Ա. Ի. ԱԼԻԽԱՆՅԱՆԻ ԱՆՎԱՆ ԱԶԳԱՅԻՆ ԳԻՏԱԿԱՆ ԼԱԲՈՐԱՏՈՐԻԱ
(ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ)

Մարտիրոսյան Նարեկ Հենրիկի

ՄԱՐԿՈՎՅԱՆ ՊՐՈՑԵՍՆԵՐԸ ԹԵՐՄՈԴԻՆԱՄԻԿԱՅՈՒՄ ԵՎ ՍՏԱՏԻՍՏԻԿԱՅՈՒՄ

Ա.04.02 - « Տեսական ֆիզիկա » մասնագիտությամբ ֆիզիկամաթեմատիկական գիտությունների թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման ատենախոսության

ՍԵՂՄԱԳԻՐ

ԵՐԵՎԱՆ – 2017

НАЦИОНАЛЬНАЯ НАУЧНАЯ ЛАБОРАТОРИЯ ИМ. А.И. АЛИХАНЯНА
(ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ)

Мартиросян Нарек Генрикович

МАРКОВСКИЕ ПРОЦЕССЫ В ТЕРМОДИНАМИКЕ И СТАТИСТИКЕ

АВТОРЕФЕРАТ

Диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – “Теоретическая физика”.

ЕРЕВАН - 2017

Ատենախոսության թեման հաստատվել է Ա. Ի. Ալիխանյանի անվան Ազգային Գիտական Լաբորատորիայի (ԵրՖի) գիտական խորհուրդում:
Գիտական ղեկավար՝

Ֆիզ.-մաթ գիտ. դոկտոր Ն. Զ. Ակոպով (ԱԱԳԼ)

Պաշտոնական ընդդիմախոսներ՝

Ֆիզ.-մաթ գիտ. դոկտոր Ն. Ս. Անանիկյան (ԱԱԳԼ)
Ֆիզ.-մաթ գիտ. թեկնածու Փ. Մ. Հակոբյան (ՀՀ ԳԱԱ ԻԱՊԻ)

Առաջատար կազմակերպություն՝ Երևանի պետական համալսարան
Պաշտպանությունը կայանալու է 2017թ. հունիսի 2-ին, ժամը 14^{00}-ին ԱԱԳԼ-ի «Միջուկի և տարրական մասնիկների ֆիզիկա» 024 մասնագիտական խորհրդում (Երևան - 0036, Ալիխանյան եղբյարների փ. 2):
Ատենախոսությանը կարելի է ծանոթանալ ԱԱԳԼ-ի գրադարանում:

Սեղմագիրն առաքված է 2017թ. մայիսի 2-ին

Մասնագիտական խորհրդի գիտական քարտուղար

Ֆիզ.-մաթ գիտ. դոկտոր Դ. Կարախանյան

Тема диссертации утверждена ученым советом Национальной Научной Лаборатории имени А. И. Алиханяна (ЕрФИ)
Научный руководитель:
доктор физ.-мат. наук Н. З. Акопов (ННЛА)

Официальные оппоненты:
доктор физ.-мат. наук Н.С. Ананикян (ННЛА)
кандидат физ.-мат. наук П.М. Акопян (ИПИА НАН РА)
Ведущая организация: Ереванский государственный университет
Защита состоится 2–го июня, 2017 г. в 14 часов на заседании специализированного совета ВАК 024 ”Физика ядра и элементарных частиц” Национальной научной лаборатории им. А.И.Алиханяна (Ереван-0036, ул. Братьев Алиханян 2)
С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ННЛА
Автореферат разослан 2-го мая 2017 г.
Ученый секретарь спец. Совета

доктор физ.-мат. наук Д.Р. Караханян

Աշխատանքի ընդհանուր բնութագիրը

Բազմաթիվ համակարգեր բնութագրվում են Մարկովյան հատկությամբ՝ համակարգի ապագա վիճակների հավանականությունը կախված է ներկա վիճակից և անկախ է անցյալ վիճակների պատմությունից՝ ապագան կախված է ներկայից և անկախ է անցյալից: Սա նաև կոչվում է հիշողության բացակայության հատկություն: Մարկովյան պրոցեսները (ռուս մաթեմատիկոս Անդրեյ Մարկովի անունով) հանդիսանում են պատահական պրոցեսների առավել կարևոր բաժինը և ունեն բազմաթիվ կիրառություններ: Այսպիսի տարածվածության ներքին պատճառն այն է, որ գրեթե ցանկացած (սահուն և վերջավոր հիշողությամբ) պատահական պրոցես կարելի է ներակայացնել որպես Մարկովի պրոցես կամ նրա ենթամաս:

Աշխատանքը նվիրված է Մարկովյան դինամիկայով նկարագրվող փոքր մասշտաբներում աշխատող թերմոդինամիկական համակարգերի համար տեսական մոդելների ուսումնասիրությանը, ինչպես նաև Մարկովյան պրոցեսի կիրառությանը ստատիստիկայում: Մասնավորապես՝ ուսումնասիրվել է Մարկովյան շղթայի վրա հիմնված Մետրոպոլիս-Հաստինգս ալգորիթմի բաղկացուցիչ մաս կազմող հավասարաչափ պսևդո-պատահական թվերի գեներատորների (ՊՊԹԳ) ստատիստիկական հատկությունները, համեմատվել են Mersenne Twister-ի և MIXMAX-ի ստատիստիկական հատկությունները:

Թեմայի արդիականությունը

Շատ երևույթներ կարող են նկարագրվել դետերմինիստիկ պրոցեսներով, երբ համակարգի ժամանակային զարգացման մեջ պատահականություն չկա, այսինքն՝ նույն սկզբնական պայմանները միշտ տալիս են նույն վերջնական արդյունքները: Ի տարբերություն դետերմինիստիկ մոտեցման, ստոխաստիկ (պատահական) պրոցեսների դեպքում ժամանակի ցանկացած պահին համակարգը նկարագրող մեծությունները ունեն հավանականային բաշխում, այսինքն՝ նույն սկզբնական պայմաններով համակարգը կարող է ունենալ տարբեր վերջնական վիճակներ:

Ստոխաստիկ պրոցեսներում թե՛ ժամանակը, թե՛ համակարգի վիճակների բազմությունները կարող են լինել անընդհատ կամ դիսկրետ: Այս թեզում դիտարկվում է անընդհատ ժամանակով, դիսկրետ վիճակների բազմությամբ Մարկովյան համակարգեր: Այսպիսի համակարգի ամենահայտնի օրինակն է Բրոունյան շարժումը: Բրոունյան շարժման տեսական ուսումնասիրությունները, որոնք կատարվել են Այնշտայնի, Սմոլուխովսկու և Լանժևինի կողմից, էականորեն նպաստեցին ստոխաստիկ պրոցեսների (այդ թվում Մարկովյան) տեսության առաջացմանը և զարգացմանը:

Մարկովյան պրոցեսների կիրառությունների տիրույթը ներառում է Ինտերնետը, ֆիզիկան, մոլեկուլյար կենսաբանությունը, քիմիան, գենետիկան և այլն: Որպես ինտերնետային կիրառություն՝ կարելի է նշել Google-ի կողմից օգտագործվող PageRank (Google-ի հիմնադիրներից մեկի՝ Լարի Փեյջի անունով) ալգորիթմը, որով վեբ-էջերը դասակարգվում են ըստ իրենց կարևորության: Քիմիայում՝ Մարկովյան պրոցեսներով մոդելավորվող ռեակցիաները հանդիսանում են կիրառության մեկ այլ օրինակ:

