Реализация диаграммной техники для статистических систем в SymPy

Еферина Е. Г.[1]

[1]Российский университет дружбы народов

Семинар «Компьютерная алгебра» факультета ВМК МГУ и ВЦ РАН

$$I\varphi \longrightarrow \overset{+k}{\dashrightarrow} \longrightarrow F\varphi$$

Рис. 1.Прямое взаимодействие

$$I\varphi \longleftarrow \overset{-k}{\dashleftarrow} \longleftarrow F\varphi$$

Рис. 2.Обратное взаимодействие

- Входящие линии (на рисунке обозначено сплошной линией). Эти линии направлены к линии взаимодействия. Линия помечается количеством и типом взаимодействующих сущностей. Можно записывать по одной сущности на линию или группировать их.
- Исходящие линии (на рисунке обозначено сплошной линией). Эти линии направлены от линии взаимодействия. Линия помечается количеством и типом взаимодействующих сущностей. Можно записывать по одной сущности на линию или группировать их.
- Линия взаимодействия. (на рисунке обозначена пунктирной линией). Направление времени обозначено стрелкой. Линия помечается коэффициентом интенсивности взаимодействия.

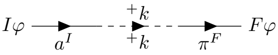


Рис. 3.Прямое взаимодействие (операторный подход)

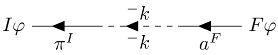


Рис. 4.Обратное взаимодействие (операторный подход)

Будем использовать следующие факторы для каждого типа линий.

- Входящая линия. Линия соответствует выводу одной сущности из системы. Следовательно, ей соответствует оператор уничтожения a. Очевидно, что комбинированной линии мощности I соответствует оператор a^I.
- Исходящая линия. Линия соответствует появлению в системе новой сущности. Следовательно, ей соответствует оператор рождения π. Очевидно, что комбинированной линии мощности F соответствует оператор π^F.
- Линия взаимодействия. Этой линии соответствует собственно коэффициент интенсивности взаимодействия.

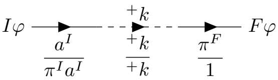


Рис. 5.Прямое взаимодействие (операторный подход), расширенная нотация

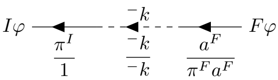


Рис. 6.Обратное взаимодействие (операторный подход), расширенная нотация

Мы получим фактор $^{+}k\pi^F a^I$. Однако при этом нарушается соотношение:

$$\langle 0| L = 0.$$

Для исправления этого положения мы должны вычесть количество сущностей, вступивших во взаимодействие, помноженное на интенсивность взаимодействия. Тогда получим следующий член оператора Лиувилля:

$$^{+}k\pi^F a^I - {}^{+}k\pi^I a^I = {}^{+}k\left(\pi^F - \pi^I\right)a^I.$$

Для обратных взаимодействий используются эти же правила.

Общий вид основного кинетического уравнения для вектора состояний φ^i, изменяющегося шагами длины $r^{i\underline{\alpha}}$, принимает вид:

$$\frac{\partial p(\varphi^i, t)}{\partial t} = \sum_{\underline{\alpha}=1}^{s} \Big\{ {}^{-}s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i + r^{i\underline{\alpha}}, t) p(\varphi^i + r^{i\underline{\alpha}}, t) + \\ + {}^{+}s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i - r^{i\underline{\alpha}}, t) p(\varphi^i - r^{i\underline{\alpha}}, t) - \Big[{}^{+}s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i) + {}^{-}s_{\underline{\alpha}}(\varphi^i) \Big] p(\varphi^i, t) \Big\}.$$

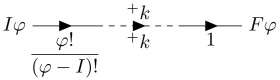


Рис. 7.Прямое взаимодействие (комбинаторный подход)

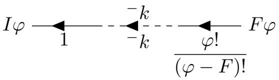


Рис. 8.Обратное взаимодействие (комбинаторный подход)

- Входящая линия.Фактор имеет следующий вид:

$$\frac{\varphi!}{(\varphi - I)!}.$$

- Исходящая линия. Не даёт мультипликативного вклада. Однако служит для получения коэффициента шага r:

$$r = F - I.$$

- Линия взаимодействия. Этой линии соответствует собственно коэффициент интенсивности взаимодействия.

