第4卷，文章02，2026年
DOI:10.25950/a25ce9a6

arXiv:2602.07199v1 [physics.comp-ph] 6 Feb 2026

事件链蒙特卡罗：全局平衡的突破

评论作者

E.A.J.F.（Frank）Peters

荷兰埃因霍温理工大学化学工程与化学系

on

硬球系统的事件链蒙特卡罗算法E. P. Bernard、W. Krauth、D. B. Wilson，物理评论E，80:056704，2009年

收稿日期：*2026*年*1*月*9*日
发表日期：*2026*年*2*月*6*日

重要性声明

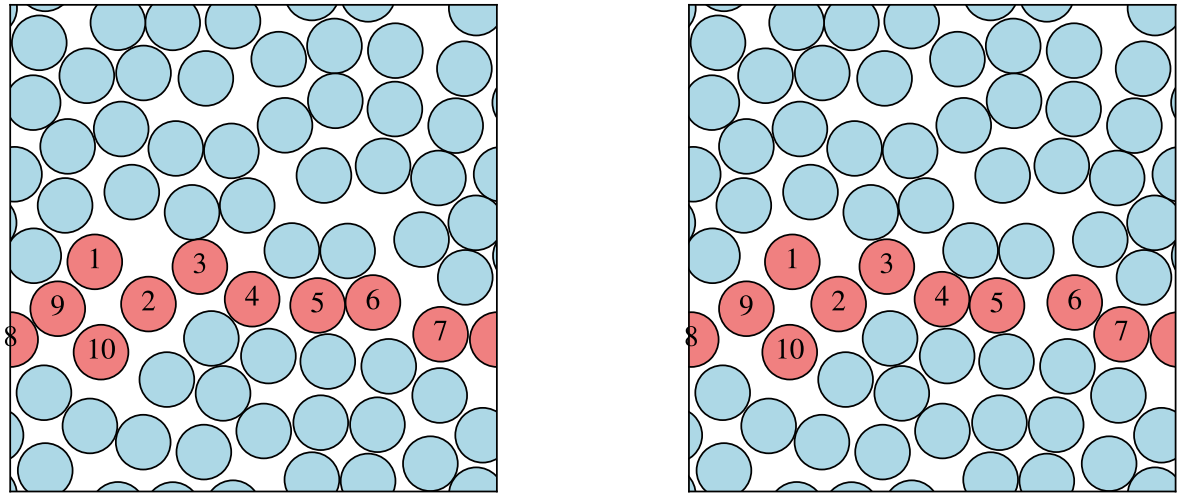
Bernard、Krauth 和 Wilson 于 2009 年发表的开创性论文，标志着蒙特卡罗采样领域的一次范式转变。他们摒弃了细致平衡这一限制性条件，转而采用更基本的全局平衡原则，并由此提出了事件链蒙特卡罗（ECMC）算法，实现了硬球系统中无拒绝的确定性采样。这一突破表明，持续且具有方向性的动力学能够显著加快稠密粒子系统的平衡化。在本文评论中，我们回顾这项奠基性工作，并借助随后几年发展起来的、更广泛的事件驱动蒙特卡洛（EDMC）框架，阐明其内在机制。我们将展示，最初针对硬球提出的概念如何自然推广至连续势以及现代提升马尔可夫链形式体系，从而将一项出人意料的特定成果转化为一类强大的通用采样算法。

1 引言：从难以置信到理解

Bernard、Krauth 和 Wilson 在最初的事件链蒙特卡罗（ECMC）论文中提出的这一思想 [1]，属于那种既令人惊讶又让人觉得理所当然的洞见。它几乎显得自相矛盾：一种从不拒绝、以确定性方式移动粒子，却能采样正确平衡分布的蒙特卡罗移动。我第一次读到这篇论文时，第一反应是：这怎么可能奏效？但在理解其推理之后，这种方法的精妙之处便令人惊叹。它如此简单，又如此符合物理直觉，以至于人们不禁会想：为什么几十年前没有人发现它？

从本质上说，ECMC 用连续的确定性运动取代了 Metropolis 采样随机、走走停停的行为。如图 1 所示，一次移动包括选取一个粒子（粒子 1），沿固定方向（此处为向右）移动它，直到它与另一个粒子（粒子 2）发生碰撞。在这一事件中，活动发生转移：粒子 1 停止移动，而粒子 2 立即沿相同方向开始移动，直到与第三个粒子发生碰撞，如此继续。这就形成了一条位移链。当链中所有粒子的总位移达到预先设定的链长 l 时，整次移动停止。图 1a 展示了将参与该链的粒子的初始位置，图 1b 则展示了链完成后的最终位置。

