

---

# 研究者创新提出一种动力配分函数计算方法

作者：writer 来源：科学网

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/26995.html>

**本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！**

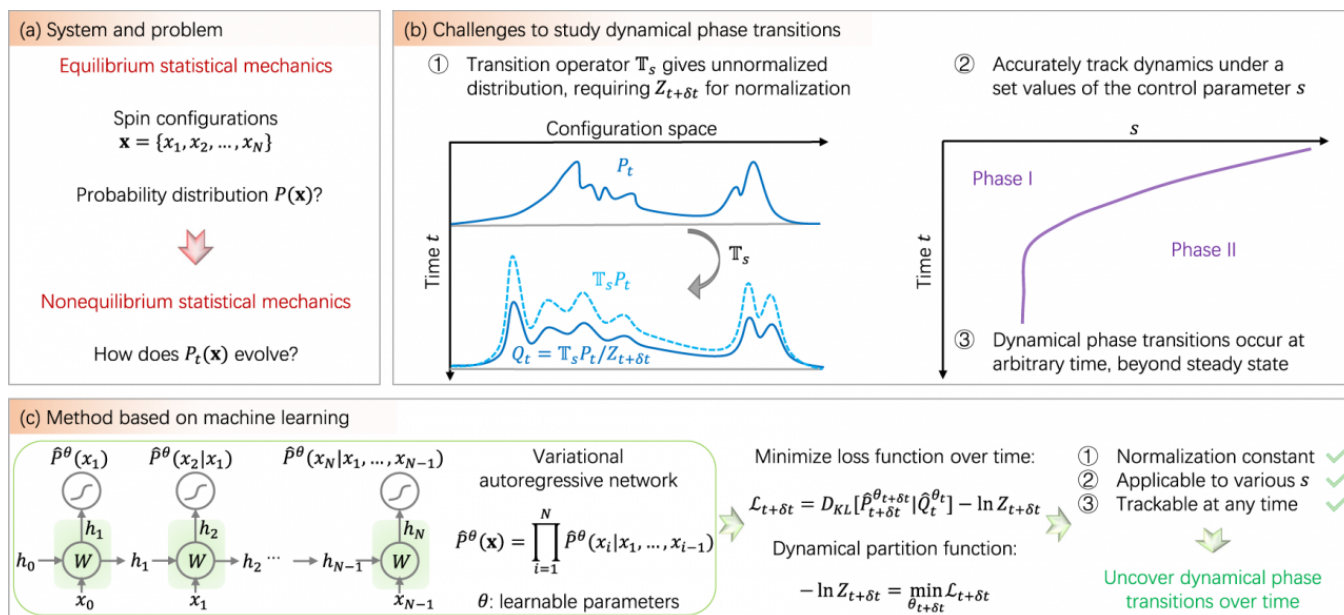
研究者创新提出一种动力配分函数计算方法。

近日，电子科技大学基础与前沿研究院教授汤迎课题组，联合中国科学院理论物理研究所研究员张潘、博士后刘晶，北京师范大学系统科学学院教授张江在《自然—通讯》上发表了研究论文。论文报道了利用变分自回归网络求解非平衡态统计力学和动力学相变的最新进展。

探究非平衡系统中的相变现象和普适性行为，是统计物理研究领域的重点课题之一。在非平衡态统计物理学中，动力配分函数堪称其核心概念的代表之一，有着与平衡态统计物理中的系综和配分函数相仿的地位。与计算平衡态系统配分函数不同，动力配分函数的求解不仅需要对所有可能的系统状态进行求和，还必须引入对时间这一额外维度的考量。

虽然在长时间极限情况下，该问题可通过简化处理并利用大偏差理论等方法进行分析，但要精确计算系统在任意有限时间内演化得到的动力配分函数，仍是一项颇具挑战性的工作。这个计算难题不仅继承了平衡态配分函数计算的复杂性，还需精确捕捉系统变量在任意时刻的联合分布情况。

对此，文章提出了一种创新的动力配分函数计算方法。该方法采用循环神经网络、PixelCNN和Transformer等自回归生成模型，结合强化学习技术，预测系统在任意时刻的联合概率分布。这一研究为动力配分函数的计算带来了机器学习的新视角和方法路径。（来源：中国科学报 杨晨）



通过演化变分自回归网络追踪系统演化到任意时刻状态的联合概率分布。电子科技大学供图

相关论文信息：<https://doi.org/10.1038/s41467-024-45172-8>

作者：汤迎等 来源：《自然—通讯》

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](https://www.iikx.com)转发