x-x')$.

Дифференциальная форма уравнений Чепмена-Колмогорова, упражнение:

Упражнение 1. Доказать тождество:

$$\boxed{T(x,t\,|\,x',t') = \hat{\mathcal{T}}\exp\left(-\int_{t'}^{t} d\tau \hat{L}(x,\tau)\right)\cdot\delta(x-x').}$$

Следствие: для любого Марковского стационарного процесса

$$\boxed{T_{t-t'}(x\,|\,x') = \exp\left(-(t-t')\hat{L}(x)\right)\cdot\delta(x-x').}$$

Функциональный интеграл (revisited)

$$\boxed{T(x,t\,|\,x',t') = \hat{\mathcal{T}}\exp\left(-\int_{t'}^{t} d\tau\,\hat{\mathrm{L}}(x,\tau)\right)\cdot\delta(x-x').}$$

$$\Downarrow$$

$$T(x,t\,|\,x',t') \approx \exp\left(-\varepsilon L\left(\bar{x},\dot{x},\bar{t}\right)\right)\rho(\varepsilon) \to \delta(x-x'),\;\; \varepsilon \to 0$$

$$\varepsilon = t - t',\;\; \bar{x} = \frac{x+x'}{2},\;\; \bar{t} = \frac{t+t'}{2},\;\; \dot{x} = \frac{x-x'}{\varepsilon}$$

Функциональный интеграл

$$T(x,t\,|\,x',t') \approx \exp\left(-\varepsilon L\left(\overline{x},\dot{x},\overline{t}\right)\right)\rho(\varepsilon) \to \delta(x - x'),\ \varepsilon \to 0$$

$$\varepsilon = t - t',\ \ \overline{x} = \frac{x + x'}{2},\ \ \overline{t} = \frac{t + t'}{2},\ \ \dot{x} = \frac{x - x'}{\varepsilon}$$

$$T(x_f,t_f\,|\,x_i,t_i) = \iiint T(x_f,t_f\,|\,x_{n-1},t_{n-1})T(x_{n-1},t_{n-1}\,|\,x_{n-2},t_{n-2})\ldots T(x_1,t_1\,|\,x_i,t_i)dx_{n-1}dx_{n-2}\ldots dx_1 \to$$

$$\to \iiint Dx \exp\left(-\int_{t_i}^{t_f} L\left(x,\dot{x},t'\right)dt'\right)$$

$$Dx = \left(\rho(\varepsilon)dx_{n-1}\right)\left(\rho(\varepsilon)dx_{n-2}\right)\ldots\left(\rho(\varepsilon)dx_1\right),\ \varepsilon \to 0, n \to \infty$$

Функциональный интеграл

$$\boxed{\begin{aligned} &T(x_f,t_f\,|\,x_i,t_i)=\iiint Dx\exp\left(-\int_{t_i}^{t_f}L\left(x,\dot{x},t'\right)dt'\right)\\ &Dx=\left(\rho(\varepsilon)dx_{n-1}\right)\left(\rho(\varepsilon)dx_{n-2}\right)\ldots\left(\rho(\varepsilon)dx_1\right),\ \varepsilon\to 0, n\to\infty \end{aligned}}$$

Диффузионный процесс:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t}T(x,t\,|,x',t')-D\frac{\partial^2}{\partial x^2}T(x,t\,|,x',t,)=\delta(x-x')\delta(t-t')}$$

$$T(x,t\,|\,x',t')=\frac{\theta(t-t')}{\sqrt{\pi D(t-t')}}\exp\left(-\frac{\left(x-x'\right)^2}{D(t-t')}\right)=$$

$$=\iiint Dx\exp\left(-\int_{t'}^{t}\frac{\dot{x}^2}{D}d\tau\right),\quad \rho(\varepsilon)=\frac{1}{\sqrt{\pi D\varepsilon}}$$

Функциональный интеграл в Кв. механике. Кв.мех. НЕ является марковским случайным процессом, несмотря на некое сходство!