Ֆիզիկայում Մարկովյան համակարգերը տարածված են ոչ հավասարակշիռ թերմոդինամիկայում: Չնայած նրան, որ հավասարակշիռ թերմոդինամիկան լավ հաստատված գիտություն է, այնուամենայնիվ, բնության մեջ գրեթե բոլոր համակարգերը բաց են և նկարագրվում են ոչ-հավասարակշիռ պրոցեսներով, օրինակ՝ կենսաբանական համակարգերը գոյատևում են էներգիայի, նյութի, ինֆորմացիայի անընդհատ հոսքի միջոցով: Եթե մեծ համակարգերը կարելի է նկարագրել դետերմինիստիկ հավասարումներով (ինչպես օրինակ արվում է սովորական, մակրոսկոպիկ թերմոդինամիկայում), ապա փոքր համակարգերի համար ֆլուկտուացիաները էական են և պարտադիր է ստոխաստիկ նկարագրումը: Կենսաֆիզիկայում ստոխաստիկ նկարագումը անհրաժեշտ է արդեն միկրոնային չափերից սկսած: Որպես կենսաբանական կիրառություն՝ կարելի է նշել կենսաբանական մակրոմոլեկուլների կոնֆորմացիոն դինամիկան, իոնային անցուղու բացման և փակման պրոցեսները, համաճարակային պրոցեսները և այլն: Կան նաև ֆիզիկական համակարգեր (օրինակ տուրբուլենտությունը, որը նույնպես նկարագրվում է Մարկովի պրոցեսներով), որտեղ հավանականային մոտեցումը պարտադիր է նույնիսկ մետրերի կամ կիլոմետրերի կարգի չափերի համար:

Մարկովյան պրոցեսների ժամանակ կարևոր է իմանալ մի վիճակից մյուսին անցման հավանականությունները: Երբ անցման հավանականությունները ժամանակից անկախ են, ապա ըստ Պերոն-Ֆրոբենյուսի թեորեմի համակարգը երկար ժամանակ հետո մտնում է ստացիոնար վիճակ, որը բնութագրվում է ժամանակից անկախ վիճակի հավանականություններով:

Ստացիոնար վիճակը կարելի է ընդհանրացնել, երբ Մարկովյան համակարգը գտնվում է արտաքին պարբերական դաշտում, ուստի անցման հավանականությունները ևս դառնում են պարբերական: Ըստ Ֆլոկեի թեորեմի՝ այսպիսի համակարգը մտնում է պարբերական ռեժիմ, որտեղ վիճակների հավանականությունները դառնում են պարբերական ֆունկցիաներ արտաքին դաշտի պարբերությամբ:

Երկու դեպքում էլ՝ թե՛ ստացիոնար, թե՛ պարբերական ռեժիմով տրվող Մարկովյան մոդելները հանդիսանում են մոլեկուլյար (այսինքն՝ փոքր) համակարգերի նկարագրման հիմնական մեխանիզմը և թույլ են տալիս հավասարակշիռ թերմոդինամիկական գաղափարները կիրառել ոչ հավասարակշիռ իրավիճակների համար:

Մոլեկուլյար մեքենաները վերջերս դարձել են շատ արդիական: Պատահական չէ, որ 2016 թվականին Սավաժը, Սթոդարթը և Ֆերինգան ստացան Նոբելյան մրցանակ՝ մոլեկուլյար մեքենաների սինթեզի համար: Ստոխաստիկ թերմոդինամիկան, ի դեմս Մարկովյան պրոցեսների, հանդիսանում է նկարագրման այն հիմնական եղանակը, որը թույլ է տալիս հասկանալ ու կանխագուշակել մոլեկուլյար մեքենաների աշխատանքը:

Մարկովյան պրոցեսները նաև օգտագործվում են ստատիստիկայում՝ բարդ բաշխման ֆունկցիաներով պատահական թվեր գեներացնելու համար: Մետրոպոլիս-Հաստինգս ալգորիթմը, որը ներմուծվել է Մետրոպոլիսի (1953) և ընդհանրացվել Հաստինգսի կողմից (1970), հնարավոր վիճակների բազմության վրա կառուցում է այնպիսի Մարկովի շղթա, որի ստացիոնար (տե՛ս Պերոն-Ֆրոբենիուսի թեորեմը) բաշխվածությամբ հետաքրքրված ենք: Այս ալգորիթմը համարվում է լավագույն տասը ալգորիթմերից մեկը և ունի բազմաթիվ կիրառություններ: Նախ և առաջ՝ այն օգտագործվում է Մոնտե-Կարլո մեթոդներով բազմաչափ ինտեգրալներ հաշվելու համար: Բազմաչափ ինտեգրալները հանդիպում են ամենուր, մասնավորապես՝ թե հավասարակշիռ, թե՛ անհավասարակշիռ վիճակագրական ֆիզիկայում անհրաժեշտ է հաշվել ֆիզիկական մեծությունների միջինները՝ ինտեգրելով բազմաչափ ու մեծ վիճակների բազմությամբ: Մետրոպոլիս-Հաստինգս ալգորիթմը օգտագործվում է նաև օպտիմիզացիոն խնդիրներում (օրինակ՝ ֆունկցիայի մաքսիմալիզացման/մինիմալիզացման համար), կրիպտոգրաֆիկ ալգորիթմների ապագաղտնագրման համար և այլն:

Այս ալգորիթմում առանցքային դեր են կատարում հավասարաչափ պսևդո-պատահական թվերի գեներատորները, ուստի ունենալ լավ ստատիստիկական հատկություններով գեներատորներ հանդիսանում է կարևորագույն խնդիր: Պատահական թվերի գեներատորները կարևոր են ոչ միայն Մետրոպոլիս-Հաստինգս ալգորիթմի շրջանակներում, այլ նաև ցանկացած տեսակի Մոնտե Կարլո մեթոդներում:

Աշխատանքի նպատակը

- Ապացուցել No-pumping (NP) թեորեմը այսպես կոչված Destination $\rho_{i\leftarrow j}(t) = e^{-\beta E_i(t)}$ տիպի անցման հավանականությունների համար, որոնք հանդիպում են մի շարք կիրառություններում և դուրս են բերվում ավելի ընդհանուր կինետիկ հավասարումներից: Սովորական NP թեորեմը ցույց է տալիս, որ արտաքին պարբերական դաշտում գտնվող, դետալ բալանս պայմանին բավարարող Մարկովյան համակարգերում վիճակների միջև միջին հավանականային հոսանքները զրոյանում են, եթե անցման հավանականությունները ունեն Արհենիուսի տեսքը. $\rho_{i\leftarrow j}(t) = e^{B_{ij}+\beta E_j(t)}$, որտեղ B_{ij}-ը ժամանակից անկախ բարիերներն են: Սակայն մի շարք դեպքերում այդ բարիերները չեն կարող մնալ ժամանակից անկախ: Կարևոր է հասկանալ թե ինչ է տեղի ունենում ավելի ընդհանուր անցման հավանականությունների համար:

- Ուսումնասիրել ժամանակային տարանջատման մեխանիզմով պայմանավորված, երկու տարբեր թերմոստատերի հետ փոխազդող Մարկովյան համակարգի թերմոդինամիկան: Բացահայտել հավասարակշիռ թերմոդինամիկական մեծությունների վարքը նշված ոչ հավասարակշիռ իրավիճակում, մասնավորապես՝ ուսումնասիրել ազատ էներգիայի վարքը կախված ջերմաստիճանից:
- Ստեղծել Մարկովյան դինամիկայով նկարագրվող ջերմային մեքենայի տեսական նոր մոդել, որը աշխատում է առանց արտաքին կառավարման, այսինք այդ մեքենաները ինքնակառավարվող են և կարող են հարմարվել միջավայրի անընդհատ փոփոխություններին:
- Ուսումնասիրել MIXMAX պսևդո-պատահական թվերի գեներատորի ստատիստիկական, ինչպես նաև այլ հատկությունները և համեմատել ներկայումս ամենահայտնի և ամենատարածված պսևոդո-պատահական թվերի գեներատորի ՝ Mersene Twister-ի հետ:
- Ուսումնասիրել տարածության դիսկրետացման հիման վրա աշխատող քիչ ժամանակատար և հիշողություն պահանջող ալգորիթմ, որը հնարավորություն կտա հաշվելու Կոլմոգորով-Սմիրնով (Կ-Ս) թեստի արժեքը բարձր չափողականությամբ տարածություններում:

<u>Կիրառական նշանակությունը</u>

NP թեորեմի մոտիվացիան գալիս է կատենան (catenane) մոլեկուլային համակարգերի վրա կատարված էքսպերիմենտներից: Կատենանները իրենցից ներկայացնում են երկու կամ ավելի իրար հագցրած օղակաձև մոլեկուլների համակարգեր (տե՛ս Նկար 1), որոնք իրար հետ կապված են ոչ թե կովալենտ, այլ ավելի թույլ մեխանիկական (օրինակ՝ իոնային) կապերով: Սա թույլ է տալիս օղակներին շարժվել մեկը մյուսի նկատմամբ: Կատենանները և նմանատիպ այլ մոլեկուլային համակարգերը պատկանում են այսպես կոչված «mechanically interlocked molecular architectures» (MIMA)-ի դասին, որոնք հանդիսանում են մոլեկուլյար մեքենաների առանցքային բաղադրիչները: Քիմիայի բնագավառում 2016 թ. Նոբելյան մրցանակը շնորհվեց հենց այս ոլորտում կատարված աշխատանքների համար, որոնք սկսվել էին դեռևս 1983 թ.: Այսպիսով, 2003 թ. էքսպերիմենտում ցույց է տրվել որ պարբերական ձևով փոփոխելով արտաքին պայմանները (լազեր, ջերմաստիճանային գրադիենտ)՝ օղակներից փոքրը մեծի երկայնքով կարող է պտտվել միջինում մեկ ուղղությամբ, ուստի կարող է աշխատել որպես մոլեկուլային մեքենա: 2008 թ.-ից առ այսօր շարունակվում է նմանատիպ համակարգերի տեսական մոդելների ուսումնասիրությունը NP թեորեմի շրջանակներում, որտեղ հավանականային հոսանքները բնութագրում են մոլեկուլների միջին պտույտը: NP հենց նշանակում է, որ գոյություն ունեն այնպիսի արտաքին դաշտեր, երբ միջինում պտույտ չկա:

Ստոխաստիկ ջերմային մեքենաները (ՍՋՄ) հանդիսանում են սովորական ջերմային մեքենաների նմանակները: Ինչպես կատենաններում, այստեղ էլ կարևոր դեր են կատարում ոչ զրոյական հավանականային հոսանքները, քանի որ համակարգի փոքրության պատճառով աշխատանքի քաղումը պայմանավորված է էներգիայի հոսանքների պատահական բնույթով: ՍՋՄ-ներին նվիրված աշխատանքները սկսվել են դեռևս 1900-ական թթ. Բրոունյան արգելանիվների (Brownian ratchet) հետ կապված մտային գիտափորձերում (thought experiments), որտեղ միջավայրի մասնիկների պատահական շարժումները կարող են օգտագործվել աշխատանք քաղելու համար: Ֆեյնմանը (1963) առաջինը ցույց տվեց, որ մեխանիզմը կարող է աշխատել որպես ջերմային մեքենա: Բրոունյան մեքենաները նաև օգտագործվում են բջջում նյութի տեղափոխում իրականացնելու համար: Նանոտեխնոլոգիաները (հատկապես օպտիկական tweezer-ները) այսօր հնարավորություն են տալիս ստեղծել այսպիսի փոքր համակարգեր: Միայն վերջերս հնարավոր դարձավ փորձնականորեն իրականացնել ՍՋՄ-ները:

Մոլեկուլյար մեքենաների (կատենաններ կամ ՍՋՄ-ներ) ստեղծումը մեծ նշանակություն ունի պայմանավորված նրանով, որ այդ մեքենաները կարող են օգտագործել միջավայրում միշտ առկա էներգիայի աղբյուրները օգտակար աշխատանքի վերածելու համար, օրինակ կարող են օգտագործվել միջավայրի ջերմային տատանումները կամ ջերմաստիճանային գրադիենտները:

Մոնտե Կարլո մեթոդները համակարգչային ալգորիթմների լայն դաս են, որոնք օգտագործելով պատահական թվեր, տալիս են բարդ խնդիրների լուծման թվային արդյունքներ: Պսևդո-պատահական թվերի գեներատորները անբաժանելի մասն են կազմում ցանկացած ՄԿ ալգորիթմներում՝ ներառյալ վերոնշյալ Մետրոպոլիս-Հաստինգսի ալգորիթմում: Այս ալգորիթմների (հետևաբար նաև պսևդո-պատահական թվերի գեներատորների) կիրառելիության տիրույթները բազմաթիվ են. դրանք ներառում են հաշվողական կենսաբանությունը, բարձր էներգիաների ֆիզիկան, կիրառական վիճակագրությունը, քվանտային մեխանիկան, արհեստական ինտելեկտը, ֆինանսները և այլն: Աշխատանքում ստատիստիկական թեստերի միջոցով առաջին անգամ ուսումնասիրվել է MIXMAX պատահական թվերի գեներատորի հատկությունները: MIXMAX գեներատորի հետ կապված աշխատանքները սկսվել են դեռևս 1990-ական թթ. և այն կատարելագործվել է հետագայում: Աշխատանքներում MIXMAX-ի համար ստացվել են շատ լավ արդյունքներ, որը թույլ կտա MIXMAX-ին ընդգրկվելու տարբեր ծրագրային փաթեթներում՝ որպես հիմնական (default) գեներատոր, և օգտագործվել բազմաչափ խնդիրների լուծման համար: Մասնավորապես այն պատրաստվում է դառնալ միջուկային հետազոտությունների եվրոպական կազմակերպության (CERN) կողմից օգտագործվող գիտական գրադարանների հիմնական մասը:

Գիտական նորություն

- NP թեորեմը ապացուցվել է նոր տիպի անցման հավանականությունների համար: Այն բավարար պայմանները, որոնք թույլ են տալիս ճշգրիտ ապացուցել NP թեորեմը, կիրառվում են նաև մոտավոր NP թեորեմ ստանալու համար: Մասնավորապես մոտավոր NP թեորեմը ստացվել է Ֆոկեր-Պլանկ անցման հավանականությունների համար, և ցույց է տրվել, որ թեորեմը տեղի չունի Կրամերսի տիպի անցումների համար:
- Օգտագործելով ժամանակային տարանջատման մեխանիզմը (երբ համակարգի մի մասը ավելի արագ է փոփոխվում՝ համեմատած մնացածի հետ) ցույց է տրվել որ ոչ հավասարակշիռ վիճակներում նս գոյություն ունի ազատ էներգիա: Նախ՝ թե՛ տեսական, թե՛ թվային հաշվարկներով ցույց է տրվել, որ ժամանակային բաժանման մեխանիզմով հաշված հավանականությունները շատ մեծ մոտավորությամբ համապատասխանում են հիմնական (Մաստեր) հավասարման ստացիոնար լուծումներին: Բացահայտվել է, որ ի տարբերություն դասական ազատ էներգիայի՝ նոր գտնված ազատ էներգիան ունի այլ հատկություններ, մասնավորապես՝ ջերմաստիճանից կախված այն աճող ֆունկցիա է, որն էլ իր հերթին բերում է մի շարք հետաքրքիր նոր երևույթների:
- Ներմուծվել է ինքնակառավարվող և միջավայրի փոփոխություններին հարմարվող ջերմային մեքենայի տեսական նոր մոդել, որտեղ կարևոր դեր է կատարում համակարգի ադապտացիայի համար պատասխանատու անընդհատ պարամետրը: Այդ պարամետրի միջոցով համակարգը միշտ կարող է աշխատել ջերմային մեքենայի ռեժիմում անընդհատ փոփոխվող միջավայրում: Այսպիսի համակարգերի ուսումնասիրումը և ստեղծումը ունի էներգախնայողական նպատակ, քանի որ մեքենան կարող է աշխատանք անել միջավայրում միշտ առկա էներգիայի աղբյուրներով:
- Առաջին անգամ MIXMAX-ի համար կատարվել են մանրամասն ստատիստիկական հետազոտություններ և ցույց է տրվել, որ MIXMAX-ը

