УДК 519.21

СТАЦІОНАРНИЙ РОЗПОДІЛ В БАГАТОУРНОВІЙ МОДЕЛІ ЕРЕНФЕСТІВ ЗІ ВЗАЄМОДІЄЮ ЧАСТИНОК

Д. С. Шифрін[1], І. І. Ніщенко[1]

[1] Навчально-науковий Фізико-технічний інститут

Анотація

У роботі розглянуто багатоурнову модель Еренфестів з локалізованим обмеженням на переміщення частинок. Допустимими вважаються такі конфігурації, в яких сусідні частинки в кожен момент часу знаходяться в різних урнах. Побудовано ланцюг Маркова, який описує еволюцію такої системи взаємодіючих частинок, знайдено його стаціонарний розподіл та встановлено властивості стаціонарної випадкової конфігурації системи.

Ключові слова: модель Еренфестів, модель Поттса, марковський ланцюг, стаціонарний розподіл

Вступ

Урнові моделі є зручним інструментом аналізу стохастичних процесів із дискретним простором станів. У цій роботі розглянуто узагальнену урнову модель Еренфестів з локальними обмеженнями, що забороняють сусіднім частинкам одночасно перебувати в одній урні. Динаміка системи описується марковським ланцюгом на множині конфігурацій, у якому ймовірність переходу враховує як локальні переміщення частинок, так і глобальну структуру конфігурації. Доведено існування єдиного стаціонарного розподілу гіббсівського типу для цього ланцюга та проаналізовано його асимптотичні властивості. Отримані результати ілюструють, як локальні взаємодії формують глобальну статистичну поведінку системи.

1. Опис моделі

Розглянемо систему з N занумерованих числами від 1 до N частинок, кожна з яких може знаходитися в одній з M занумерованих урн.

Конфігурацією системи називатимемо вектор

$$X = (X_1, \dots, X_N),$$

координата $X_i \in \{1, 2, \dots, M\}$ якого позначає номер урни, в якій знаходиться частинка з номером i.

Через Ω позначимо множину всіх можливих конфігурацій системи:

$$\Omega = \left\{ X = (X_1, \dots, X_N) : X_i \in \{1, \dots, M\} \right\}.$$

Кожній конфігурації $X \in \Omega$ поставимо у відповідність число

$$H(X) = \sum_{j=1}^{N-1} \mathbb{I}(X_j \neq X_{j+1}),$$

яке задає кількість однакових сусідніх координат у векторі $X = (X_1, \dots, X_N)$.

Відстанню між двома конфігураціями X та Y вважатимемо величину

$$d(X, Y) = \sum_{j=1}^{N} \mathbb{I}(X_j \neq Y_j),$$

яка є кількістю координат, в яких вектори X та Y відрізняються.

Припустимо, що з кожною урною $j \in \{1, \dots, M\}$ пов'язано розподіл імовірностей

$$\rho_j = (\rho_{j1}, \rho_{j2}, \dots, \rho_{jM}),$$

згідно з яким частинка, яка в поточний момент часу знаходиться в урні j, вибирає урну, в яку вона може переміститися в наступний момент часу.

Через P позначимо стохастичну матрицю, елементами якої є ймовірності $(\rho_{jk})_{j,k=1}^{M}$.

Задамо на множині конфігурацій Ω ланцюг Маркова $(X(t))_{t \geq 0}$ з матрицею перехідних ймовірностей Q^β, яка має наступний вигляд.

Для довільних $X \in \Omega$, $Y \in \Omega$ маємо:

$$Q^\beta(X, Y) = \begin{cases} \sum\limits_{i=1}^{N} \mathbb{I}(X_i \neq Y_i) \cdot \frac{1}{N} \rho_{X_i Y_i} \cdot \min\left(1, e^{-\beta(H(Y) - H(X))}\right), & d(X, Y) = 1, \\ 1 - \sum\limits_{\substack{Z \in \Omega \\ d(X,Z)=1}} Q^\beta(X, Z), & d(X, Y) = 0, \\ 0, & d(X, Y) > 1. \end{cases} \quad (1)$$