$$\boxed{\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}-V(x)\right)\mathrm{G}^R(x,t\,|,x',t')=\delta(x-x')\delta(t-t').}$$

Уравнение Шредингера:

$$\mathrm{G}^R(x,t\,|\,x',t')\approx\exp\left(i\varepsilon L\left(\overline{x},\dot{x},\overline{t}\right)/\hbar\right)\rho(\varepsilon)\to\delta(x-x'),\ \varepsilon\to 0$$

$$\varepsilon=t-t',\ \ \overline{x}=\frac{x+x'}{2},\ \ \overline{t}=\frac{t+t'}{2},\ \ \dot{x}=\frac{x-x'}{\varepsilon}$$

$$\rho(\varepsilon)=\sqrt{\frac{m}{2\pi i\hbar\varepsilon}},\ L=\frac{m\dot{x}^2}{2}-V(\overline{x}).$$

Брагута В.В. Континуальный интеграл в квантовой механике: Препринт ИФВЭ 2009–2. – Протвино, 2009. – 7 с., библиогр.: 3.

Р. Фейнман, А. Хибс

КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА И ИНТЕГРАЛЫ НО ТРАЕКТОРИЯМ

Таким образом, имеет место правило: *амплитуды последовательных во времени событий перемножаются.*

$$\mathrm{G}^R(x,t\,|\,x',t') = \int dx_2 G^R(x,t\,|\,x_2,t_2)\,\mathrm{G}^R(x_2,t_2\,|\,x',t')$$

$$G^R(x_f,t_f\,|\,x_i,t_i) = \left\langle x_f,t_f\,|\,x_i,t_i\right\rangle = \iiint\limits_{\substack{x(t_i)=\mathrm{x}_i;\\ x(t_f)=\mathrm{x}_f}} Dx\exp\left(i\int_{t_i}^{t_f} L\left(x,\dot{x},t'\right)dt'/\hbar\right),$$

$$Dx = \left(\rho(\varepsilon)dx_{n-1}\right)\left(\rho(\varepsilon)dx_{n-2}\right)\ldots\left(\rho(\varepsilon)dx_1\right),\ \varepsilon\to 0, n\to\infty$$

Для самостоятельного изучения:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \hat{H}\Psi(x,t), \qquad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x). \qquad \Psi(t,x) = U(t,t_0)\Psi(t_0,x)$$

$$U(t_0+\delta t, t_0) = 1 - i\hat{H}\delta t + O(\delta t^2)$$

$$\hat{x}|x_0\rangle = x_0|x_0\rangle, \quad \hat{p}|p_0\rangle = p_0|p_0\rangle,$$

$$\langle p|x\rangle = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} e^{-ipx}, \quad \langle x|p\rangle = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} e^{ipx}.$$

$$\langle p|U(t+\delta t,t)|x\rangle = \Big(1 - iH(p,x)\delta t\Big) \times \langle p|x\rangle + O(\delta t^2) = \exp\left(-iH(p,x)\delta t\right) \times \langle p|x\rangle + O(\delta t^2)$$

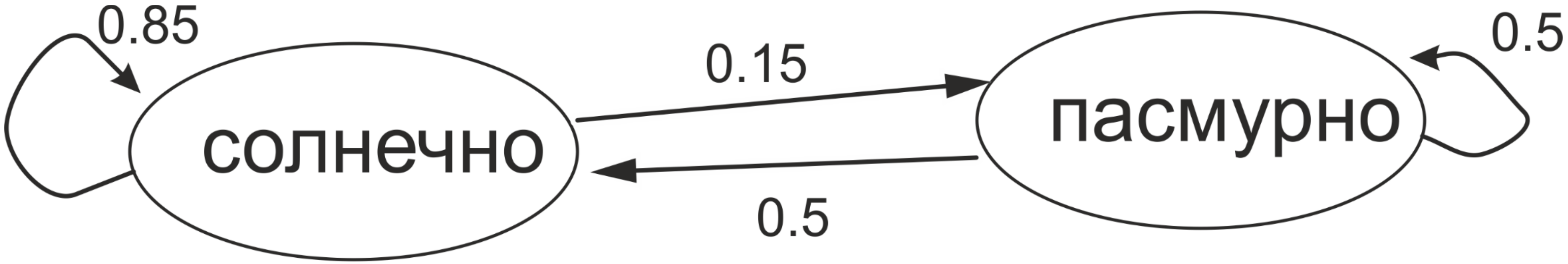
$$\langle x'|U(t_2,t_1)|x\rangle = \langle x'|U(t_2,t_2-\delta t) \times U(t_2-\delta t, t_2-2\delta t)...U(t_1+2\delta t, t_1+\delta t) \times U(t_1+\delta t, t_1)|x\rangle$$