ոչ միայն չի զիջում, այլ նաև որոշակի հատկություններով գերազանցում է Mersenne Twister-ին, ինչպիսիք են օրինակ գեներատորի պարբերությունը և արագագործությունը:

- ՊՊԹԳ-րի հավասարաչափությունը ստուգելու համար օգտագործվող Կ-Ս թեստի համար մշակվել է նոր մոտեցում, որը հնարավորություն է տալիս բազմաչափ տվյալների դիսկրետավորման (խմբավորման) միջոցով հաշվել Կ-Ս ստատիստիկան բազմաչափ դեպքերում՝ ծախսելով քիչ համակարգչային ռեսուրսներ:

Պաշտպանության ներկայացվող արդյունքները

Պաշտպանության ժամանակ կներկայացվեն NP թեորեմը ոչ-Արհենիուս տիպի անցման հավանականությունների համար, անհավասարակշիռ պրոցեսների համար գտնված ազատ էներգիայի զարմանալի վարքը և դրանից բխող հետաքրքիր արդյունքները, ադապտիվ և ստոխաստիկ ջերմային մեքենայի տեսական մոդելը, MIXMAX պատահական թվերի գեներատորների ստատիստիկական, ինչպես նաև ժամանակային բնութագրերը՝ համեմատած Mersenne Twister-ի հետ, Կ-Ս թեստի նկարագրությունը և դրա ընդհանրացումը դիսկրետավորման (binning) մեթոդով:

Ատենախոսության կառուցվածքը

Աշխատանքը կազմված է ներածությունից, հինգ գլուխներից, վերջաբանից, նկարների ցանկից, հապավումներից և հղումների ցանկից:

Աշխատանքի բովանդակությունը

Ներածության մեջ հակիրճ ներկայացված են ստոխաստիկ (Մարկովյան) պրոցեսների հիմնական բնութագրերը, նրանց առաջացումը և զարգացումը: Հիմնավորված է ոչ-հավասարակշիռ թերմոդինամիկայի արդիականությունը, մասնավորապես՝ բերելով բազմաթիվ անհավասարակշիռ համակարգերի օրինակներ: Ներկայացված են այն մեխանիզմները, որոնք թույլ են տալիս հավասարակշիռ թերմոդինամիկայի գաղափարները օգտագործել ոչ հավասարակշիռ պրոցեսներում: Մանրամասն խոսվում է ժամանակային տարանջատման մեխանիզմի մասին: Հատուկ ուշադրություն է դարձվում ոչ հավասարակշիռ ստացիոնար վիճակներին՝ բերելով իրական համակարգերի մի շարք օրինակներ: Աշխատանքում բացի NP թեորեմի շրջանակներում դիտարկվող համակարգից, մնացած դիտարկվող համակարգերը գտնվում են հավասարակշիռ կամ անհավասարակշիռ ստացիոնար վիճակներում: Վերջինս բնութագրվում է ոչ զրոյական հավանականային հոսանքներով: Նշվում է, որ հավանականային հոսանքները ստոխաստիկ համակարգերի հիմնական բնութագրիչներն են, մասնավորապես՝ NP թեորեմը հենց վերաբերվում է այն պայմանների ուսումնասիրությանը, որոնք տանում են զրոյական հավանականային հոսանքներին: Հիմնավորվում է NP թեորեմի արդիականությունը՝ բերելով նաև էքսպերիմենտալ տվյալներ: Ներկայացված են ստոխաստիկ ջերմային մեքենաների զարգացման պատմությունը, նրանց արդիականությունը և հիմնական դրույթները: Հիմնավորված է մեր առաջարկած մոդելի գաղափարի բացառիկ լինելը: Խոսվում է Մետրոպոլիս-Հաստինգս ալգորիթմի մասին և դրանցում հանդես եկող պատահական թվերի գեներատորների կարևորության մասին: Նկարագրվում են ստատիստիկական թեստերի միջոցով այդ գեներատորների բնութագրումը և այլն: Հատուկ ուշադրություն է դարձվում Կ-Ս թեստին և նկարագրվում է նրա ընդհանրացումը տվյալների դիսկրետավորման միջոցով:

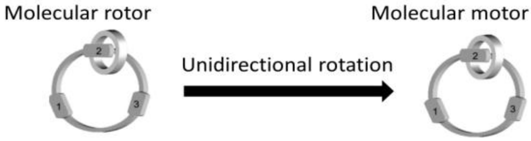
Առաջին գլուխը նվիրված է պարբերական դաշտերում գտնվող մոլեկուլյար համակարգերի տեսական ուսումնասիրությանը Մարկովյան պրոցեսների միջոցով: Համակարգը բնութագրվում է Մաստեր հավասարմամբ.

$$\dot{p}_i = \sum_j [\rho_{ij}(t)p_j - \rho_{ji}(t)p_i] = \sum_j J_{ij}(t),$$

որտեղ $p_i(t)$-ն հավանականությունն է, որ համակարգը ժամանակի t պահին կգտնվի i վիճակում, $\rho_{ij}(t)$-ն անցման հավանականությունն է, իսկ $J_{ij}(t)$-ն $j \to i$ անցման հավանականային հոսանքն է t պահին: Երբ Մարկովյան համակարգը գտնվում է արտաքին պարբերական դաշտում, ապա անցման հավանականությունները ևս դառնում են պարբերական ֆունկցիաներ՝ շնորհիվ այն բանի, որ անցման հավանականությունների մեջ մտնող էներգիաներն են դառնում պարբերական: Ֆլոկեի թեորեմը պնդում է, որ երկար ժամանակից հետո համակարգը մտնում է պարբերական (Ֆլոկեի) ռեժիմ, որը բնութագրվում է պարբերական հավանականություններով.

$$p_i(t) = p_i(t + \tau),$$

որտեղ τ-ն արտաքին դաշտի պարբերությունն է:



Նկար 1. Կատենանները բաղկացած են իրար մեջ մտած օղակաձև մոլեկուլներից: Կատենանները մոլեկուլյար ռոտորից դառնում են մոլեկուլյար մեքենա, երբ փոքր օղակը մեծի շուրջ պտտվում է միջինում մեկ ուղղությամբ:

Ֆլոկեի թեորեմը հիմք է հանդիսանում ուսումնասիրելու միջին հավանականային հոսանքները.