Динаміку цього ланцюга можна описати наступним чином. Нехай

$$X(t) = (x_1(t), \dots, x_N(t))$$

є поточною конфігурацією системи. В момент часу $t + 1$ навмання з ймовірністю $\frac{1}{N}$ обирається одна з частинок. Припустимо, що номер цієї частинки дорівнює i. Тоді згідно з розподілом ймовірностей

$$\rho_{x_i(t)} = \left(\rho_{x_i(t),1}, \dots, \rho_{x_i(t),M}\right)$$

обирається одна з урн. Припустимо, що номер обраної урни дорівнює j. Якщо в обраній урні j немає частинок з номерами $(i-1)$ та $(i+1)$, то обрана частинка i переходить з урни $x_i(t)$ в урну j. Якщо в урні j є обидві частинки з номерами $(i-1)$, $(i+1)$, то частинка i переходить в урну j з імовірністю $e^{-2\beta}$ і залишається в урні $x_i(t)$ з імовірністю $1-e^{-2\beta}$. Якщо в урні j є лише одна з сусідніх до i частинок, то з імовірністю $e^{-\beta}$ частинка i переходить в урну j, і з імовірністю $1-e^{-\beta}$ залишається в урні $x_i(t)$.

Зауважимо, що параметр β характеризує ступінь готовності частинок перебувати в одній урні зі своїми найближчими сусідами. Якщо $\beta = 0$, то перехід здійснюється випадковим чином, не зважаючи на розташування інших частинок. Якщо ж $\beta = \infty$, то множина допустимих конфігурацій системи звужується до множини

$$\Omega_0 = \{X \in \Omega : H(X) = 0\}$$

тих конфігурацій, в яких кожні дві сусідні частинки знаходяться в різних урнах.

Зауважимо, що у випадку, коли вибір урни на кожному кроці відбувається рівноймовірно, тобто коли

$$\rho_{jk} = \frac{1}{M} \quad \text{для довільних } j,k \in \{1,\dots,M\},$$

описана модель співпадає з моделлю антиферромагнетизму Поттса з акцептовно-відхиленими переходами між M станами при температурі $\frac{1}{\beta}$ для графа, який є ланцюжком з N послідовно з'єднаних вершин [1]. При $M = 2$ така модель називається моделлю Ізінга [2].

В моделі Поттса стаціонарним розподілом системи є гіббсівський розподіл

$$\left(\frac{1}{Z}e^{-\beta H(X)}\right)_{X\in\Omega}, \quad \text{де} \quad Z = \sum_{X\in\Omega} e^{-\beta H(X)}.$$

В свою чергу модель Поттса пов'язана з задачею допустимих M-колірних розфарбувань графа, оскільки функція розбиття Z в моделі Поттса задає кількість M-колірних розфарбувань графа, кожні дві з'єднані ребром вершини якого повинні мати різний колір [3].

В цій роботі ми припускаємо, що матриця P, яка задає ймовірності вибору урн, є стохастичною матрицею з додатними елементами, інваріантний розподіл $\pi = (\pi_1, \dots, \pi_M)$ якої задовольняє умові балансу

$$\forall\, i \neq j \qquad \pi_i \cdot \rho_{ij} = \pi_j \cdot \rho_{ji}. \tag{2}$$

2. Стаціонарний розподіл системи

Лема 2.1 *Якщо матриця P має додатні елементи і виконується умова балансу (2), то ланцюг Маркова $(X(t))_{t\geq 0}$ з матрицею перехідних ймовірностей Q^β з (1) є нерозкладним і аперіодичним.*

Аперіодичність ланцюга випливає з того, що для довільного $X \in \Omega$ ймовірність $Q^\beta(X,X)$ є додатною:

$$Q^\beta(X,X) \geq \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \rho_{x_i x_i} > 0.$$

Нерозкладність випливає з того, що для довільних двох конфігурацій X та Y

$$P(X(t+N) = Y \mid X(t) = X) \geq$$
$$\geq P(X(t+1) = Z_1 \mid X(t) = X)\times$$
$$\times P(X(t+2) = Z_2 \mid X(t+1) = Z_1) \times \dots \times$$
$$\times P(X(t+N) = Y \mid X(t+N-1) = Z_{N-1}),$$

де $Z_1 = (y_1, x_1, \dots, x_{N-1})$, $Z_2 = (y_1, y_2, x_3, \dots, x_N)$, …, $Z_{N-1} = (y_1, \dots, y_{N-1}, x_N)$ — це такі конфігурації, що $d(X, Z_1) = 1$, $d(Z_1, Z_2) = 1$, …, $d(Z_{N-1}, y) = 1$, а за побудовою перехід між двома конфігураціями, що відрізняються однією координатою, відбувається з додатною ймовірністю. Отже ймовірність за N кроків з конфігурації X потрапити в конфігурацію Y є додатною.

З леми 2.1 випливає існування та єдиність інваріантного розподілу ланцюга Маркова $(X(t))_{t\geq 0}$. В наступній теоремі вказано вигляд цього розподілу.