Для диаграммы 7 интенсивности перехода будут иметь следующий вид:

$$
{}^{+}s(\varphi) = {}^{+}k \frac{\varphi!}{(\varphi - I)!},
$$

$$
{}^{-}s(\varphi) = {}^{-}k \frac{\varphi!}{(\varphi - F)!}.
$$

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = \lambda\varphi - \beta\varphi - \gamma\varphi^2,$$

здесь λ — коэффициент интенсивности размножения, β — коэффициент интенсивности вымирания, γ — коэффициент интенсивности уменьшения популяции.
Построим стохастический вариант данной модели. Запишем схемы взаимодействия:

$$\varphi \underset{\gamma}{\overset{\lambda}{\rightleftharpoons}} 2\varphi,$$

$$\varphi \xrightarrow{\beta} 0.$$

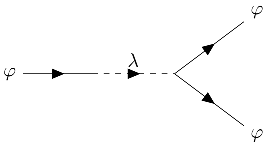


Рис. 9.Первое прямое взаимодействие

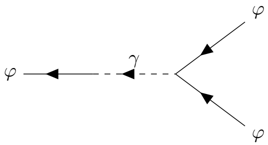


Рис. 10.Первое обратное взаимодействие

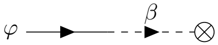


Рис. 11.Второе взаимодействие

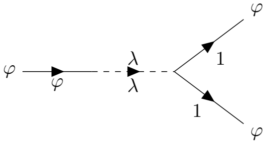


Рис. 12.Первое прямое взаимодействие (комбинаторный подход)

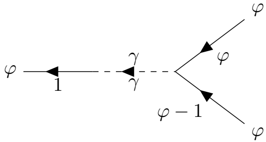


Рис. 13.Первое обратное взаимодействие (комбинаторный подход)

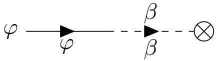


Рис. 14.Второе взаимодействие (комбинаторный подход)

Определим интенсивности переходов:

$$
\begin{aligned}
{}^{+}s_1(\varphi) &= \lambda\varphi, & {}^{+}s_1(\varphi-1) &= \lambda(\varphi-1),\\
{}^{-}s_1(\varphi) &= \gamma\varphi(\varphi-1), & {}^{-}s_1(\varphi-1) &= \gamma(\varphi-1)(\varphi-2),\\
{}^{+}s_2(\varphi) &= \beta\varphi. & {}^{+}s_2(\varphi-1) &= \beta(\varphi-1).
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
{}^{+}s_1(\varphi+1) &= \lambda(\varphi+1),\\
{}^{-}s_1(\varphi+1) &= \gamma(\varphi+1)\varphi,\\
{}^{+}s_2(\varphi+1) &= \beta(\varphi+1).
\end{aligned}
$$

$$
r^1 = 1, \qquad r^2 = -1.
$$

Основное кинетическое уравнение примет следующий вид:

$$\frac{\partial p(\varphi,t)}{\partial t} = -[\lambda\varphi + \beta\varphi + \gamma\varphi(\varphi-1)]p(\varphi,t) + \\ + [\beta(\varphi+1) + \gamma(\varphi+1)\varphi]p(\varphi+1,t) + \lambda(\varphi-1)p(\varphi-1,t).$$

Или же, записывая для конкретных значений φ :

$$\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} := \left.\frac{\partial p(\varphi,t)}{\partial t}\right|_{\varphi=n} = -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n-1)]p_n(t) + \\ + [\beta(n+1) + \gamma(n+1)n]p_{n+1}(t) + \lambda(n-1)p_{n-1}(t).$$

Общая запись оператора Лиувилля:

$$L = \sum_{\underline{\alpha},\underline{i}} \left[{}^{+}k_{\underline{\alpha}} \left((\pi_{\underline{i}})^{F^{\underline{i\alpha}}} - (\pi_{\underline{i}})^{I^{\underline{i\alpha}}} \right) (a_{\underline{i}})^{I^{\underline{i\alpha}}} + {}^{-}k_{\underline{\alpha}} \left((\pi_{\underline{i}})^{I^{\underline{i\alpha}}} - (\pi_{\underline{i}})^{F^{\underline{i\alpha}}} \right) (a_{\underline{i}})^{F^{\underline{i\alpha}}} \right].$$

