

МОДЕЛЬ ЕРЕНФЕСТІВ ЗІ ЗМІННОЮ КІЛЬКІСТЮ ПЕРЕМІЩУВАНИХ КУЛЬОК

Т. В. Сіряк^{1, a}, І. І. Ніщенко¹

¹ Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»,
ІН Фізико-технічний інститут

Анотація

У статті розглядаються дві моделі Еренфестів з випадковою кількістю переміщуваних кульок. В першій моделі вибір кульок є вибором без повторень, а в другій – кульки можуть вибиратися з повторенням. Встановлено властивості цих моделей. Показано, що друга модель наслідує властивості класичної моделі Еренфестів.

Ключові слова: модель Еренфестів, ланцюг Маркова, ентропія

Вступ

У 1907 році Поль і Тетяна Еренфести запропонували просту імовірнісну модель для опису дифузії молекул газу через мембранну перегородку в ємності. Відомий польський та американський математик Марк Кац казав, що модель Еренфестів є чи не найповчальнішим прикладом в усій фізиці, адже вона змогла пояснити природу парадоксальної різниці між зворотністю в часі рівнянь класичної механіки і другим законом термодинаміки.

На прикладі урнної моделі Еренфестів в роботі [1] було проведено ґрунтовний аналіз, який демонструє різницю між означеннями ентропії та рівноважного стану системи, запропонованими Больцманом та Гіббсом.

На даний час існує багато узагальнень та модифікацій класичної моделі Еренфестів. Вивчають, наприклад, багатоурннові моделі, моделі з різними типами кульок в урнах.

В цій роботі ми розглядаємо і порівнюємо дві урнові моделі, які відрізняються від класичної моделі Еренфестів ускладненням законом взаємодії кульок.

1. Класична модель Еренфестів

Модель, яку запропонували Поль та Тетяна Еренфести, описується наступним чином.

В двох урнах А і В знаходяться N кульок, занумерованих числами від 1 до N. В кожен момент часу з множини $I = \{0, 1, \dots, N\}$ навмання вибирається число з ймовірністю $\frac{1}{N+1}$ кожне і кулька, номер якої співпадає з вибраним числом, перекладається в іншу урну. Якщо вибраним числом є 0, то ніяких дій не відбувається.

Позначимо через y_n кількість кульок в урні А в момент часу n . Нехай в початковий момент часу всі кульки знаходяться в урні В, тобто $y_0 = 0$. Послідовність $\{y_n\}_{n \geq 0}$ утворює ланцюг Маркова на множині

$E = \{0, 1, \dots, N\}$ з перехідними ймовірностями:

$$p_{i,i-1} = \frac{i}{N+1}, p_{i,i+1} = \frac{N-i}{N+1}, p_{ii} = \frac{1}{N+1}, i \in E$$

Властивості цієї моделі є добре вивченими [1, 2]. Зокрема, відомо, що стаціонарний розподіл є біноміальним:

$$\pi_i = \frac{C_N^i}{2^N}, i = 0, \dots, N$$

і має місце збіжність розподілів:

$$\forall i \in E : P(y_n = i) \rightarrow \pi_i, n \rightarrow \infty$$

З цієї збіжності випливає і збіжність неперервних функціоналів від $\{y_n\}_{n \geq 0}$. Наприклад, функціонал :

$$H(n) = \sum_{i=0}^N P(y_n = i) \log P(y_n = i)$$

задає ентропію системи, і тоді

$$H(n) \rightarrow H(\pi) = \sum_{i=0}^N \pi_i \log \pi_i, n \rightarrow \infty$$

і причому збіжність є монотонною [3].