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\tau} \int_{a}^{a+\tau} J_{ij}(t) dt$$

Ոչ զրոյական հավանականային հոսանքները նշանակում են, որ միջինում մեկ ուղղությամբ էներգիայի, նյութի կամ ինֆորմացիայի տեղափոխում կա: Մասնավորապես՝ կատենաններում ոչ 0-ական հոսանք նշանակում է փոքր օղակի պտույտ մեծի շուրջ, տե՛ս Նկար 1: Կատենանների տեսական նկարագրությունը կարելի է տալ NP թեորեմով. $\Phi_{ij} = 0$, եթե վիճակների միջև անցումները տրվում են Արհենիուս տիպի հավականություններով.

$$\rho_{ij}(t) = e^{B_{ij} + \beta E_j(t)},$$

որտեղ B_{ij}-ն i, j վիճակների միջև բարիերն է: NP թեորեմը ապացուցվել է այն դեպքի համար, երբ բարիերները ժամանակից անկախ են, սակայն կան դեպքեր, երբ B_{ij}-ն չի կարող մնալ ժամանակից անկախ: Աշխատանքում NP թեորեմը ապացուցվել է այսպես կոչված Destination տիպի անցումների համար.

$$B_{ij} = -\beta \left[E_j(t) + E_i(t) \right], \quad \rho_{ij}(t) = e^{-\beta E_i(t)}$$

Այս անցման հավանականությունները հետաքրիր են նրանով, որ դրանք դուրս են բերվում ավելի ընդհանուր կինետիկ հավասարումներից և տալիս են Մաստեր հավասարման անալիտիկ լուծումներ.

$$p_i(t) = \int_{-\infty}^{t} du \, e^{\int_t^u Z(s) ds} e^{-\beta E_i(u)}$$

Destination անցման համար NP թեորեմը ապացուցելու համար անհրաժեշտ է դնել արտաքին դաշտերի վրա հետևյալ սիմետրիկ պայմանը.

$$f(t-\gamma) = f(-t-\gamma)$$

Այս պայմանի դասի մեջ են մտնում նաև *Sin* և *Cos* ֆունկցիաները: Վերջապես նշենք, որ գտնված պայմանը հանդիսանում է բավարար պայման այլ տեսակի անցումների համար, մասնավորապես այդ պայմանի դեպքում NP թեորեմը տեղի ունի նաև Ֆոկեր-Պլանկ տիպի անցումների համար.

$$\rho_{ij}(t) = e^{\beta[\,E_j(t)-E_i(t)\,]/2}$$

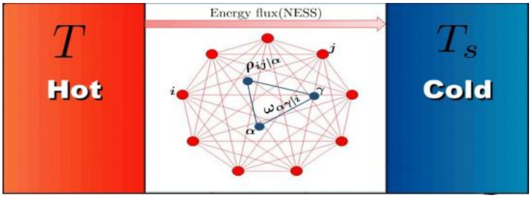
Թվային հաշվարկներով ցույց է տրվել, որ արտաքին դաշտի վերոնշյալ պայմաններով NP թեորեմը տեղի չունի Կրամերսի անցման հավանականությունների համար.

$$\rho_{ij}(t) = e^{-\beta\delta_{ij}+\beta(\,E_j(t)-\max[E_i(t),E_j(t)]\,)}$$

Երկրորդ գլխի նպատակն է ուսումնասիրել երկու տարբեր թերմոստատների հետ փոխազդող Մարկովյան համակարգի թերմոդինամիկան: Այս համակարգը ուսումնասիրելու համար դրվում է երեք պայման.

1. Ժամանակային տարանջատում (time-scale separation). համակարգը բնութագրվում է երկու փոփոխականերով՝ դանդաղ և արագ, այսինքն փոփոխականները փոփոխվում են դանդաղ կամ արագ:
2. Մասնակի կառավարելիություն (partial controllability). արտաքին դաշտերը կարող են ազդել դանդաղ փոփոխականի վրա:
3. Անցման հավանականությունների սահմանափակում. դանդաղ փոփոխվող վիճակների միջև անցումները տրվում են այսպես կոչված Activation տեսքով կամ այդ վիճակները կարելի է ներկայացնել ծառի տեսքով (tree-like topology), երբ ցանկացած վիճակից արմատ հասնելու ճանապարհը միակն է, տե՛ս Նկար 4:

Նկար 2-ում պատկերված է մոդելի նկարը, որտեղ կարմիր ու կապույտ կետերը պատկերում են համապատասխանաբար արագ և դանդաղ փոփոխվող վիճակները: Նշենք, որ արագ փոփոխվող վիճակների միջև անցումները պայմանավորված են տաք թերմոստատով (Hot), իսկ դանդաղինը՝ սառը թերմոստատով (Cold), վերջինս պատկերված է համապատասխանաբար կարմիր և կապույտ գծերով:



Նկար 2. Երկ-ջերմաստիճանային Մարկովյան համակարգ:

Այսպիսի համակարգը տրվում է Մարկովյան պրոցեսները նկարագրող Մաստեր հավասարման միջոցով (2 փոփոխականների համար).

$$\dot{p}_{i\alpha} = \sum\nolimits_j [\rho_{ij|\alpha}\, p_{j\alpha} - \rho_{ji|\alpha}\, p_{i\alpha}] + \epsilon \sum\nolimits_\gamma [\omega_{\alpha\gamma|i}\, p_{i\gamma} - \omega_{\gamma\alpha|i}\, p_{i\alpha}]$$

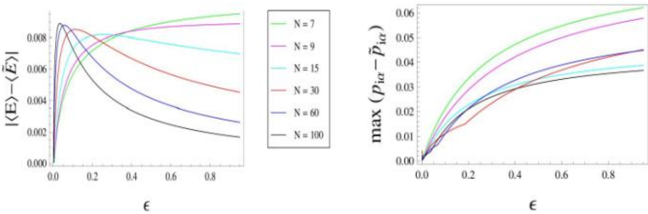
Այս հավասարման մեջ $p_{i\alpha}$-ն միացյալ հավանականությունն է այն բանի, որ համակարգի դանդաղ փոփոխվող մասը կլինի α վիճակում, և արագը՝ i վիճակում: $\rho_{ij|\alpha}$-ն և $\omega_{\alpha\gamma|i}$-ն միավոր ժամանակում անցման հավանականություններն են j-ից i (ֆիքսված α-ի դեպքում) և α-ից γ (ֆիքսված i-ի դեպքում), որոնք բավարարում են դետալ բալանս պայմանին. Համակարգի ճշգրիտ միացյալ հավանականությունները ստացվում են, եթե Մաստեր հավասարումը վերցնենք հավասար զրոյի: Ժամանակային տարանջատումը նշանակում է, որ ε-ը փոքր թիվ է հավասարման մեջ: Տեղադրելով $p_{i\alpha} = p_\alpha p_{i|\alpha}$՝ Մաստեր հավասարումից կարող ենք ստանալ դանդաղ փոփոխականի համար նոր հավասարում (նշենք, որ արագ վիճակները բնութագրող հավասարումը ևս առանձնանում է).

$$\dot{p}_\alpha = \epsilon \sum\nolimits_\gamma [\Omega_{\alpha\gamma}\, p_\gamma - \Omega_{\gamma\alpha}\, p_\alpha], \quad \Omega_{\alpha\gamma} \equiv \sum\nolimits_i \omega_{\alpha\gamma|i}\, p_{i|\gamma}]$$

Ժամանակային տարանջատումը թույլ է տալիս ենթադրել, որ արագ փոփոխվող վիճակները գտնվում են հավասարակշիռ վիճակում, այսինքն՝ հավանականությունները ունեն Բոլցմանի տեսքը: Այսպիսով, մոտավոր ստացիոնար հավանականությունները կստացվեն, եթե վերջին հավասարման մեջ վերցնենք $p_{i|\alpha}$-ի համար Բոլտցմանի տեսքը և լուծենք 0-ի հավասար դեպքը.

$$\bar{p}_{i\alpha} = \bar{p}_{i|\alpha}\bar{p}_\alpha, \;\; \Omega_{\alpha\gamma} \to \bar{\Omega}_{\alpha\gamma} \equiv \sum\nolimits_i \omega_{\alpha\gamma|i}\bar{p}_{i|\gamma}, \quad \bar{p}_{i|\alpha} = e^{-\beta E_{i\alpha}}/Z_\alpha[\beta]$$

β-ն տաք թերմոստատի ջերմաստիճանի հակադարձն է, իսկ $E_{i\alpha}$-ն՝ i և α վիճակների էներգիաներն են:



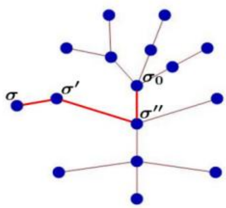
Նկար 3. Աջ մասում մոտավոր և ճշգրիտ հավանականությունների տարբերության մեծագույն արժեքի կախումն է ε-ից, իսկ ձախ մասում՝ այդ հավանականություններով հաշված միջին էներգիաների տարբերություններն են:

Նկար 3-ում պատկերված է մոտավոր և ճշգրիտ հավանականությունների համեմատումը: Նկարից երևում է, որ անգամ ոչ այդքան փոքր ε-ների համար մոտավոր հավանականությունները մեծ ճշտությամբ համընկնում են ճշգրիտ հավանականությունների հետ:

Ժամանակային տարանջատելիությունից կարելի է ապացուցել ազատ էներգիայի գոյությունը այսպիսի ոչ-հավասարակշիռ համակարգերում, երբ դանդաղ փոփոխվող վիճակների միջև անցումները տրվում են այսպես կոչված Activation տիպի հավանականություններով.

$$\omega_{\alpha\gamma|i=e^{\beta_s E_{i\gamma}}} \Rightarrow F = -T_s \ln \sum\nolimits_{\alpha} \mu_\alpha e^{-\beta_s E_\alpha}, \quad \beta_s = 1/T_s$$

Ազատ էներգիայի գոյությունը կարելի է ցույց տալ նաև այն դեպքում, երբ դանդաղ փոփոխվող վիճակները կարելի է պատկերել եզակի ուղիներով (unique path) ծառի տեսքով:



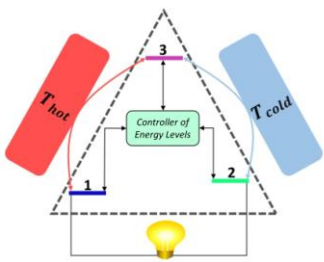
Նկար 4. Եզակի ուղիներով ծառի օրինակ: Կապույտ կետերը պատկերում են դանդաղ փոփոխվող վիճակները (նշանակված են σ-ներով), իսկ գծերը նշանակում են տարբեր վիճակների միջև անցումները: Նկարից երևում է, որ վիճակները միանում են միայն մեկ ուղիով:

Գտնված ազատ էներգիաները ի տարբերություն հավասարակշիռ թերմոդինամիկայում նրանց ունեցած վարքի՝ մասնավորապես, այն ջերմաստիճանից կախված ոչ թե նվազող, այլ աճող ֆունկցիա է: Սա իր հերթին թույլ է տալիս ստանալ Մպեմբա երևույթի (տաք ջուրը կարող է սառել ավելի արագ, քան թե ավելի սառը ջուրը) նման երևույթ. ավելի հեշտ է համակարգի էնտրոպիան նվազեցնել բարձր ջերմաստիճաններում, քան թե ցածր:

$$\partial_T F|_{T_s} \geq 0 \Rightarrow \partial_T \Delta F|_{T_s} = \partial_T \Delta W|_{T_s} = S_1 - S_2 \leq 0$$

Այստեղ F-ը, W-ն և S-ը համապատասխանաբար ազատ էներգիան, աշխատանքը և էնտրոպիան են:

Երրորդ գլուխը նվիրված է ադապտիվ, ինքնակառավարվող ջերմային մեքենաների ուսումնասիրությանը: Ադապտիվ նշանակում է, որ համակարգը կարող է հարմարվել փոփոխվող միջավայրին: Ինքնակառավարվող նշանակում է, որ համակարգի աշխատանքի համար արտաքին (on-line) կառավարում պետք չէ: Վիթխարի նշանակություն ունեցող կենսաֆիզիկական համակարգի օրինակը, որը աշխատում է որպես ադապտիվ ջերմային մեքենա, ֆոտոսինթեզն է, որը տեղի ունի Արեգակի բարձր և երկրագնդի ցածր ջերմաստիճանների միջև: Ֆոտոսինթեզը ունի ադապտիվ հատկություն, քանի որ այն տեղի ունի թե' լուսային, թե' մթնային պայմաններում: Որպես ստոխաստիկ ջերմային մեքենայի առաջին օրինակ՝ կարելի է նշել Ֆեյնմանի (Բրոունյան) արգելանիվը, որոնք կարող են կատարել աշխատանք քաոսային և ասիմետրիկ (օրինակ՝ ջերմաստիճանային կամ քիմիական գրադիենտներով) միջավայրերում: Մոդելը, որը դիտարկվում է այս աշխատանքում, բաղկացած է երեք դիսկրետ վիճակներից և մեկ անընդհատ պարամետրից, որը կոչվում է ֆունկցիոնալ ազատության աստիճան, քանի որ պատասխանատու է ադապտացիայի համար, տե՛ս Նկար 5:



Նկար 5. Ադապտիվ ջերմային մեքենայի սխեմատիկ ներկայացում: 1-3 անցումները պայմանավորված են տաք թերմոստատով, 2-3 անցումները՝ սառը

թերմոստատով, աշխատանքի կատարումը պայմանավորված է 1-2 անցումներով: Էներգիական մակարդակները կառավարող պարամետրը անընդհատ է, քանի որ այն պետք է համակարգը ադապտացնի միջավայրի անընդհատ փոփոխություններին:

Դիսկրետ և անընդհատ ազատության աստիճանների միացյալ հավանականությունները տրվում են Մաստեր + Ֆոկեր-Պլանկ հավասարումով.

$$\dot{p}_i(x,t) = \sum_{j=1}^{3} [\rho_{ij}(x)p_j(x,t) - \rho_{ji}(x)p_i(x,t)]$$
$$+\frac{1}{\gamma}\partial_x[p_i(x,t)E_i'(x)] + D\partial_x^2 p_i(x,t), \quad i=1,2,3,$$

որտեղ γ-ն շփման, իսկ D-ն՝ դիֆուզիայի գործակիցներն են, իսկ $\rho_{ij}(x)$-րը դետալ բալանսին բավարարող անցման հավանականություններն են: Մաստեր + Ֆոկեր-Պլանկ հավասարման ստացիոնար լուծումները բացահայտ տեսքով չեն տրվում, իսկ ադապտացիայի պայմանները գտնելու համար անհրաժեշտ է իմանալ լուծման բացահայտ տեսքերը: Ինչպես երկրորդ գլխում, այստեղ ևս օգտագործվում է ժամանակային տարանջատման մեխանիզմը. x-ը ենթադրվում է ավելի դանդաղ: Դանդաղ (անընդհատ) փոփոխականի ժամանակային էվոլյուցիան առանձնանում է ընդհանուր հավասարումից (երկրորդ գլխում նույնպես դանդաղ փոփոխականը նկարագրող հավասարումը առանձնանում էր), որի ստացիոնար լուծումը ունի հետևյալ տեսքը.

$$p(x) \propto e^{-\Psi(x)/(\gamma D)}, \quad \Psi'(x) \equiv \sum_{i=1}^{3} p_{i|x}E_i'(x)$$

Կարևոր է նշել, որ $p_{i|x}$-ի մեջ անմիջականորեն մտնում են միջավայրի ջերմաստիճանները: Մյուս կողմից ունենք ջերմային մեքենայի ռեժիմում աշխատելու պայմանը.

$$\hat{E}_2(x)[(1-\theta)\hat{E}_3(x) - \hat{E}_2(x)] > 0, \quad \hat{E}_i(x) \equiv \hat{E}_i(x) - E_1(x), \quad \theta \equiv \beta_{hot}/\beta_{cold}.$$