Теорема 2.2 *Якщо матриця P має додатні елементи і виконується умова (2), то інваріантний розподіл ланцюга Маркова $(X(t))_{t\geq 0}$ має вигляд*

$$\mu^\beta(x_1, \dots, x_N) = \frac{\pi_{x_1} \dots \pi_{x_N} \cdot e^{-\beta H(X)}}{\sum\limits_{Y\in\Omega} \pi_{y_1} \dots \pi_{y_N} \cdot e^{-\beta H(Y)}}, \tag{3}$$

де π — інваріантний розподіл матриці переходів P.

Для доведення теореми досить переконатися в тому, що розподіл імовірностей μ^β задовольняє умову балансу:

$$\forall\, X \neq Y \quad \mu^\beta(X)Q^\beta(X,Y) = \mu^\beta(Y)Q^\beta(Y,X). \tag{4}$$

Умова (4) є достатньою умовою того, що μ^β є інваріантним розподілом для Q^β [4].

Зрозуміло, що якщо $d(X,Y) > 1$, то $Q^\beta(X,Y) = Q^\beta(Y,X) = 0$, і (4) виконується.

Якщо $d(X,Y) = 1$ і X та Y відрізняються лише в i-ій координаті, то, зважаючи на умову балансу (2), і позначивши через Z нормуючий множник в (3), отримаємо

$$\mu^\beta(X)Q^\beta(X,Y) = \frac{1}{Z}\pi_{x_1}\dots\pi_{x_N}\cdot e^{-\beta H(X)}\frac{1}{N}\rho_{x_i y_i}\times$$
$$\times \min\left(1, e^{-\beta(H(Y)-H(X))}\right) = \frac{1}{Z}\pi_{y_1}\dots\pi_{x_i}\dots\pi_{y_N}\frac{1}{N}\times$$
$$\times \rho_{x_i y_i} e^{-\beta H(Y)} e^{-\beta(H(X)-H(Y))}\times$$
$$\times \min\left(1, e^{-\beta(H(Y)-H(X))}\right) = \frac{1}{Z}\pi_{y_1}\dots\pi_{y_i}\dots\pi_{y_N}\times$$
$$\times \frac{1}{N}\rho_{y_i x_i} e^{-\beta H(Y)} \min\left(e^{-\beta(H(X)-H(Y))}, 1\right) =$$
$$= \mu^\beta(Y)Q^\beta(Y,X),$$

що й доводить теорему.

Розглянемо тепер ланцюг Маркова $(X(t))_{t\geq 0}$ з матрицею перехідних ймовірностей Q^{∞}, яку отримаємо з матриці Q^{β} граничним переходом при $\beta \to \infty$.

В такому ланцюзі зміна конфігурації X на конфігурацію $Y \neq X$ можлива лише в тому випадку, коли $H(Y) \leq H(X)$. Тому, стартувавши з довільної конфігурації $X \in \Omega$, ланцюг за скінченну кількість кроків опиняється в множині $\Omega_0 = \{Y \in \Omega : H(Y) = 0\}$ тих конфігурацій, в яких сусідні частинки знаходяться в різних урнах.

Щоб знайти стаціонарний розподіл цього ланцюга, скористаємось наступною лемою.

Лема 2.3 *Нехай $(X_t)_{t\geq 0}$, є скінченним нерозкладним аперіодичним ланцюгом Маркова з матрицею перехідних ймовірностей Q^{β}. Тоді якщо $Q^{\beta} \to Q^{\beta_0}$ при $\beta \to \beta_0$ і Q^{β_0} є нерозкладною , то розподіл*

$$\mu^{\beta_0} = \lim_{\beta \to \beta_0} \mu^{\beta}$$

є інваріантним розподілом для Q^{β_0}.

Для доведення теореми зауважимо, що множина $\mathscr{K}$ всіх ймовірнісних розподілів на Ω є компактом. Тому з послідовності $\{\mu^{\beta}\} \in \mathscr{K}$ можна виділити збіжну підпослідовність $\{\mu^{\beta_n}\}$:

$$\mu^{\beta_n} \to \nu \in \mathscr{K}, \quad n \to \infty.$$

Оскільки μ^{β_n} є інваріантним розподілом для Q^{β_n}, то

$$\mu^{\beta_n} Q^{\beta_n} = \mu^{\beta_n}.$$

Перейшовши в цій рівності до границі, отримуємо рівність

$$\nu Q^{\beta_0} = \nu,$$

яка означає, що розподіл ν є інваріантним для Q^{β_0}. Єдиність інваріантного розподілу випливає з нерозкладності Q^{β_0}.