这一过程是无拒绝的。对于给定的方向和链长，该移动是确定性的。沿相反方向运行的链会完美恢复原始构型。开创性的洞见出自



（a）位移前　　（b）位移后

图 1：事件链移动。粒子 1 被选中向右移动。当它与粒子 2 发生碰撞时，粒子 1 停止移动，由粒子 2 接替，依此类推，形成一条事件链。当位移总和达到预设值 l 时，运动停止；在本例中，该值为盒子尺寸的五分之一。图（a）显示了参与事件链的粒子的初始位置，图（b）显示了最终位置。

Bernard 等人[1] 在于打破细致平衡。通过始终只沿“正”方向移动粒子（例如，$+x$ 或 $+y$），他们产生了持续的概率流。这显然违反了细致平衡。然而，正如作者所示，该算法仍然保持硬球构型的均匀平衡分布。每个构型的入链数与出链数相同，从而满足全局平衡 条件。从实际效果看，ECMC 将 Metropolis 采样的扩散型随机游走转变为对构型空间近乎弹道式的探索，从而使平衡化快得多。

在这篇评论中，我旨在对这一突破的理论与实践基础进行教学式阐释。尽管硬球事件链背后的物理直觉很容易理解，但其基本原理可以推广到任意连续势，从而为无拒绝采样提供统一视角。我选择从基本的概率流出发，逐步推导至连续时间极限，并呈现相对技术性的推导过程。这使我们能够看到，最初的 ECMC 算法 [1] 及其随后向事件驱动蒙特卡洛（EDMC） [2] 的推广，如何在无穷小步 [3]的严格框架下得到统一。我的目标是引导读者从 2009 年论文最初带来的惊讶，走向对如何构建普适性全局平衡方法的具体理解。

2 全局平衡

ECMC 的惊人之处源于它背离了 MCMC 算法的标准做法，即梅特罗波利斯算法。传统 MCMC 通常强制满足细致平衡条件，该条件要求在平衡态下，任意两个状态 i 与 j 之间的概率流恰好平衡。这是一个很强的局部条件，便于验证给定目标分布 π 对于马尔可夫链是平稳的。然而，细致平衡只是充分条件。平稳性的根本要求是更弱的全局平衡条件。

为了准确说明这一点，我们不妨回顾一下马尔可夫链蒙特卡洛模拟的基本结构。从当前状态 x_i 转移到新状态 x_j 的过程，是根据转移概率 $T(x_i \to x_j)$ 抽取的，

这些转移概率汇集在转移矩阵 $T_{ij} \equiv T(x_i \to x_j)$ 中。根据其构造方式，

$$p_{n+1}(x_j) = \sum_i p_n(x_i)\, T(x_i \to x_j), \qquad \sum_j T(x_i \to x_j) = 1, \tag{1}$$

其中， $p_n(x_i)$ 表示经过 n 步后处于状态 x_i 的概率。第二个关系表明，所有可能下一状态的概率之和为一。利用这一归一化条件，式（1）可改写为

$$p_{n+1}(x_j) - p_n(x_j) = \sum_i \left[p_n(x_i)\, T(x_i \to x_j) - p_n(x_j)\, T(x_j \to x_i) \right], \tag{2}$$

这就是马尔可夫链的离散时间主方程。

转移矩阵 T 是一个（行）随机矩阵：所有元素均为非负数，且每一行的和为一。佩龙-弗罗贝尼乌斯定理表明，如果 T 是不可约的，则存在唯一的平衡分布 $\pi(x_i)$，马尔可夫链将收敛到该分布，即对于 $n \to \infty$ [4]， $p_n(x_i) \to \pi(x_i)$。不可约性意味着，在有限步数（设为 k）内，任意状态都能以非零概率从任意其他状态到达；在数学上， T^k 的所有元素均严格为正。在稳态下，式（1）化为

$$\pi(x_j) = \sum_i \pi(x_i)\, T(x_i \to x_j), \tag{3}$$

这正是全局平衡的条件：流入状态 x_j 的总概率等于该状态的稳态概率。利用主方程形式（2），同一条件可写为

$$\sum_i \pi(x_i)\, T(x_i \to x_j) = \sum_i \pi(x_j)\, T(x_j \to x_i), \tag{4}$$

表达的是：在平衡态下，流入每个状态的净概率流为零 s.