Այսպիսով, ադապտացիան աշխատում է հետևյալ կերպ. երբ միջավայրի ջերմաստիճանները փոխվում են, ապա համակարգը մտնում է այնպիսի վիճակ, որտեղ $\Psi(x)$-ը ունի փոքրագույն արժեք (հետևաբար հավանականությունը՝ մեծագույն), և այդ արժեքի շրջակայքում վերականգնվում է ջերմային աշխատանքի ռեժիմում աշխատելու պայմանը:

Չորրորդ գլուխը նվիրված է ստատիստիկական թեստերի միջոցով պսևդո-պատահական թվերի գեներատորների հատկությունների ուսումնասիրությանը: Պսևդո-պատահական թվերի գեներատորը համակարգչային դետերմինիստիկ ալգորիթմ է, որը գեներացնում է պատահական թվեր:
Մոնտե Կարլոյի ալգորիթմներում և ոչ միայն սովորաբար անհարժեշտ են լինում հավասարաչափ բաշխված գեներատորները: Լավն են համարվում պսևդո-պատահական թվերի այն գեներատորները, որոնք ունեն երկար պարբերություն, արագագործ են, վերարտադրելի են, անցնում են հավասարաչափության համար ստատիստիկակն թեստերը և այլն: Թվարկված հատկություններից թերևս ամենակարևորներն են արագագործությունը և ստատիստիկական թեստեր անցնելու հատկությունները:

Գեներատորների հավասարաչափությունը ստուգելու համար ամենատարածված ծրագրային փաթեթը TestU01-ն է, որը պարունակում է շուրջ 160 ստատիստիկական թեստեր: Երբ այն կիրառվում է գեներատորներին, ապա որպես արդյունք տպվում են թեստի p-արժեքները (p-value): TestU01-ով ստուգվել է և՛ MIXMAX-ի, և՛ Mersenne Twister-ի հատկությունները: Աղյուսակ 1-ից երևում է, որ ստատիստիկական տվյալներով այդ գեներատորները նման են, բայց MIXMAX-ը ավելի արագ է աշխատում:

PRNG	Total CPU time	BigCrush	Failed test'(s) p value
MIXMAX	$2h\,43m\,51s$	*All tests were passed*	—
Mersenne Twister	$3h\,19m\,27s$	3	$0.9990, 1-10^{-15}$

Աղյուսակ 1. TestU01-ի արդյունքները MIXMAX-ի և Mersenne Twister-ի համար:

TestU01-ում ներառված են գրականության մեջ հայտնի բոլոր թեստերը, այդ թվում Կ-Ս և χ^2 (chi-square) թեստերը: Աշխատանքում առանձին իրականցվում են այդ թեստերը (միաչափ և բազմաչափ դեպքերում) և կիրառվում գեներատորներից ստացած մեծ քանակով թվերին: Կիրառելով թեստը (մինչև) 10^8 տարբեր ընտրանքներին (sample)՝ կառուցվում են նորմավորված հիստոգրամները և այն համեմատվում է Կ-Ս-ի կամ χ^2-ու հավանականության բաշխման ֆունկցիաների հետ: Վերոնշյալ թեստերի (Կ-Ս, chi-square) իրականացումը հնարավորություն է տալիս ուսումնասիրել գեներատորի որոշակի ընտրանքների բազմությունը, որոնցից յուրաքանչյուրը պարունակում է մեծ թվով պատահական թվեր: Ստացված արդյունքները ցույց են տալիս, որ և՛ MIXMAX-ը, և՛ Mersenne Twister-ը ստատիստիկական հատկություններով իրար նման են, այսինքն՝ MIXMAX-ը չի զիջում Mersenne Twister-ին: Բազմաչափ

χ^2 թեստերի միջոցով, ինչպես նաև Irwin-Hall հավանականային բաշխման ֆունկցիայի միջոցով նաև ցույց է տրվել MIXMAX-ի զուգահեռ գեներացված շարքերի (parallel streams) միջև ստատիստիկական անկախությունը:

Հինգերորդ գլուխը նվիրված է Կ-Ս թեստի թվային գնահատմանը բարձր չափողականությամբ տարածությունում:
Կ-Ս թեստ-ստատիստիկան տրվում է հետևյալ բանաձևով.

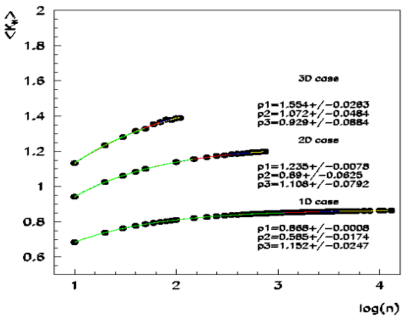
$$D_n = sup_x \, |F_n(x) - F(x)|,$$

որտեղ $F_n(x)$-ը և $F(x)$-ը համապատասխանաբար էմպիրիկ կումուլյատիվ և կումուլյատիվ հավանականության բաշխման ֆունկցիաներն են: Միաչափ դեպքում, մեծ n-երի դեպքում $\sqrt{n}D_n$-ըը տրվում են հայտնի Կոլմոգորովի բաշխվածությամբ, եթե H_0-ն (null hypothesis) ճիշտ է.

$$\lim_{n \to \infty} Pr(\sqrt{n} \cdot D_n \leq x) \equiv K(x) = 1 - 2\sum_{i=1}^{\infty}(-1)^{i-1}e^{-2i^2x^2}$$

Բազմաչափ դեպքում Կ-Ս ստատիստիկայի համար հավանականության բաշխման ֆունկցիայի ճշգրիտ տեսք չկա: Գրականության մեջ փորձեր են արվել Կ-Ս թեստի բազմաչափ ընդհանրացման համար՝ օգտագործելով Մոնտե Կարլո հաշվարկներ: Տվյալների դիսկրետավորման ժամանակ n տվյալները բաշխվում են k ($n > k$) ինտերվալներում (ինչպես օրինակ χ^2 թեստի ժամանակ): Որպեսզի Կ-Ս թեստը կիրառենք դիսկրետավորված տվյալներին, անհաժեշտ է էմպիրիկ կումուլյատիվ և կումուլյատիվ հավանականության բաշխման ֆունկցիաների բացարձակ տարբերությունը հաշվել ոչ թե n, այլ k կետերում, և նոր վերցնել դրանց մեծագույն արժեքը: Աշխատանքում ցույց է տրվում, որ տվյալների դիսկրետավորման միջոցով հաշվված Կ-Ս թեստի մոտավոր արժեքը մեծ ճշտությամբ համընկնում է ճշգրիտ արժեքի հետ: Այնուհետև քննարկվում է նվազագույն ինտերվալների քանակով նոր մոտեցում, որը էապես նվազեցնում է ժամանակի և հիշողության պահանջները Կ-Ս թեստը երկու և ավելի բարձր չափողականությամբ տարածություններում հաշվելու համար: Նկար 6-ում պատկերված է $<\sqrt{n}D_n>$-ի կախվածությունը դիսկրետավորման համար օգտագործվող ինտերվալների քանակից, որտեղ երևում է, որ $\sqrt{n}D_n$-ի միջին արժեքները գնում են հագեցման, այսինքն որոշակի քանակով ինտերվալների դեպքում արդեն իսկ թեստի արժեքը կարելի է մեծ ճշտությամբ որոշել: Մասնավորապես ստացվել է, որ միաչափ դեպքում այն ճշգրիտ համընկնում է տեսական արդյունքի հետ: Այդ կորերը գտնելու համար արվել է ֆիտ հետևյալ ֆունկցիայով.

$$f_{fit}^{\vec{p}}(x) = p_1 + p_2 \exp(-p_3 x).$$



Նկար 6. Կ-Ս թեստի միջին արժեքի կախվածությունը դիսկրետավորման ինտերվալի քանակներից: Ցույց է տրված միաչափ, երկչափ և եռաչափ դեպքերը:

Վերջաբանում թվարկված են ատենախոսության հիմնական արդյունքները:

Օգտագործված Գրականության ամբողջական ցանկը ներկայացված է ատենախոսությունում:

<u>Ատենախոսության թեմայով հրատարակված աշխատանքների ցանկը՝</u>

1. **Narek H. Martirosyan**, *No-pumping theorem for non-Arrhenius rates*, Chinese Journal of Physics, vol. 55, pp. 500-507, (2017).