Відомо також [4], що для процесу з неперервним часом $\tilde{y}(t) = \frac{1}{N} y_{[tN]}, t \in [0; 1]$ має місце така збіжність за розподілом:

$$\frac{1}{N} y_{[tN]} \Rightarrow f(t),$$

де $f(t)$ – детермінована функція, що є розв'язком диференціального рівняння

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{1}{2}(1 - f(t)).$$

З цієї збіжності випливає, що для довільної обмеженої неперервної функції h :

$$Mh\left(\frac{1}{N} y_{[tN]}\right) \rightarrow h(f(t)), \forall t \in [0; 1], N \rightarrow \infty$$

^atanyaberd01@gmail.com

2. Модель Еренфестів зі змінною кількістю переміщуваних кульок. Вибір без повторення

Розглянемо тепер модель Еренфестів, в якій в кожен момент часу n переміщуватись може не щонайбільше одна, а $K_n, 0 \leq K_n \leq N$ різних кульок. Опишемо модель наступним чином. Нехай $\{\xi_n\}_{n \geq 1}$ – послідовність незалежних однаково розподілених випадкових величин зі значеннями в множині $I = \{0, 1, \dots, N\}$. В кожен момент часу n з множини чисел $\{1, \dots, N\}$ навмання обирають ξ_n різних чисел (вибір без повернення) і кульки, номери яких співпадають з вибраними числами, перекладаються в іншу урну. Якщо $\xi_n = 0$, то ніяких дій не відбувається. Позначимо через x_n кількість кульок в урні А в момент часу n , $x_0 = 0$. Зауважимо, що

$$x_{n+1} = x_n + \xi_{n+1}^+ - \xi_{n+1}^-$$

де ξ_{n+1}^+, ξ_{n+1}^- – кількість кульок, які на $(n+1)$ -му кроці перекладали з В в А і з А в В відповідно. Оскільки ці випадкові величини залежать лише від x_n, ξ_{n+1} , то можна записати:

$$x_{n+1} = g(x_n; \xi_{n+1}),$$

де g – деяка детермінована функція. Звідси випливає, що $\{x_n\}_{n \geq 0}$ утворює ланцюг Маркова.

Згідно з описаною схемою вибору і перекладання кульок випадкові величини ξ_n^+, ξ_n^- мають гіпергеометричний розподіл $HG(N, N - x_n, \xi_{n+1})$, і $HG(N, x_n, \xi_{n+1})$ відповідно, тобто при $x_n = i, \xi_{n+1} = r$:

$$P(\xi_{n+1}^+ = j | x_n = i, \xi_{n+1} = r) = \frac{C_i^{r-j} \cdot C_{N-i}^j}{C_N^r}$$

$$P(\xi_{n+1}^- = j | x_n = i, \xi_{n+1} = r) = \frac{C_i^j \cdot C_{N-i}^{r-j}}{C_N^r}$$

Тоді перехідні ймовірності ланцюга Маркова $\{x_n\}_{n \geq 0}$ є такими:

$$\begin{aligned} P_{ij}^x &= P(x_{n+1} = j | x_n = i) = \\ &= \sum_{r=0}^N P(\xi_{n+1}=r) \cdot P(x_{n+1} = j | x_n = i, \xi_{n+1} = r) = \\ &= \sum_{r=0}^N P(\xi_{n+1} = r) \cdot Q_{ij}(r), \end{aligned}$$

де

$$Q_{ij}(r) = \begin{cases} \frac{C_i^{\frac{r-(j-i)}{2}} \cdot C_{N-i}^{\frac{r+(j-i)}{2}}}{C_N^r}, & r - (i - j) \text{ є парним,} \\ 0, & \text{інакше.} \end{cases}$$

З вигляду перехідних ймовірностей випливає, що ланцюг $\{x_n\}_{n \geq 0}$ є нерозкладним, аперіодичним. Безпосередньою перевіркою можна переконатися, що біноміальний розподіл $\pi = \left(\frac{C_N^k}{2^N} \right)_{k \in E}$ є інваріантним розподілом ланцюга $\{x_n\}_{n \geq 0}$, незалежно від розподілу випадкових величин $\{\xi_n\}_{n \geq 1}$.

Наступна теорема описує асимптотичну поведінку середньої кількості кульок в урні А.