在统计力学中，人们关注的是对玻尔兹曼分布等平衡分布进行采样，

$$\pi(x) = \frac{1}{Z} \exp\left(-\beta\, U(x)\right), \tag{5}$$

其中 $U(x)$ 是势能， Z 是归一化因子（配分函数）。构造转移概率 $T(x_i \to x_j)$ 时，无需知道归一化常数 Z，因为它会在所有全局平衡表达式中抵消。实际问题是：给定 $U(x)$，应如何构造并采样转移核 $T(x_i \to x_j)$，使得到的马尔可夫链不可约，满足相对于式（5）的全局平衡，并尽可能高效？Metropolis 等细致平衡方案提供了一种答案；ECMC 及相关全局平衡算法则提供了另一种答案。

2.1 概率流

要通过马尔可夫链蒙特卡罗方法对已知的平衡分布进行采样，必须满足全局平衡条件（式（3））， 或与之等价的主方程形式（式（4）。

满足平稳主方程（式（4））的一种简单方法是要求求和中的每一项都分别为零。由此得到细致平衡条件

$$\pi(x_i)\, T(x_i \to x_j) = \pi(x_j)\, T(x_j \to x_i), \tag{6}$$

这一条件足以保证全局平衡，但并非必要条件。

在构造用于对平衡态下的 $\pi(x)$ 进行采样的蒙特卡罗算法时，通常可以用平衡态概率流来表示全局平衡：

$$\pi(x_i; x_j) \equiv \pi(x_i)\, T(x_i \to x_j). \tag{7}$$

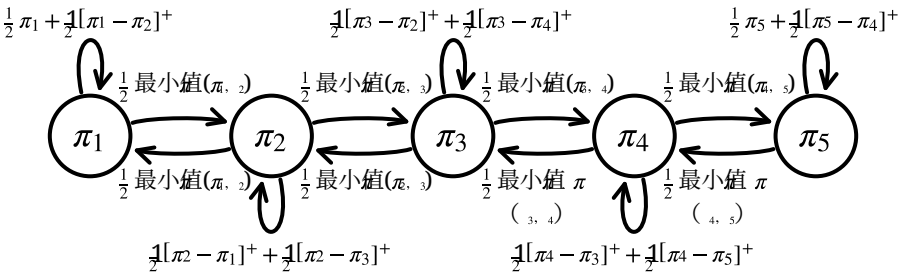


图2：一维中的Metropolis方案。流入与流出的平衡概率流相加等于稳态概率 π_i。细致平衡成立，因为任意两个节点之间的概率流是对称的。

根据此定义，全局平衡（式 (3)）和转移概率的归一化可以简洁地写为

$$\pi(x_j) = \sum_i \pi(x_i; x_j), \qquad \pi(x_i) = \sum_j \pi(x_i; x_j). \tag{8}$$

量 $\pi(x_i; x_j)$是处于状态 x_i 并在一步内跃迁到x_j 的两点平衡概率。方程(8)只是表明，将该两点分布对两个状态中的任一状态求和，即可得到单点平稳分布。

用这些术语表述，细致平衡 [式 (6)] 变为对称性条件： $\pi(x_i; x_j) = \pi(x_j; x_i)$，在数学文献中通常称为 可逆 马尔可夫链。在分子模拟中最好避免使用这一术语，因为“可逆性”已经用于描述哈密顿系统的动力学性质；这里我们仍然只称之为细致平衡。

构造满足式 (8) 的马尔可夫链的一种方法是要求

$$\sum_{i\neq j} \pi(x_i; x_j) = \sum_{i\neq j} \pi(x_j; x_i) \leq \pi(x_i), \tag{9}$$

$$\pi(x_i; x_i) = \pi(x_i) - \sum_{j\neq i} \pi(x_i; x_j) = \pi(x_i) - \sum_{j\neq i} \pi(x_j; x_i). \tag{10}$$

一种直接实现这一点的方法是引入一个对称试探核， $T_{\text{trial}}(x_i \to x_j) = T_{\text{trial}}(x_j \to x_i)$，并定义

$$\pi(x_i; x_j) = T_{\text{trial}}(x_i \to x_j)\, \min\big(\pi(x_i), \pi(x_j)\big), \qquad i \neq j. \tag{11}$$