Брагута В.В. Континуальный интеграл в квантовой механике: Препринт ИФВЭ 2009–2. – Протвино, 2009. – 7 с., библиогр.: 3.

$$\langle x', t_2|x, t_1\rangle = \langle x'|U(t_2,t_1)|x\rangle = \int exp\left\{i\int_{t_1}^{t_2} dt\Big(p(t)\dot{x}(t) - H(p(t),x(t))\Big)\right\}\prod_t \frac{dpdx}{2\pi}$$

Упражнения
для усвоения теории марковских процессов

Упражнение 1



$$\mathbf{x} = \textit{погода} = \begin{pmatrix} \textit{вероятность} \to \textit{солнечно} \\ \textit{вероятность} \to \textit{пасмурно} \end{pmatrix}$$

$$\boxed{p^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \text{ясная погода}}$$

$$\text{Матрица перехода } T = \begin{pmatrix} 0.85 & 0.5 \\ 0.15 & 0.5 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{p^{(\text{завтра})} = T(\text{завтра}|\text{сегодня})\, p^{(\text{сегодня})}}$$

$$\mathbf{x} = \text{погода} = \begin{pmatrix} \text{вероятность} \rightarrow \text{солнечно} \\ \text{вероятность} \rightarrow \text{пасмурно} \end{pmatrix}$$

$$\boxed{p^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Leftrightarrow \text{ясная погода}}$$

$$\text{Матрица перехода } T = \begin{pmatrix} a & b \\ 1-a & 1-b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.85 & 0.5 \\ 0.15 & 0.5 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{p^{(\text{завтра})} = T(\text{завтра}|\text{сегодня})\, p^{(\text{сегодня})}}$$

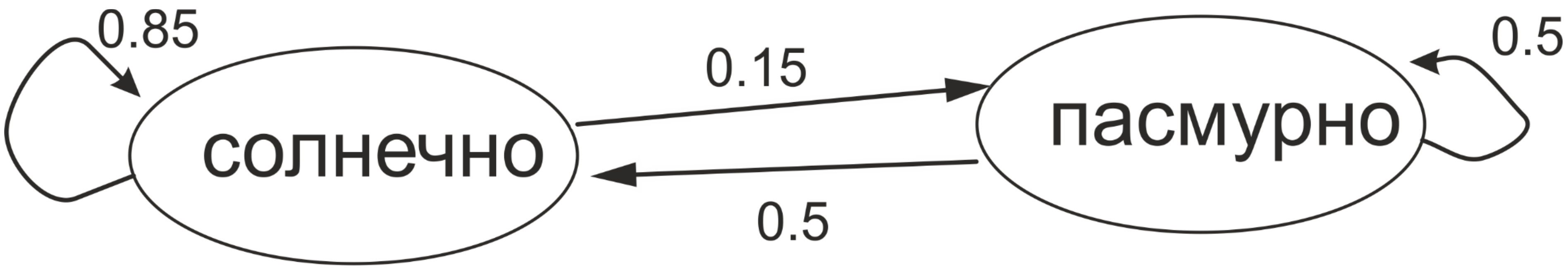
Предельная вероятность:

$$\mathbf{q} = \lim_{n\to\infty} p^{(n)}$$

$$\boxed{\mathbf{q} = T\mathbf{q}, \quad q_1 + q_2 = 1.}$$

$$\boxed{\mathbf{q} = \begin{pmatrix} \dfrac{b}{1-a+b} \\ \dfrac{-1+a}{-1+a-b} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.769 \\ 0.231 \end{pmatrix}.}$$