Теорема

Якщо $\frac{n}{N} \rightarrow C = \text{const}$, при $n \rightarrow \infty$ та $N \rightarrow \infty$, то

$$\frac{Mx_n}{N} \rightarrow \frac{1}{2}(1 - e^{-2ac}), \frac{n}{N} \rightarrow C$$

де $a = M\xi_1$.

Доведення

Взявши математичне сподівання в обох частинах рівності $x_{n+1} = x_n + \xi_{n+1}^+ - \xi_{n+1}^-$ отримаємо наступне:

$$Mx_{n+1} = Mx_n + M\xi_{n+1}^+ - M\xi_{n+1}^-.$$

Оскільки

$$\begin{aligned} M\xi_{n+1}^+ &= M(M(\xi_{n+1}^+ | x_n, \xi_{n+1})) = \\ &= M(\xi_{n+1} \cdot \frac{N - x_n}{N}) = \frac{a}{N}(N - Mx_n), \\ M\xi_{n+1}^- &= M(M(\xi_{n+1}^- | x_n, \xi_{n+1})) = \\ &= M(\xi_{n+1} \cdot \frac{x_n}{N}) = \frac{a}{N}(Mx_n), \end{aligned}$$

то

$$Mx_{n+1} = Mx_n \cdot (1 - \frac{2a}{N}) + a.$$

Звідси

$$\begin{aligned} Mx_{n+1} &= Mx_0 \cdot \left(1 - \frac{2a}{N}\right)^{n+1} + a \left(1 + \left(1 - \frac{2a}{N}\right) + \dots + \left(1 - \frac{2a}{N}\right)^n\right) = \\ &= \frac{N}{2} \left(1 - \left(1 - \frac{1}{n} \cdot \frac{2an}{N}\right)^{n+1}\right) \end{aligned}$$

і тоді маємо

$$\frac{Mx_n}{N} \rightarrow \frac{1}{2}(1 - e^{-2ac}), \frac{n}{N} \rightarrow C$$

що й стверджувалося.

Нижче ми пропонуємо підхід, який дозволяє звести вивчення асимптотичних властивостей моделі, що описується ланцюгом $\{x_n\}_{n \geq 0}$ зі складною формою взаємодії кульок, до деякої іншої моделі $\{z_n\}_{n \geq 0}$, яка з одного боку є пов'язаною з $\{x_n\}_{n \geq 0}$, а з іншого може розглядатися як підпослідовність ланцюга $\{y_n\}_{n \geq 0}$.

3. Модель Еренфестів зі змінною кількістю переміщуваних кульок. Вибір з повторенням

Нехай $\{\eta_n\}_{n \geq 1}$ – послідовність незалежних випадкових величин зі значеннями в $\{0, 1, \dots, N\}$ і нехай в початковий момент часу всі кульки знаходяться в урні В. В момент часу n , якщо $\eta_n = k$, то з множини чисел $\{0, 1, \dots, N\}$ k разів навмання одне за одним вибираються k чисел (вибір з поверненням) з ймовірністю $\frac{1}{N+1}$ кожне і незалежно від попередніх результатів. Кожного разу кулька, номер якої співпадає з вибраним числом, перекладається в іншу урну. Зауважимо, що при такій схемі одна й та сама кулька може перекладатися декілька разів, і якщо кількість її перекладань була парною, то в підсумку кулька залишиться в тій самій урні, в якій і була.

Якщо ж кількість перекидань була непарною, то кулька опиниться в іншій урні.

Наступна лема пояснює, чому модель $\{z_n\}_{n \geq 0}$ можна вважати вкладеною в $\{y_n\}_{n \geq 0}$.

Лема

$$\{z_n\}_{n \geq 0} \stackrel{d}{=} \{y_{S_n}\}_{n \geq 0},$$

де $S_n = \eta_1 + \dots + \eta_n$, $n \geq 1$, а $S_0 = 0$.

