

# Численный анализ статистики метастабильных состояний

## 1 Марковский процесс “мультипликативная накачка + диффузия”

Рассмотрим марковский процесс вида

$$\psi_{n+1} = DF\psi_n \quad (1)$$

Здесь  $\psi_n$  - функция, определённая на отрезке  $[0, \pi]$ ,  $F$  - оператор умножения на случайно сдвинутую фиксированную функцию. Также отметим, что в конечном итоге нас будет интересовать функция  $\varepsilon_n = -T \ln \psi_n$ , что позволит упростить численные вычисления.

### 1.1 Мультипликативная накачка

Рассмотрим случай  $D = \mathbb{I}$ . И оператор  $F$

$$F = \cosh \left( \frac{\cos(\phi + \alpha)}{T} \right) \quad (2)$$

Здесь  $T$  - параметр температуры,  $\alpha$  - случайная величина, распределённая равномерно на отрезке  $[0, \pi]$ .

Работать с исходной функцией  $\psi_n$  неудобно, т. к. для низких температур функция (2) достигает очень больших значений, в связи с чем перепишем уравнение (1) в терминах свободной энергии

$$\varepsilon_n = \varepsilon_0 - T \sum_{k=0}^n \ln \cosh \left( \frac{\cos(\phi + \alpha_k)}{T} \right) \quad (3)$$

Для больших значений аргумента  $\cosh$

$$T \ln \cosh \left( \frac{\cos(\phi + \alpha_k)}{T} \right) \approx |\cos(\phi + \alpha_k)| - T \ln 2 \quad (4)$$

с экспоненциальной точностью.

#### 1.1.1 Термализация

Как говорилось ранее, нам интересно наблюдать за эволюцией функции  $\varepsilon_n$ , а конкретнее за количеством её локальных минимумов. Как мы увидим далее, число минимумов растёт с понижением температуры, их глубина уменьшается, а плотность увеличивается. Отсюда возникает вопрос о выборе мелкости разбиения области определения свободной энергии  $[0, \pi]$ . Этот вопрос также связан с эволюцией под действием оператора (2) из начального состояния, которое мы выбираем  $\varepsilon_0 = \text{const}$ . При эволюции из такого начального состояния число минимумов в среднем будет расти с увеличением  $n$  до какого-то момента  $N$ . Отсюда возникает естественное ограничение на выбор мелкости разбиения: число точек в окрестности минимума, значение свободной энергии в которых больше значения в точке самого минимума, должно быть достаточно большим на всех этапах эволюции до момента  $N$  включительно. Мы будем считать данное условие выполненным, если в окрестности минимума будет хотя бы 10 таких точек с каждой из сторон от самого минимума. Как говорилось ранее, число минимумов растёт с уменьшением  $T$ , поэтому подбор необходимой мелкости разбиения будем проводить при достаточно низкой температуре.