Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

П. Н. Вабищевич, Сходимость алгоритма типа Метрополиса для большого канонического ансамбля, *Матем. заметки*, 2007, том 82, выпуск 4, 519–524

DOI: <https://doi.org/10.4213/mzm3822>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.234.197.8

26 апреля 2023 г., 13:00:19

Сходимость алгоритма типа Метрополиса для большого канонического ансамбля

Н. П. Вабищевич

В работе исследуется вопрос сходимости алгоритмов типа Метрополиса, использующихся при моделировании статистических систем с переменным числом частиц, находящихся в ограниченном объеме. В работе обосновано использование алгоритмов Метрополиса для определенного класса таких статистических систем. Доказана теорема о геометрической эргодичности марковского процесса, моделирующего поведение ансамбля переменного числа частиц в ограниченном объеме, взаимодействие которых описывается ограниченным снизу потенциалом, растущим как $r^{-3-\alpha}$, $\alpha \geq 0$, при $r \rightarrow 0$.

Библиография: 6 названий.

1. Алгоритмы типа Метрополиса–Хастингса. Для численного нахождения различных средних по статистическим ансамблям используются разновидности алгоритма Метрополиса–Хастингса [1], состоящего в следующем.

Пусть дана ненормированная функция плотности $\pi(\cdot)$ на пространстве $\mathcal{X}$, которой можно сопоставить вероятностную меру

$$\tilde{\pi}(A) = \frac{\int_A \pi(x) dx}{\int_{\mathcal{X}} \pi(x) dx}.$$

Предположим, что необходимо оценить среднее функции $f: \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ по распределению $\pi(A)$, т.е. необходимо оценить величину

$$\tilde{\pi}(f) = \frac{\int_{\mathcal{X}} f(x) \pi(x) dx}{\int_{\mathcal{X}} \pi(x) dx}.$$

Возьмем некоторый “затравочный” марковский процесс с переходной вероятностью $Q(x, dy) \propto q(x, y) dy$, допускающий эффективную численную реализацию. От выбора этого процесса зависит характерное время сходимости результирующего процесса Метрополиса–Хастингса (М–Х) к стационарному распределению. Процесс М–Х со стационарным распределением $\tilde{\pi}(\cdot)$ строится следующим образом. Имея X_n и Q , строим Y_{n+1} :

$$\mathbb{P}\{Y_{n+1} \in A \mid X_n\} = \int_A Q(X_n, dy).$$

Затем, с вероятностью $\alpha(X_n, Y_{n+1})$, где

$$\alpha(x, y) = \min \left[1, \frac{\pi(y)q(y, x)}{\pi(x)q(x, y)} \right],$$

принимаям $X_{n+1} = Y_{n+1}$ или с вероятностью $1 - \alpha(X_n, Y_{n+1})$ оставляем $X_{n+1} = X_n$. Используемая конструкция является функциональным аналогом метода отбора Неймана,

$$\mathbb{P}\{X_{n+1} \in A \mid X_n\} = \int_A \alpha(X_n, y)Q(X_n, dy) + \mathbf{1}_A(X_n) \int_{\mathcal{X}} [1 - \alpha(X_n, y)]Q(X_n, dy).$$

В случае $q(x, y) = q(y, x)$ получаем симметричный алгоритм Метрополиса [2], в котором

$$\alpha(x, y) = \min \left[1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \right].$$

Если две цепочки Маркова с переходными операторами P_1 и P_2 имеют одно и то же стационарное распределение $\tilde{\pi}(\cdot)$ (не обязательно единственное), то распределение $\tilde{\pi}(\cdot)$ также является стационарным для цепочки с оператором $P_1 P_2$. На этом наблюдении основаны способы комбинирования процессов Метрополиса.

Пусть дано d -мерное распределение $\tilde{\pi}(\cdot)$ на $\mathcal{X} = \mathcal{Y}^d$. Зададим оператор перехода P_i , который оставляет все компоненты, кроме i -й, неизменными, а i -ю заменяет компонентой соответствующей переходу по алгоритму Метрополиса для условного распределения с фиксированными компонентами $\{1, 2, \dots, i-1, i+1, \dots, d\}$. Тогда цепь Маркова с оператором перехода

$$P = P_1 P_2 \cdots P_d$$

будет иметь d -мерное стационарное распределение $\tilde{\pi}(\cdot)$. Также можно использовать алгоритм равновероятного случайного выбора:

$$P = \frac{1}{d} (P_1 + P_2 + \cdots + P_d).$$

Одним из свойств цепей Маркова, характеризующих их сходимость, является геометрическая эргодичность [3].

