Cadenas de Markov

Para más información, ver el capítulo 11 del libro de Grinstead y Snell.

- Sistema que en una serie de pasos va cambiando de estado de forma aleatoria $\rightarrow$ experimenta un *proceso aleatorio*.

- *Cadena de Markov*: proceso aleatorio tal que

$$P(s_n, n|s_{n-1}, n-1; s_{n-2}, n-2; \dots) = P(s_n, n|s_{n-1}, n-1). \tag{1}$$

  Es decir, si conocemos el estado del sistema en el paso $n-1$, conocer toda la historia previa no altera las probabilidades para el paso n.

- Cadena de Markov es *homogénea* si $P(s, n|s', n-1)$ es independiente de n. A partir de ahora nos restringimos a este caso y escribimos esta probabilidad condicionada como $P(s|s')$.

- En general, la probabilidad de cada estado depende del tiempo. Si $P_n(s)$ es la probabilidad del estado s en el paso n,

$$P_{n+1}(s) = \sum_{s'} P(s, n+1; s', n) = \sum_{s'} P(s|s')P_n(s'). \tag{2}$$

  Una distribución de probabilidad π sobre los distintos estados posibles del sistema es *estacionaria* si la condición $P_n = \pi$ implica $P_{n+1} = \pi$.

- Cadena de Markov es *regular* si existe un n tal que es posible pasar de cualquier estado a cualquier estado en exactamente n pasos.

- Dos teoremas sobre cadenas regulares:

  Teorema 1. *Para una cadena de Markov regular, existe una única distribución estacionaria.*

  Teorema 2. *Para una cadena de Markov regular,* $\lim_{n\to\infty} P_n = \pi$*, donde* π *es la distribución estacionaria.*

- Cadena de Markov cumple la *condición de balance detallado* si existe una distribución π tal que

$$P(s|s')\pi(s') = P(s'|s)\pi(s). \tag{3}$$

  En ese caso, la distribución π es estacionaria: si $P_n = \pi$ entonces

$$\begin{aligned} P_{n+1}(s) &= \sum_{s'} P(s|s')\pi(s') = \sum_{s'} P(s'|s)\pi(s) = \pi(s) \sum_{s'} P(s'|s) \\ &= \pi(s). \end{aligned} \tag{4}$$

  Por lo tanto, *si una cadena de Markov regular cumple balance detallado con una distribución* π*, entonces asintóticamente las probabilidades convergen a* π.

Metropolis

El algoritmo de Metropolis genera una cadena de Markov regular y que cumple balance detallado con $\pi(s) = e^{-\beta E(s)}/Z$. Por lo tanto, las probabilidades convergen al ensamble canónico.

Para ver lo del balance detallado, notemos primero que la condición (3) se cumple trivialmente si $s = s'$, así que nos podemos concentrar en el caso $s \neq s'$. Notemos también que $P(s'|s) = 0$ si s' tiene más de un spin dado vuelta respecto a s, y $P(s'|s) \neq 0$ si s' tiene un solo spin dado vuelta respecto a s. En el primer caso la condición de balance detallado se cumple trivialmente porque ambos lados de la igualdad son 0; en el segundo caso las dos probabilidades condicionadas son distintas de cero, así que podemos calcular su ratio. Si $a(s', s)$ es la probabilidad de aceptación de s' partiendo de s y $\Delta E = E(s') - E(s)$, tenemos

$$\frac{P(s'|s)}{P(s|s')} = \frac{a(s', s)/N}{a(s, s')/N} = \left.\begin{cases} e^{-\beta\Delta E} & \Delta E \geq 0 \\ e^{-\beta\Delta E} & \Delta E < 0 \end{cases}\right\} = \frac{\pi(s')}{\pi(s)}, \tag{5}$$

y por lo tanto se cumple balance detallado con el ensamble canónico.