Доведення

Оскільки початкові розподіли $\{z_n\}_{n \geq 0}$ і $\{y_{S_n}\}_{n \geq 0}$ співпадають, то досить довести, що перехідні ймовірності ланцюгів $\{z_n\}_{n \geq 0}$ і $\{y_{S_n}\}_{n \geq 0}$ співпадають. З незалежності $\eta_1, \dots, \eta_n$ і строго марківської властивості випливає, що

$$\begin{aligned} P(y_{S_{n+1}} = j | y_{S_n} = i) &= P(y_{\eta_1} = j | y_0 = i) = \\ &= \sum_{r=0}^N P(\eta_1 = r) \cdot P(y_r = j | y_0 = i) = \\ &= \sum_{r=0}^N P(\eta_1 = r) (P^r)_{ij}, \end{aligned}$$

де P^r – r -тий степінь матриці перехідних ймовірностей P ланцюга $\{y_n\}_{n \geq 0}$. Для $\{z_n\}_{n \geq 0}$ маємо:

$$\begin{aligned} P(z_{n+1} = j | z_n = i) &= \sum_{r=0}^N P(\eta_{n+1} = r) (P^r)_{ij} = \\ &= \sum_{r=0}^N P(\eta_1 = r) (P^r)_{ij} = P(y_{S_{n+1}} = j | y_{S_n} = i). \end{aligned}$$

Як наслідок, отримуємо, що для довільної обмеженої неперервної функції h маємо:

$$Mh\left(\frac{1}{N} z_{[tN]}\right) \rightarrow h(f(bt)), N \rightarrow \infty$$

де $b = M\eta_1$. Справді:

$$Mh\left(\frac{1}{N} z_{[tN]}\right) = Mh\left(\frac{1}{N} y_{S_{[tN]}}\right)$$

і оскільки за законом великих чисел $S_n \sim nb$, при великих n , то

$$Mh\left(\frac{1}{N} z_{[tN]}\right) \sim Mh\left(\frac{1}{N} y_{S_{[tN]}}\right) \rightarrow h(f(tb)), N \rightarrow \infty$$

4. Зв'язок між двома моделями з випадковими кількостями переміщуваних кульок

Нехай $p = (p_0, \dots, p_N)$ – розподіл ймовірностей випадкових величин $\{\xi_n\}_{n \geq 1}$ в моделі вибору без повторень, а $q = (q_0, \dots, q_N)$ – розподіл ймовірностей випадкових величин $\{\eta_n\}_{n \geq 1}$ в моделі вибору з повтореннями. Виявляється, що за заданим розподілом p можна підібрати розподіл q так, щоб відповідні ланцюги Маркова $\{x_n\}_{n \geq 0}$ та $\{z_n\}_{n \geq 0}$ мали однакові розподіли. Щоб довести це, зауважимо спочатку, що при умові $\eta_n = k$ результати k -кратного переміщення кульок згідно класичної схеми Еренфестів описується множиною $\Omega_k = \{(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k), \varepsilon_i \in \{0, 1, \dots, N\}\}$ потужності $|\Omega_k| = (N+1)^k$.

Позначимо через k_i^ε кількість координат вектора $\varepsilon = (\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$, які дорівнюють i . Якщо $k_i^\varepsilon, i = 1, \dots, N$ є парним числом, то кулька з номером i після k_i^ε

перекидань опиниться у підсумку в тій самій урні, в якій і була. Якщо ж k_i^ε є непарним числом, то кулька з номером i після k_i^ε перекидань опиниться в іншій урні.

Нехай $A(r, k) \subset \Omega_k$ – підмножина тих векторів $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_k)$ в яких рівно r чисел з $k_1, \dots, k_N$ є непарними (k_0 може бути довільним на проміжку від 0 до k).

Покладемо:

$$\begin{aligned} \forall n \geq 1 : P(\xi_n = r | \eta_n = k) &= \frac{|A(r, k)|}{|\Omega_k|} = \\ &= \frac{|A(r, k)|}{(N+1)^k}, k \geq r \end{aligned} \quad (1)$$

Тоді справедлива наступна теорема.