З цієї леми випливає, що стаціонарний розподіл ланцюга Маркова $(X(t))_{t\geq 0}$ з матрицею перехідних ймовірностей Q^{∞} має вигляд

$$\mu^{\infty}(x_1, \dots, x_N) = \frac{\pi_{x_1} \dots \pi_{x_N} \cdot \mathbb{I}(X \in \Omega_0)}{\sum\limits_{Y \in \Omega_0} \pi_{y_1} \dots \pi_{y_N}}. \tag{4}$$

З леми також випливає, що інваріантним розподілом ланцюга $(X(t))_{t\geq 0}$ з матрицею перехідних ймовірностей Q^0 є розподіл

$$\mu^0(x_1, \dots, x_N) = \frac{\pi_{x_1} \dots \pi_{x_N}}{\sum\limits_{Y \in \Omega} \pi_{y_1} \dots \pi_{y_N}},$$

що узгоджується з результатом, отриманим в [5] для багатоурнової моделі Еренфестів без взаємодії.

3. Властивості стаціонарної випадкової конфігурації

Розглянемо випадкову конфігурацію $(X_1, \dots, X_N)$ як послідовність $(X_i)_{i=1}^N$ величин зі значеннями на множині $\{1, \dots, M\}$.

Нас цікавить питання, чи утворює ланцюг Маркова послідовність $(X_i)_{i=\overline{1,N}}$, для якої виконується умова

$$P(X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N) = \mu^{\infty}(x_1, \dots, x_N). \tag{5}$$

Теорема 3.1 *Послідовність $(X_i)_{i=1}^N$, для якої виконується (5), є однорідним марковським ланцюгом тоді і лише тоді, коли $\pi_i = \frac{1}{M}$ для довільного $i = 1, \dots, M$.*

Справді, якщо $\pi_i = \frac{1}{M}$ для довільного i, то для довільної конфігурації $X \in \Omega_0$ послідовно знаходимо:

$$P(X_1 = x_1, \dots, X_N = x_N) = \frac{\left(\frac{1}{M}\right)^N}{\sum\limits_{y \in \Omega_0} \left(\frac{1}{M}\right)^N} = \frac{1}{|\Omega_0|},$$

$$\begin{aligned} &P(X_1 = x_1, \dots, X_{N-1} = x_{N-1}) = \\ &= \sum_{i \neq x_{N-1}} P(X_1 = x_1, \dots, X_N = x_{N-1}, X_N = i) = \\ &= \sum_{i \neq x_{N-1}} \frac{1}{|\Omega_0|} = \frac{M-1}{|\Omega_0|}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &P(X_1 = x_1, \dots, X_{N-2} = x_{N-2}) = \\ &= \sum_{i \neq x_{N-2}} \frac{M-1}{|\Omega_0|} = \frac{(M-1)^2}{|\Omega_0|}, \end{aligned}$$

і т.д.

$$P(X_1 = x_1) = \frac{(M-1)^{N-1}}{|\Omega_0|}.$$

Звідси випливає, що для довільного $k = \overline{1, N-1}$

$$P(X_{k+1} = j \mid X_k = i, \dots, \ X_1 = x_1) = \frac{1}{M-1}.$$

Ця ймовірність є константою, а отже $(X_i)_{i=1}^N$ — це ланцюг Маркова з матрицею перехідних ймовірностей $R = (R_{ij})_{i,j=1}^M$, де

$$R_{ij} = \begin{cases} 0, & i = j, \\ \frac{1}{M-1}, & i \neq j. \end{cases}$$

Якщо ж $(X_i)_{i=1}^N$ є однорідним ланцюгом Маркова, то для його перехідних ймовірностей p_{ij} можемо записати:

$$\begin{aligned} p_{ij} &= \frac{P(X_1 = x_1, \dots, X_{N-1} = i, \ X_N = j)}{P(X_1 = x_1, \dots, X_{N-1} = i)} = \\ &= \frac{\pi_{x_1} \dots \pi_{x_{N-2}} \cdot \pi_i \cdot \pi_j}{\pi_{x_1} \dots \pi_{x_{N-2}} \cdot \pi_i \cdot (1 - \pi_i)} = \frac{\pi_j}{1 - \pi_i}. \end{aligned}$$