由于试探核是对称的，对 i 和 j 的求和相等，而 min 确保它们不会超过 $\pi(x_i)$ 或 $\pi(x_j)$。相应的转移概率为

$$T(x_i \to x_j) = \frac{\pi(x_i; x_j)}{\pi(x_i)} = T_{\text{trial}}(x_i \to x_j)\, \min\left(1, \frac{\pi(x_j)}{\pi(x_i)}\right), \qquad i \neq j, \tag{12}$$

$$T(x_i \to x_i) = 1 - \sum_{j\neq i} T(x_i \to x_j) = \sum_j T_{\text{trial}}(x_i \to x_j)\, \left[1 - \frac{\pi(x_j)}{\pi(x_i)}\right]^+. \tag{13}$$

这里的记号 $[a]^+$ 表示 max(0， a)。

方程（11）–π(13）描述了标准的 Metropolis 算法：提议移动到 x_j 时，以 min(1, x_i 2 [8] $x_i \to$ ( )/π( )) 的概率接受，否则链保持在 ，从而形成自转移 T( )。图 展示了一维情况下的 Metropolis 流。全局平衡方程（ ）要求所有流入流量之和与所有流出流量之和均等于 π_i。

Metropolis 算法有两个众所周知的缺点，全局平衡方案（如 ECMC）旨在缓解这些问题。首先，对称试探核 $T_{\text{trial}}(x_i \to x_j)$ 会导致局部扩散动力学。其次，在致密系统中，接受概率可能非常低，导致大量拒绝，采样速度也因此变慢。

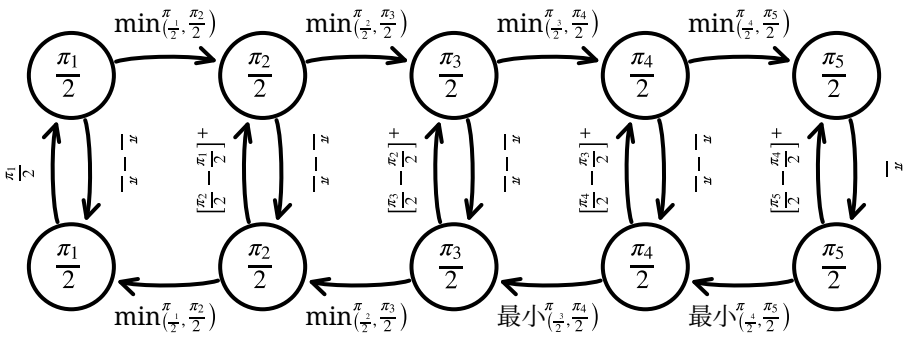


图 3：一维提升式马尔可夫链方案。每个物理状态 x_i 都会拆分为两个提升态，通常解释为“向左移动”或“向右移动”。细致平衡遭到破坏，但全局平衡得以维持：对于每个提升态，流入和流出的平衡流之和都等于稳态概率。与 Metropolis方案（图 2）不同，这里没有自跃迁，因此也没有拒绝。

2.2 提升式 Metropolis方案

图 3 展示了一个满足全局平衡但违反细致平衡的马尔可夫链的简单示例。与图 2 中的 Metropolis方案相比，每个原始状态 x_i 都被拆分为两个提升后的 子状态，并用内部变量 $v \in \{-1, +1\}$标记。这对子状态的总稳态概率等于原始π_i，因此，物理状态 x_i 上的边缘分布保持不变。

内部变量 v 可自然地解释为方向或速度。如果 Metropolis 提议被拒绝，提升方案则会翻转 $v \to -v$。因此，提升态空间中的转移包括两种：在固定 v 下的弹道运动，或使 v反向的“碰撞”。虽然细致平衡被打破，但全局平衡条件仍得以保持，因为对于每个提升节点（$v,\ x_i$），流入流之和与流出流之和均等于 π（$v,\ x_i$）。当尝试以速度 v从状态 i移动到下一个状态 $j = i + v$时，发生碰撞并使速度反向的平衡概率流为

$$\pi((v, x_i); (-v, x_i)) = \left[\frac{\pi_i}{2} - \frac{\pi_{i+v}}{2}\right]^+. \tag{14}$$

尝试移动到概率更高的状态（$\pi_{i+v} > \pi_i$）时，这种流动会消失；因此，只有在尝试移动到概率更低的状态时才会发生碰撞。

乍看之下，这似乎只是对 Metropolis 的小幅修改：拒绝操作只不过被翻转v取代了。然而，由此产生的动力学在性质上可能截然不同。在 Metropolis 链中，每个节点向左或向右移动的概率相同，因此会产生扩散动力学。相比之下，在提升方案中，内部区域不会发生碰撞：只要平衡态的概率增加（对于玻尔兹曼分布而言，即势能降低），系统就会持续朝一个方向移动；只有当这一条件不再成立时，才可能发生碰撞。此时，动力学变为对流，而非扩散。关键的是，提升方案中没有自环：在提升空间中，Metropolis方案里的拒绝操作被内部状态的切换所取代。该方案严格来说是无拒绝的。