Теорема

Нехай $q = (q_0, \dots, q_N)$ є розв'язками системи рівнянь

$$p_r = \sum_{k=r}^N \rho_{rk} \cdot q_k, r = 0, \dots, N, \quad (2)$$

де $\rho_{rk} \equiv P(\xi_n = r | \eta_n = k), 0 \leq r \leq k \leq N$.

Тоді

$$\{x_n\}_{n \geq 0} \stackrel{d}{=} \{z_n\}_{n \geq 0}$$

Доведення

Зауважимо спочатку, що система 2 завжди має розв'язок, оскільки є трикутною:

$$q_N = \frac{1}{\rho_{NN}} p_N$$

$$q_{N-1} = \frac{1}{\rho_{N-1, N-1}} (p_{N-1} - \rho_{N-1, N} \cdot q_N)$$

і так далі

$$q_0 = \frac{1}{\rho_{0,0}} (p_0 - \rho_{0,1} \cdot q_1 - \dots - \rho_{0,N} \cdot q_N)$$

З 1 випливає, що $\sum_{k=0}^N q_k = 1$. Справді:

$$\begin{aligned} 1 &= \sum_{r=0}^N p_r = \sum_{r=0}^N \sum_{k=r}^N \rho_{rk} \cdot q_k = \\ &= \sum_{k=0}^N \left(\sum_{r=0}^k \rho_{rk} \right) \cdot q_k = \sum_{k=0}^N q_k. \end{aligned}$$

Покажемо, що перехідні ймовірності p_{ij}^x та p_{ij}^z при заданих розподілах p та q співпадають. Маємо:

$$\begin{aligned} P_{ij}^z &= P(z_n = j | z_{n-1} = i) = \\ &= \sum_{k=0}^N q_k \cdot p(z_n = j | z_{n-1} = i, \eta_n = k) = \\ &= \sum_{k=0}^N q_k \cdot \sum_{r=0}^k p(z_n = j, \xi_n = r | z_{n-1} = i, \eta_n = k) = \\ &= \sum_{r=0}^N \left(\sum_{k=r}^N q_k \cdot p(\xi_n = r | \eta_n = k) \right) \times \\ &\quad \times p(z_n = j | z_{n-1} = i, \eta_n = k, \xi_n = r) = \end{aligned}$$

$$= \sum_{r=0}^N p_r \cdot p(x_n = j | x_n = i, \xi_n = r) = P_{ij}^x.$$

Таким чином, можна стверджувати, що при вказаному зв'язку між розподілами p та q модель з вибором кульок без повторень наслідуює властивості моделі з вибором кульок з повторенням, а саме,

$$H^x(n) \stackrel{d}{=} H^z(n) \rightarrow H(\pi), n \rightarrow \infty$$

і для довільної неперервної обмеженої функції h :

$$Mh\left(\frac{1}{N}x_{[tN]}\right) = Mh\left(\frac{1}{N}z_{[tN]}\right) = Mh\left(\frac{1}{N}y_{s[tN]}\right) \sim$$

$$\sim Mh\left(\frac{1}{N}y_{[btN]}\right) \rightarrow h(f(tb)),$$

де $b = \sum_{k=0}^N kq_k$.

Висновки

В роботі розглянуто дві моделі Еренфестів зі змінною кількістю переміщуваних кульок. Встановлено

властивості кожної з моделей та запропоновано метод побудови розподілу ймовірностей кількості переміщуваних кульок в одній з моделей так, щоб відповідні ланцюги Маркова цих моделей мали однаковий розподіл.

Перелік використаних джерел

1. M.J. Klein. Entropy and the Ehrenfest urn model // Physica XXII. — 1956. — no. 1. — P. 569–575.
2. P. Diaconis. The cutoff phenomenon in Finite Markov chains // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. — 1996. — Vol. 93. — P. 1659–1664.
3. M. Cheraghchi. Expressions for the Entropy of Binomial-Type Distributions // Department of Computing, Imperial College London. — 2018. — Vol. 1, no. 1. — P. 1–18.
4. Ethier S. N., Kurtz T. G. Markov processes: Characterization and convergence. — New York: Wiley, 1986.