Упражнение 1 (выводы)



$$p^{(n+1)} = Tp^{(n)}, \qquad \sum_i T_{i,j} = 1.$$

- Цепь Маркова называется **одноро́дной**, если матрица переходных вероятностей не зависит от номера шага.
- Стационарное распределение является “нулевой модой” матрицы Q=T-1.

$$\mathbf{q} = \lim_{n\to\infty} p^{(n)}$$

$$\mathbf{q} = T\mathbf{q}, \ \sum_i q_i = 1.$$

Упражнение 1 (детальный баланс)

- Стационарное распределение

$$\mathbf{q} = \lim_{n\to\infty} p^{(n)}$$

$$\boxed{\mathbf{q} = T\mathbf{q}, \quad \sum_i q_i = 1.}$$

$$q_i = T_{i,j} q_j \Leftrightarrow q_i = T_{i,i} q_i + \sum_{j\neq i} T_{i,j} q_j \Leftrightarrow$$

$$\sum_{j\neq i} T_{j,i} q_i = \sum_{j\neq i} T_{i,j} q_j.$$

детальный баланс:

Суммирования нет!!!

$$\boxed{T_{j\neq i} q_i = T_{i\neq j} q_j}$$

Неочевидное условие, не каждое стационарное распределение этому удовлетворяет!

Упражнение 1 (проверим детальный баланс)

- Стационарное распределение

$$\mathbf{q} = \lim_{n\to\infty} p^{(n)}$$

$$\boxed{\mathbf{q} = T\mathbf{q}, \quad \sum_i q_i = 1.}$$

$$\boxed{T_{j\neq i} q_i = T_{i\neq j} q_j}$$

$$\boxed{\mathbf{q} = \begin{pmatrix} \dfrac{b}{1-a+b} \\ \dfrac{-1+a}{-1+a-b} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0.769 \\ 0.231 \end{pmatrix}.}$$

$$T = \begin{pmatrix} a & b \\ 1-a & 1-b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.85 & 0.5 \\ 0.15 & 0.5 \end{pmatrix}$$

детальный баланс соблюдается!!!

Что такое детальный баланс???

$$\boxed{T_{j \neq i} q_i = T_{i \neq j} q_j}$$

- Марковская цепь называется обратимой, если ее стационарное распределение удовлетворяет условию детального баланса.
  - https://en.wikipedia.org/wiki/Detailed_balance
- Условие детального баланса обычно гарантирует возрастание энтропии и достижение максимума для q… (это будет доказано позже)

Упражнение 1 (дальнейшие обобщающие выводы)

$$p^{(n+1)} = Tp^{(n)}, \quad \Leftrightarrow \quad p^{(n+1)} - p^{(n)} = Qp^{(n)}, Q = T - 1$$

- Стационарное распределение является “нулевой модой” матрицы Q=T-1.

$$\mathbf{q} = \lim_{n\to\infty} p^{(n)}$$

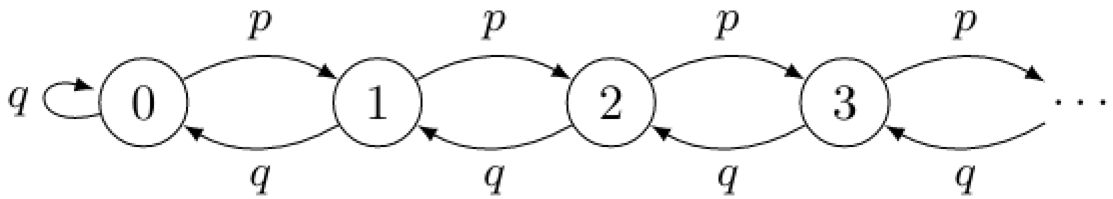
$$\boxed{\mathbf{q} = T\mathbf{q}, \ \sum_i q_i = 1.}$$