З іншого боку:

$$p_{ij} = \frac{P(X_1 = x_1, \dots, X_{N-2} = i,\ X_{N-1} = j)}{P(X_1 = x_1, \dots, X_{N-2} = i)} = \\ = \frac{\pi_{x_1} \dots \pi_i \cdot \pi_j \cdot (1 - \pi_j)}{\pi_{x_1} \dots \pi_i \cdot \sum\limits_{k \neq i} \pi_k (1 - \pi_k)} = \frac{\pi_j (1 - \pi_j)}{1 - \pi_i - \sum\limits_{k \neq i} \pi_k^2}.$$

З рівності

$$\frac{\pi_j}{1 - \pi_i} = \frac{\pi_j (1 - \pi_j)}{1 - \pi_i - \sum\limits_{k \neq i} \pi_k^2}$$

знаходимо, що для довільних $i \neq j$

$$\pi_j = \frac{1 - \pi_i}{\sum\limits_{k \neq i} \pi_k^2}.$$

Оскільки права частина від j не залежить, то для довільного j $\pi_j = C$, де C є деякою константою.

З умови нормування $\sum\limits_{j=1}^{M} \pi_j = 1$ зрозуміло, що

$$C = \frac{1}{M}.$$

Дослідимо асимптотичну залежність випадкових величин X_1 та X_N в ланцюзі Маркова $(X_i)_{i=1}^N$.

Теорема 3.2 *Якщо розподіл $\pi = (\pi_i)_{i=1}^M$ є рівномірним, то*

$$P(X_1 = x_1,\ X_N = x_N) - P(X_1 = x_1) \times \\ \times P(X_N = x_N) \to 0, \text{при } N \to \infty.$$

Для доведення теореми зауважимо, що якщо π є рівномірним, то $(X_i)_{i=\overline{1,N}}$ є ланцюгом Маркова з матрицею R, яка є нерозкладною, аперіодичною з рівномірним на $\{1, \dots, M\}$ інваріантним розподілом. Тому

$$P(X_1 = x_1,\ X_N = x_N) = P(X_1 = x_1) \cdot R^N_{x_1 x_N} = \\ = \frac{1}{M} \cdot R^N_{x_1 x_N} \xrightarrow[N \to \infty]{} \frac{1}{M} \times \frac{1}{M}.$$

З того, що $P(X_1 = x_1) = \frac{1}{M}$ випливає, що початковий розподіл ланцюга співпадає з інваріантним, а отже $P(X_N = x_N) = \frac{1}{M}$.

Таким чином:

$$P(X_1 = x_1,\ X_N = x_N) - P(X_1 = x_1)\, P(X_N = x_N) = \\ = P(X_1 = x_1,\ X_N = x_N) - \frac{1}{M} \cdot \frac{1}{M} \to 0, \quad N \to \infty.$$

Висновки

У роботі побудовано багатоурнову модель з локальними обмеженнями на переміщення частинок та гіббсівським типом еволюції. Доведено існування єдиного стаціонарного розподілу ланцюга Маркова, який описує динаміку системи. Проаналізовано його граничну поведінку та встановлено умови, за яких стаціонарна конфігурація є марковським ланцюгом. Показано, що при зростанні розміру системи зникає залежність між частинками, що знаходяться на великій відстані.

Перелік використаних джерел

1. *Bordewich M.*, *Greenhill C.*, *Patel V.* Mixing of the Glauber dynamics for the ferromagnetic Potts model // arXiv preprint arXiv:1406.0210. — 2014. — Черв. — URL: https://arxiv.org/abs/1406.0210.
2. *Walker J. S.* A Student's Guide to the Ising Model. — Cambridge University Press, 2023. — ISBN 9781009089579. — DOI: 10.1017/9781009089579. — URL: https://www.cambridge.org/highereducation/books/a-students-guide-to-the-ising-model/F2CC88FA41D6D4F858FAAAFACB1709D8.
3. *Jerrum M.* A very simple algorithm for estimating the number of k-colourings of a low-degree graph : тех. звіт. / Department of Computer Science, University of Edinburgh. — United Kingdom, 04.1994. — Manuscript.
4. *Norris J. R.* Markov Chains. — Cambridge : Cambridge University Press, 1997. — ISBN 9780521633964. — First paperback edition 1998.
5. *Ковальчук О. М.* Задача фільтрації для частково спостережуваного процесу міграції частинок в багатоурновій моделі Еренфестів : Магістерська дисертація / Ковальчук Ольга Миронівна. — Київ : Національний технічний університет України «КПІ імені Ігоря Сікорського», 2024. — С. 49. — Спеціальність 113 Прикладна математика.