Получаем оператор Лиувилля:

$$\begin{aligned} L &= \lambda(\pi^2 - \pi)a + \gamma(\pi - \pi^2)a^2 + \beta(1 - \pi)a = \\ &= \lambda\left((a^\dagger)^2 - a^\dagger\right)a + \gamma\left(a^\dagger - (a^\dagger)^2\right)a^2 + \beta\left(1 - a^\dagger\right)a = \\ &= \lambda\left(a^\dagger - 1\right)a^\dagger a + \beta\left(1 - a^\dagger\right)a + \gamma\left(1 - a^\dagger\right)a^\dagger a^2. \end{aligned}$$

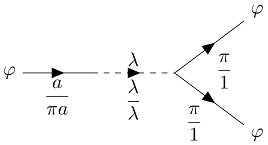


Рис. 15.Первое прямое взаимодействие (операторный подход)

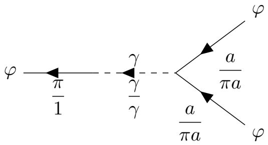


Рис. 16.Первое обратное взаимодействие (операторный подход)

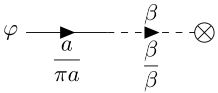


Рис. 17.Второе взаимодействие (операторный подход)

Запишем основное кинетическое уравнение через оператор Лиувилля:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial p_n(t)}{\partial t} = \frac{1}{n!}\langle n|\, L\,|\varphi\rangle = \frac{1}{n!}\langle n| - \Big[\lambda a^\dagger a + \beta a^\dagger a + \gamma a^\dagger a^\dagger aa\Big] + \\
+ \Big[\beta a + \gamma a^\dagger aa\Big] + \lambda a^\dagger a^\dagger a\,|\varphi\rangle = \\
= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n-1)]\,\langle n|\varphi\rangle + \\
+ [\beta(n+1) + \gamma(n+1)n]\,\langle n+1|\varphi\rangle + \lambda(n-1)\,\langle n-1|\varphi\rangle = \\
= -[\lambda n + \beta n + \gamma n(n-1)] p_n(t) + \\
+ [\beta(n+1) + \gamma(n+1)n] p_{n+1}(t) + \lambda(n-1) p_{n-1}(t).
\end{aligned}
$$

Входные данные

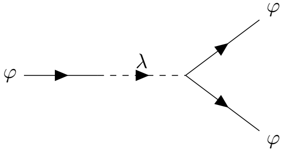
```
lamda = symbols('lamda')
gamma = symbols('gamma')
beta = symbols('beta')
phi = symbols('phi')
Phi = Matrix([phi])
kplus = Matrix ([lamda, 0,0])
kminus = Matrix([0,gamma,beta])
I = Matrix([1,1,0])
F = Matrix([2,2,1])
```

Построение диаграмм с помощью модуля Graph-tool

CreateGraphScheme(Phi, kplus, kminus, I, F)

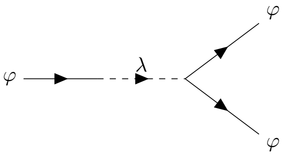
```
s1 = SumGraph([beta, lamda, gamma, phi,
(phi, e, lamda), (e, phi, 0), (e, phi, 0)])
s2 = SumGraph([beta, lamda, gamma, phi,
(e, phi, gamma), (phi, e, 0), (phi, e, 0)])
s3 = SumGraph([beta, lamda, gamma, phi,
(phi, 0, betta)])
```

```
Vertex 0 name φ
Edge (0, 1) weight λ
Vertex 1
Vertex 2 name φ
Edge (1, 2)
Vertex 3 name φ
Edge (1, 3)
```



Построение диаграмм с помощью библитеки GraphState

```
import graph_state
g = graph_state.GraphState.from_str(
"123||||:<_>_>:lamda_0_0||||:0_phi_phi_phi")
```



Литература I

[1] E. G. Eferina, M. Hnatich, A. V. Korolkova, D. S. Kulyabov, et al. Diagram Representation for the Stochastization of Single-Step Processes // DCCN 2016,CCIS 678, pp. 1–15, 2016.

[2]

M. Hnatic, J. Honkonen, T. Lucivjansky. Field-theoretic technique for irreversible reaction processes // Physics of Particles and Nuclei 44 (2), 316-348. Korolkova A.V., Eferina E.G., Laneev E.B., Gudkova I.A., Sevastianov L.A.,Kulyabov, D.S. Stochastization of one-step processes in the occupations number representation // Proceedings - 30th European Conference on Modelling and Simulation, ECMS 2016, pp. 698–704, 2016

[3] GraphState https://pypi.python.org/pypi/GraphState