2. Armen E. Allahverdyan and **Narek H. Martirosyan**, *Free energy for non-equilibrium quasi-stationary states*, Europhysics Letters (EPL), vol. 117, pp. 50004, (2017).

3. Armen E. Allahverdyan, Sanasar G. Babajanyan, **Narek H. Martirosyan**, and Alexey V. Melkikh, *Adaptive heat engine*, Physical Review Letters, vol. 117, pp. 030601, (2016).

4. **N. Martirosyan**, G. Karyan and N. Akopov, *Statistical Tests for MIXMAX Pseudorandom Number Generator*, Mathematical Problems of Computer Science, vol. 47, pp. 37-49, (2017).

5. Norayr Z. Akopov and **Narek H. Martirosyan**, *The Optimal Approach for Kolmogorov-Smirnov Test Calculation in High Dimensional Space*, Mathematical Problems of Computer Science, vol 44, pp. 138-144, (2015).

Աշխատանքի ներկայացումը

Ատենախոսության հիմնական արդյունքները քննարկվել են Երևանի ֆիզիկայի ինստիտուտի Տեսական ֆիզիկայի բաժնի սեմինարներում, ինչպես նաև Ինֆորմատիկայի և ավտոմատացման պրոբլեմների ինստիտուտում, զեկուցվել են միջազգային գիտաժողովներում:

Իմ կողմից զեկուցվել են հետևյալ միջազգային գիտաժողովներում՝

1. 25th ANNUAL INTERNATIONAL LASER PHYSICS WORKSHOP

   Հուլիսի 11 - 15, 2016, Երևան, Հայաստան

2. The Fifth Quantum Thermodynamics Conference

   Մարտի 13-17, 2017, Օքսվորդ, Անգլիա

Markov processes in thermodynamics and statistics.
Abstract

Markov processes is on of the basic tools in the theory of stochastic systems. They are widely applied for describing open systems in physics (atoms, molecules, mesoscopic systems) and chemistry (reactions). These processes are also frequently used in statistics, e.g. in the Metropolis-Hastings algorithm for generating random samples with a desired distribution.

The first task concerns a Markov system driven by a time-periodic external force. The Floquet theory shows that such a system settles into a time periodic state that can resemble the equilibrium state. Here we ask whether the time-integrated probability currents between various states nullify; hence an effectively equilibrium feature holds. The experimental motivation for such problems is found in mechano-chemistry, e.g. in catenane, whose mechanically interlocked molecular architectures is employed in modeling molecular machines. The no-pumping theorem states that the time-averaged probability currents nullify provided that the transition rates have the Arrhenius form. Since this assumption is fairly specific, we identify a new mechanism for the no-pumping theorem. It holds for symmetric time-periodic external fields and the so called destination rates. This mechanism also leads to an approximate no-pumping theorem for the Fokker-Planck rates.

The second task studied here is to describe the non-equilibrium steady state of a Markov system in contact with two different thermal baths. The system contains slow and fast variables, external fields act only on the slow variable, while its transition rates have the Arrhenius form (alternatively, the slow variables live on a tree). These three conditions lead to the existence of a free energy in this nonequilibrium system. In

contrast to the equilibrium situation, the non-equilibrium free energy can increase with temperature. This conceptually interesting feature leads to new mechanisms of cooling.

The third task concerns designing a heat engine that can employ (almost) arbitrary resources. The major limitations for the existing models of heat engines is that their functioning demands external control, or this functioning is tuned to specific thermal baths. In this work a model for an adaptive heat engine is proposed and motivated. Such an engine tunes itself to given baths; hence it is able to extract work from baths at unknown (but different) temperatures. This adaptive feature should enforce small-scale heat-engines employed for energy harvesting at the microscale.

The forth task included in this thesis was statistical tests of pseudo-random number generators, which are the key tools of the Monte Carlo method directly connected with the Markov chains via e.g. the Metropolis-Hastings algorithm. In order to get numerical prove of the quality of checked generators (MIXMAX and Mersenne) the standard set of statistical tests realized in TestU01 package was systematically applied for a first time, and some tests were performed independently for various parameters of sample size. The analysis reveal compatible statistical features of MIXMAX and Mersenne, but better time characteristics for MIXMAX in generating random numbers.

The fifth task is to develop a new approach for K-S discrepancy numerical estimation for multidimensional case. This new approach allowed to save essentially the computer resources (time and memory), and made possible to extend the K-S test for higher dimensional spaces.

Марковские процессы в термодинамике и статистике.

Резюме

Марковские процессы широко применяются в описании открытых, неравновесных систем, включая атомные, молекулярные и мезоскопические системы, а также химические реакции. Эти процессы также широко используются в статистике. К примеру в рамках алгоритма Метрополиса-Гастингса они привлекаются для генерации случайных выборок с заданным распределением.

В рамках первой задачи исследуется Марковская система ведомая периодической по времени внешней силой. Проблема же состоит в нахождении условий при которых результирующее периодическое состояние стохастической системы (существование которого гарантируется теоремой Флоке) имеет эффективно равновесное свойство зануления средних (по времени) потоков вероятности. Экспериментальный аналог подобных систем -- это макромолекулы типа катенана используемые в механохимии. Основной существующий результат в этой области касался систем с Аррениусовскими переходами. Мы установили свойство зануления потоков для другого класса матриц переходов, а также показали приближенную применимость этого результата для стандартной модели Броуновского движения (уравнение Фоккера-Планка).

Вторая задача исследует неравновесное стационарное состояние Марковской системы в контакте с двумя разными термальными резервуарами. Показывается, что такое неравновесное состояние допускает введение свободной энергии (т.е. потенциала для изотермальной работы) при соблюдении следующих трех условий: система содержит быстрые и медленные компоненты; внешние силы совершающие работу действуют только на медленные компоненты; динамика последних описывается Аррениусовскими переходами или же содержит конфигурационные ограничения соответствующие дереву. Неравновесная свободная энергия (в отличии от равновесной) может быть растущей функцией температуры. Это свойство расширяет наши представления об обобщениях равновесной термодинамики, а с практической точки зрения приводит к новым механизмам охлаждения.

Третья задача касается построения термальной машины которая может использовать практический любой неравновестный источник. Известно что работа макроскопических термальных двигателей нуждается во внешнем контроле, или же такие двигатели рассчитаны на работу для специфических, заранее известных значениях внешних параметров (к примеру температур термостатов). Это приводит к тому что существующие термальные двигатели не приспособлены к извлечению работы из неизвестного (или варьируемого) неравновесного источника. Адаптивный термальный двигатель призван решить эту задачу.

Четвертая задача данной диссертации сводится к статистическим тестам генератора псевдо-случайных чисел. Такие генераторы лежат в основе метода Монте-Карло, который напрямую связан с Марковскими процессами через алгоритм Метрополиса-Гастингса. Для того, чтобы получить численные доказательства качества генераторов (MIXMAX и Mersenne) набор стандартных тестов, включенных в пакет TestU01, был впервые применен для систематического тестирования. Также некоторые тесты выполнялись независимо для различных параметров выборки. Проведенный анализ показал, что генератор MIXMAX сравним по статистическим свойствам с генератором Mersenne, но обладает лучшими врменными характеристиками.

Пятая задача развивает новый подход в численной оценке K-C дискрепанса для многомерного случая. Этот новый подход позволил сэкономить существенные компьютерные ресурсы (время и память) и сделал возможным расширить область применения K-S теста в пространствах высокой размерности.