Παρασκευή 7/12/2012.

Π.Χ. 1 Υπόθεση Gibbs

Εύρεση πιθανοτικών κατανομών για την κατάσταση ενός συστήματος που να ικανοποιούν το 2ο νόμο της θερμοδυναμικής.

Έστω ότι ένα σύστημα μπορεί να βρίσκεται στις καταστάσεις $X_1, \dots, X_n$ με πιθανότητα $p_1, \dots, p_n$ αντίστοιχα.

Θέλουμε $\sum_{i=1}^{n} p_i = 1$, $p_i \geq 0$.

Η εντροπία του συστήματος είναι $S(\underline{p}) = -\sum_{i=1}^{n} p_i \log p_i$

Η ενέργεια του συστήματος είναι $\mathcal{E}(\underline{p}) = \sum_{i=1}^{n} p_i H(x_i)$

όπου $H(x_i)$ είναι η ενέργεια της κατάστασης x_i.

$\underline{p} = (p_1, \dots, p_n)$

2ος νόμος της θερμοδυναμικής

Αν το σύστημα είναι σε θερμοκρασία T, η ισορροπία επιτυγχάνεται όταν η ελεύθερη ενέργεια $\mathcal{E}(\underline{p}) - KTS(\underline{p})$ ελαχιστοποιείται.

K: η σταθερά του Boltzmann.

Το πρόβλημα είναι: $\min\limits_{\underline{p}} \sum_{i=1}^{n} (p_i H(x_i) + KT p_i \log p_i)$

υπό τον περιορισμό $\sum_{i=1}^{n} p_i = 1$.

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial p_i}\left(L(\underline{p}, \lambda)\right) = 0, & i=1,\dots,n \\ \sum_{i=1}^{n} p_i = 1 \end{cases}$$

σύστημα $n+1$ εξισώσεων
με $n+1$ αγνώστους

όπου $L(\underline{p},\lambda) = \sum_{i=1}^{n}\left(p_i H(x_i) + KT p_i \log p_i\right) - \lambda\left(\sum_{i=1}^{n} p_i - 1\right)$

Οπότε, $H(x_i) + KT(\log p_i + 1) - \lambda = 0 \quad , \forall i$

$\Leftrightarrow KT(\log p_i + 1) = -H(x_i) + \lambda$

$\Leftrightarrow p_i = e^{-\frac{1}{KT}(H(x_i) - \lambda) - 1} \quad (1)$

για να βρούμε το λ χρησιμοποιούμε την εξίσωση $\sum_{i=1}^{n} p_i = 1$

Οπότε, $\sum_{i=1}^{n} e^{-\frac{1}{KT}(H(x_i) - \lambda) - 1} = 1$

$\Leftrightarrow e^{-\frac{\lambda}{KT} - 1} = \left(\sum_{i=1}^{n} e^{-\frac{1}{KT}H(x_i)}\right)^{-1}$

Επομένως η (1) γίνεται: $p_i = \dfrac{e^{-\frac{1}{KT}H(x_i)}}{\sum_{i=1}^{n} e^{-\frac{1}{KT}H(x_i)}}$

όπου $\overline{\sum_{i=1}^{n} e^{-\frac{1}{KT}H(x_i)}}^{-1}$ είναι ο συντελεστής κανονικοποίησης

<u>π.χ. 2</u>

Έστω το π.γ.π $(1) \begin{cases} \max \underline{c}^T \underline{x} \\ A\underline{x} \leq \underline{b} \\ \underline{x} \geq 0. \end{cases}$

όπου $A = [P_1 \dots P_n] = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_m \end{bmatrix} \in M_{m \times n}$

Μπορούμε να βρούμε εκτιμήσεις για το $\max \underline{c}^T \underline{x}$?

Ας υποθέσουμε ότι μπορούμε να αγνοήσουμε τους περιορισμούς, αλλά μ' ένα σχετικό κόστος λ_i για κάθε ένα από τους περιορισμούς $\underline{\alpha}_i^T \cdot \underline{x} \leq b_i$, $i=1,\ldots,m$.

Ορίζουμε τη συνάρτηση $g(\underline{x},\underline{\lambda}) = \underline{c}^T \underline{x} + \sum_{i=1}^{m} \lambda_i (b_i - \underline{\alpha}_i^T \underline{x})$
για $\underline{\lambda} \equiv (\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$

Για κάθε εφικτό $x \in F \equiv \{\underline{x} : A\underline{x} \leq b\}$ κ' $\lambda \geq 0$ έχουμε:
$g(\underline{x},\underline{\lambda}) \geq \underline{c}^T \underline{x}$.

Οπότε $\max_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} g(\underline{x},\underline{\lambda}) \geq \max_{\underline{x} \in F} \underline{c}^T \underline{x}$

Δηλαδή, για κάθε $\underline{\lambda}$ η συνάρτηση $g(\underline{\lambda}) := \max_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} g(\underline{x},\underline{\lambda})$ είναι ένα άνω όριο του αρχικού προβλήματος (1).

Για να βρούμε το καλύτερο τέτοιο όριο έχουμε: $g^* := \min_{\underline{\lambda} \geq 0} g(\underline{\lambda})$

$$= \min_{\underline{\lambda} \geq 0} \left\{ \max_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} \left(\underline{c}^T \underline{x} + \sum_{i=1}^{n} \lambda_i (b_i - \underline{\alpha}_i^T \underline{x}) \right) \right\}$$

$$= \min_{\underline{\lambda} \geq 0} \left\{ \underline{\lambda}^T \underline{b} + \max_{\underline{x} \in \mathbb{R}^n} (\underline{c}^T \underline{x} - \underline{\lambda}^T A \underline{x}) \right\}$$

Αν το $c^T - \underline{\lambda}^T A$ έχει κάποια μη μηδενική συντεταγμένη, τότε το μέγιστο ως προς $\underline{x} \in \mathbb{R}^n$ είναι ∞.
Οπότε, για να βρούμε κάποιο χρήσιμο άνω όριο αρκεί να ψάξουμε $\underline{\lambda}$ τ.ω. $\underline{c}^T = \underline{\lambda}^T A$, ή αλλιώς: $\min_{\underline{\lambda} \geq 0} \underline{\lambda}^T \underline{b}$, $\underline{c}^T = \underline{\lambda}^T A$.