Цепь Маркова со стационарным распределением $\tilde{\pi}(\cdot)$ называется *геометрически эргодичной*, если

$$\|P^n(x, \cdot) - \pi(\cdot)\| \leq M(x)\rho^n, \quad n = 1, 2, 3, \dots,$$

для некоторого $\rho < 1$, где $M(x) < \infty$ $\tilde{\pi}$ -п.в. для $x \in \mathcal{X}$.

Для проверки эргодичности цепи используется условие дрейфа [3], [4].

Множество C называется *малым*, если существует целое положительное число n , $\varepsilon > 0$ и вероятностная мера $\nu(\cdot)$ такие, что

$$P^n(x, \cdot) \geq \varepsilon \nu(\cdot) \quad x \in C.$$

Цепь Маркова *удовлетворяет условию дрейфа* в направлении множества C , если существуют константы $0 < \lambda < 1$ и $b < \infty$, а также функция $V: \mathcal{X} \rightarrow [1, \infty]$ такие, что

$$PV \leq \lambda V + b \mathbf{1}_C. \quad (1)$$

В работе [4] приводится следующее важное утверждение.

ТЕОРЕМА 1. *Если φ -неприводимая аperiodическая цепь Маркова со стационарным распределением $\pi(\cdot)$ удовлетворяет условию дрейфа в направлении малого множества C с $V(x) < \infty$ хотя бы для одного x , то эта цепь является геометрически эргодичной.*

В дальнейшем изложении мы используем данный факт. Напомним [3]–[5], что цепь Маркова является φ -неприводимой, если существует мера φ на $\mathcal{X}$ такая, что для любого $A \subseteq \mathcal{X}$, для которого $\varphi(A) > 0$, и для всех $x \in \mathcal{X}$ существует положительное целое $n = n(x, A)$ такое, что $P^n(x, A) > 0$.

2. Алгоритмы типа Метрополиса для большого канонического ансамбля. Рассмотрим термодинамическую систему с переменным числом частиц в ограниченном объеме $\mathbb{V}$ (сюда также относится случай периодических граничных условий). Функция плотности в этом случае имеет вид $\pi = e^{-S}$ (см. [6]), где

$$S = \frac{E - \mu N}{T} + N[\ln(N\Lambda^3) - 1],$$

заданный в пространстве $\mathcal{X} = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}_{N=0}^{\infty}$; T и μ здесь – внешние параметры, $\Lambda = 2\pi\hbar/\sqrt{2mT}$, а E – энергия системы:

$$E = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_i) + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

При изучении таких систем используются два типа переходов: с изменением состояния (например, переносом) и с рождением или уничтожением одной частицы. Обозначим их P_i и $P_{\pm}$ соответственно. Переход P_i соответствует виртуальному выбору нового положения i -й частицы (процесс Q), и его реализации с вероятностью, используемой в алгоритме Метрополиса:

$$\alpha = \min\left(1, \exp\left\{\frac{E - E|_{\mathbf{r}_i=\mathbf{r}_{\text{new}}}}{T}\right\}\right) = \min\left(1, \exp\left\{\frac{E_i - E_i|_{\mathbf{r}_i=\mathbf{r}_{\text{new}}}}{T}\right\}\right),$$

где

$$E_i = U(\mathbf{r}_i) + \sum_{\substack{1 \leq j \leq N \\ j \neq i}} \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|).$$

Такое правило реализует переход в новую точку с вероятностью единица, если энергия системы уменьшается, и с экспоненциально малой вероятностью, если энергия системы увеличивается. Более того, при увеличении температуры строгость этого правила уменьшается.