Дискретная форма ур. Чемена-Колмогорова:

$$p^{(n+1)} - p^{(n)} = Qp^{(n)}, Q = T - 1,$$

Q – дискретный аналог $\hat{L}$

Упражнение 2
random walk with reflection at zero



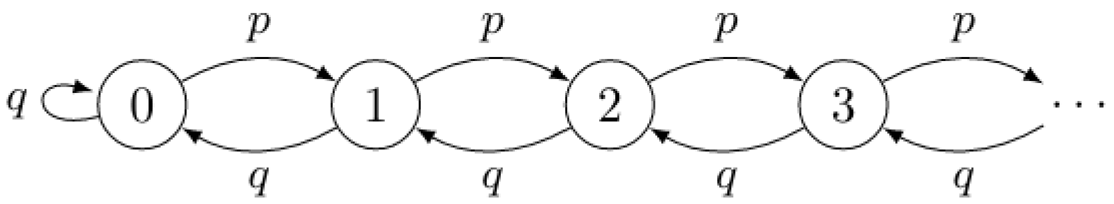
$$
T = \begin{pmatrix} q & q & 0 & 0 & \dots \\ p & 0 & q & & \dots \\ 0 & p & 0 & q & \dots \\ 0 & & p & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \qquad p+q=1.
$$

Ищем стационарное распределение:

$$
\begin{aligned}
&pP(i-1)+qP(i+1)=P(i),\\
&qP(0)+qP(1)=P(0) \Leftrightarrow qP(1)=pP(0).
\end{aligned}
\quad \Rightarrow \quad qP(\mathrm{i}) = pP(\mathrm{i}-1),\ i>1 \quad \Rightarrow \quad P(\mathrm{i}) = \left(\frac{p}{q}\right)^i P(0).
$$

Упражнение 2
random (drunkard’) walk with reflection at zero

$$T = \begin{pmatrix} q & q & 0 & 0 & \dots \\ p & 0 & q & & \dots \\ 0 & p & 0 & q & \dots \\ 0 & & p & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}, \qquad p+q=1.$$



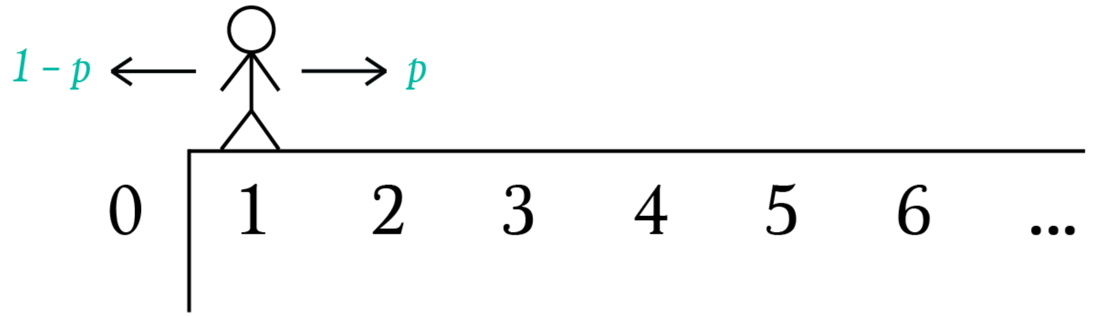
Ищем стационарное распределение:

$$pP(i-1)+qP(i+1)=P(i),$$
$$qP(0)+qP(1)=P(0) \Leftrightarrow qP(1)=pP(0).$$

$$\Rightarrow \quad qP(\mathrm{i})=pP(\mathrm{i}-1),\ i>1 \quad \Rightarrow \quad P(\mathrm{i})=\left(\frac{p}{q}\right)^i P(0).$$

Условие нормировки $\displaystyle\sum_{i=0}^{\infty} P(\mathrm{i})=\frac{1-p}{1-2p}P(0)=1.$

Есть шанс удовлетворить только при p<q=1-p, т.е., когда p<1/2.



Спасибо за внимание!