Переход $P_{\pm} = (P_+ + P_-)/2$ состоит в равновероятном выборе рождения или уничтожения. Для P_+ производится случайный выбор нового положения из объема $\mathbb{V}$ и его принятие с вероятностью

$$\alpha = \min\left(1, \frac{\mathbb{V}}{(N+1)\Lambda^3} \exp\left\{-\frac{E_{\text{new}} - \mu}{T}\right\}\right),$$

где

$$E_{\text{new}} = U(\mathbf{r}_{\text{new}}) + \sum_{i=1}^N \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\text{new}}|).$$

Для P_- равновероятно выбирается одна из N частиц и уничтожается с вероятностью

$$\alpha = \min\left(1, \frac{N\Lambda^3}{\mathbb{V}} \exp\left\{\frac{E_{\text{del}} - \mu}{T}\right\}\right),$$

где

$$E_{\text{del}} = U(\mathbf{r}_{\text{del}}) + \sum_{\substack{1 \leq i \leq N \\ i \neq i_{\text{del}}}} \varphi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{\text{del}}|).$$

Эти переходы тем или иным образом комбинируются. В качестве примера можно предложить случайный выбор между типами переходов:

$$P = q \frac{P_+ + P_-}{2} + (1 - q) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P_i,$$

где N – количество частиц перед началом перехода; или одно изменение числа с последующим перемещением n случайно выбранных частиц:

$$P = \frac{P_+ + P_-}{2} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N P_i \right]^n,$$

где N – количество частиц после изменения числа.

Наложим следующие ограничения на потенциалы:

- 1) потенциальная энергия частиц во внешнем поле ограничена снизу (в данном случае без ограничения общности будем считать ее неотрицательной, $U(\mathbf{r}) \geq 0$);
- 2) энергия парных взаимодействий удовлетворяет условию $\varphi(r) \geq \varphi_0 + Cr^{-\gamma}$, где $\varphi_0 < 0$, $C > 0$ и $\gamma > 3$.

В этом случае ниже мы установим геометрическую эргодичность алгоритма. Для начала докажем следующую лемму.

ЛЕММА 1. Если $P(x, \cdot)$ – вероятность перехода для процесса типа Метрополиса с ненормированной плотностью π и затравочной переходной вероятностью $Q(x, \cdot)$, $V = \pi^{-\alpha}$, где $0 < \alpha < 1$, то справедливы оценки

$$\int P(x, dy) V(y) \leq V(x) \int Q(x, dy) \frac{\pi(x)^\alpha}{\pi(y)^\alpha}, \quad (2)$$

$$\int P(x, dy) V(y) \leq V(x) [1 + \alpha(1 - \alpha)^{1/\alpha - 1}]. \quad (3)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. В силу сделанных предположений

$$\begin{aligned} \int P(x, dy) V(y) &= \int_{\pi(y) \geq \pi(x)} Q(x, dy) V(y) + \int_{\pi(y) < \pi(x)} Q(x, dy) \frac{\pi(y)}{\pi(x)} V(y) \\ &\quad + V(x) \int_{\pi(y) < \pi(x)} Q(x, dy) \left(1 - \frac{\pi(y)}{\pi(x)}\right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= V(x) \int_{\pi(y) \geq \pi(x)} Q(x, dy) \frac{\pi(x)^\alpha}{\pi(y)^\alpha} + V(x) \int_{\pi(y) < \pi(x)} Q(x, dy) \frac{\pi(y)^{1-\alpha}}{\pi(x)^{1-\alpha}} \\
&\quad + V(x) \int_{\pi(y) < \pi(x)} Q(x, dy) \left(1 - \frac{\pi(y)}{\pi(x)}\right) \\
&= V(x) \int Q(x, dy) F\left(\frac{\pi(y)}{\pi(x)}\right),
\end{aligned}$$

где

$$F(w) = \begin{cases} 1 + w^{1-\alpha} - w, & \text{если } w < 1, \\ w^{-\alpha}, & \text{если } w \geq 1. \end{cases}$$

Так как при всех $w \in (0, 1]$ имеет место следующее неравенство:

$$\frac{d}{dw}[(1 + w^{1-\alpha} - w) - w^{-\alpha}] = (1 - \alpha)w^{-\alpha} + \alpha w^{-1-\alpha} - 1 > 0,$$

то $F(w) \leq w^{-\alpha}$ и оценка (2) справедлива. Найдем максимум функции F . Поскольку

$$\frac{d}{dw}[1 + w^{1-\alpha} - w] = (1 - \alpha)w^{-\alpha} - 1,$$

то $w_{\max} = (1 - \alpha)^{1/\alpha}$ и потому

$$F_{\max} = F[(1 - \alpha)^{1/\alpha}] = 1 + (1 - \alpha)^{1/\alpha-1} - (1 - \alpha)^{1/\alpha} = 1 + \alpha(1 - \alpha)^{1/\alpha-1}.$$

Следовательно, верна и оценка (3).

Для проверки достаточного условия эргодичности из теоремы 1 используем условие дрейфа с $V = \pi^{-\alpha}$ при некотором $0 < \alpha < 1$ в направлении множества состояний с числом частиц не больше, чем N_0 , для достаточно большого N_0 .

Для функций $P_i V$ и $P_+ V$ используем оценку сверху величиной $V[1 + \alpha(1 - \alpha)^{1/\alpha-1}]$, которая выбором α близким к 1 может быть сделана сколь угодно близкой к V . Если при этом $P_- V < \lambda V$ с постоянной $\lambda < 1$, не зависящей от α , то подходящим выбором α можно удовлетворить условию дрейфа (1) в случае, если на каждый переход, соответствующий оператору $P_\pm$, приходится ограниченное сверху количество переходов, соответствующих P_i .

Перейдем к рассмотрению процесса P_- – процесса уничтожения частиц. Назовем “обособленными” те частицы, энергия E_i которых меньше некоторого E_0 . Конкретное значение E_i выберем позже. Согласно предположениям

$$E_i \geq (N - 1)\varphi_0 + C|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|^{-\gamma} \quad \forall j \neq i,$$

поэтому расстояние от “обособленной” частицы до любой другой больше, чем

$$R = \left[\frac{C}{E_0 - (N - 1)\varphi_0} \right]^{1/\gamma}.$$

Поскольку полный объем $\mathbb{V}$ ограничен, то количество обособленных частиц меньше, чем

$$\frac{\mathbb{V}}{\pi R^3/6} = \frac{6\mathbb{V}}{\pi} \left[\frac{E_0 - (N - 1)\varphi_0}{C} \right]^{3/\gamma} < \frac{6\mathbb{V}}{\pi} \left[\frac{E_0 - (N_0 - 1)\varphi_0}{C} \right]^{3/\gamma} \equiv N_{\text{sol}}$$

при $N > N_0$. Теперь можно сделать следующую оценку:

$$\begin{aligned} P_- V &\leq \frac{N_{\text{sol}}}{N} [1 + \alpha(1 - \alpha)^{1/\alpha - 1}] V + \frac{N - N_{\text{sol}}}{N} \left[\frac{N \Lambda^3}{\mathbb{V}} \exp \left\{ \frac{E_0 - \mu}{T} \right\} \right]^{-\alpha} V \\ &< \frac{N_{\text{sol}}}{N_0} [1 + \alpha(1 - \alpha)^{1/\alpha - 1}] V + \left[\frac{N_0 \Lambda^3}{\mathbb{V}} \exp \left\{ \frac{E_0 - \mu}{T} \right\} \right]^{-\alpha} V. \end{aligned}$$

Если $\gamma > 3$, то N_{sol} растет медленнее, чем N_0 , и выбором N_0 первое слагаемое можно сделать сколь угодно малым. Аналогично, при любом α выбором E_0 можно сделать малым второе слагаемое.

Таким образом, доказана следующая

ТЕОРЕМА 2. *Марковский процесс, построенный из операторов P_i и $P_{\pm}$, в котором на каждый оператор $P_{\pm}$ приходится ограниченное сверху количество операторов P_i , геометрически эргодичен.*

3. Выводы. Из геометрической эргодичности цепи Маркова следует справедливость теорем типа ЦПТ для выборочных средних от наблюдаемых с конечным $(2 + \delta)$ -м моментом ($\delta > 0$), что обосновывает использование таких алгоритмов при численном моделировании систем описанного класса.

СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] W. K. Hastings, "Monte-Carlo sampling methods using Markov chains and their applications", *Biometrika*, **57**:1 (1970), 97–109.
- [2] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, "Equations of state calculations by fast computing machines", *J. Chem. Phys.*, **21**:6 (1953), 1087–1092.
- [3] S. P. Meyn, R. L. Tweedie, *Markov chains and stochastic stability*, Communications and Control Engineering Series, Springer-Verlag, London, 1993.
- [4] G. O. Roberts, J. S. Rosenthal, *General state space Markov chains and MCMC algorithms*, [arXiv: math/0404033](https://arxiv.org/abs/math/0404033).
- [5] K. L. Mengersen, R. L. Tweedie, "Rates of convergence of the Hastings and Metropolis algorithms", *Ann. Statist.*, **24**:1 (1996), 101–121.
- [6] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, т. 5: Статистическая физика, Наука, М., 1964.

Н. П. Вабищевич

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова
E-mail: npvab@list.ru

Поступило

12.03.2007