有时有人主张，应追求比无拒绝更强的条件，即“最大全局平衡” [3]。该条件要求任意两个状态之间的概率流都具有单向性。这可以防止回流，从而使流动具有最大的对流性和最小的扩散性。虽然这是一项很好的指导原则，但并非总能实现。例如，在图 3 中，如果平衡态概率π_i 存在局部最大值（对应于势能的最小值），那么为满足全局平衡，提升就必须是双向的。另一个需要考虑的因素是，这种纯粹的对流运动可能会对遍历性产生不利影响。研究均匀分布 $\pi_i = 1/N$这一极限情况时，这一点便显而易见。附录 A 对一维链混合速率的详细分析表明，引入一个较小的“自发”碰撞概率，可以通过提升将弛豫时间的标度从 $O(N^2)$降低至 $O(N)$。实际上，ECMC 方案有时会遇到轻微的遍历性问题。通常可以通过

对系统中的速度进行重采样来解决。另一种策略是引入一个较小的自发碰撞概率，例如，

$$\pi((v,x_i);(-v,x_i)) = \varepsilon\,\frac{\pi_i}{2} + (1-\varepsilon)\,\left[\frac{\pi_i}{2} - \frac{\pi_{i+v}}{2}\right]^+. \tag{15}$$

将一维提升式 Metropolis 方案推广到一种弹道输运的情形很有用，其中速度会因碰撞而间歇性改变。假设弹道部分采用 Metropolis 筛选器，并以步长 Δt 在离散时间下写出概率流的全局平衡条件 [式（7）和式（8）]，可得

$$\begin{aligned}\pi(v,x) &= \pi((v,x-v\Delta t);(v,x)) + \sum_{v'}\pi((v',x);(v,x)) \\ &= \min\big(\pi(v,x-v\Delta t),\pi(v,x)\big) + \sum_{v'}\pi((v',x);(v,x)), \qquad (16)\\ \pi(v,x) &= \pi((v,x);(v,x+v\Delta t)) + \sum_{v'}\pi((v,x);(v',x)) \\ &= \min\big(\pi(v,x),\pi(v,x+v\Delta t)\big) + \sum_{v'}\pi((v,x);(v',x)). \qquad (17)\end{aligned}$$

我们的主要目标是对位置上的概率分布 $\pi_x(x)$ 进行采样。因此，假设 v 的分布与 x 无关，并引入速度空间中的条件概率流，会更方便：

$$\pi(v,x) = \pi_v(v)\,\pi_x(x), \qquad \pi(v;v'|x) \equiv \frac{\pi((v,x);(v',x))}{\pi_x(x)}. \tag{18}$$

根据这些定义，式（17）变为

$$\pi_v(v)\,\pi_x(x) = \pi_v(v)\,\pi_x(x)\,\min\left(1,\frac{\pi_x(x-v\Delta t)}{\pi_x(x)}\right) + \pi_x(x)\sum_{v'}\pi(v';v|x), \tag{19}$$

$$\pi_v(v)\,\pi_x(x) = \pi_v(v)\,\pi_x(x)\,\min\left(1,\frac{\pi_x(x+v\Delta t)}{\pi_x(x)}\right) + \pi_x(x)\sum_{v'}\pi(v;v'|x). \tag{20}$$

若写作如下形式，则式（20）中的归一化关系成立：

$$\pi(v;v'|x) = P_{\rm coll}(v,x)\,\pi_v(v)\,T_v(v\to v'|x), \qquad P_{\rm coll}(v,x) = \left[1-\frac{\pi_x(x+v\Delta t)}{\pi_x(x)}\right]^+, \tag{21}$$

其中，$P_{\rm coll}(v,\ x)$ 是碰撞概率，而 $T_v(v\to v'|x)$ 是速度空间中的碰撞后转移核。于是，全局平衡条件（式（19））变为

$$\left[1-\frac{\pi_x(x-v\Delta t)}{\pi_x(x)}\right]^+\pi_v(v) = \sum_{v'}\left[1-\frac{\pi_x(x+v'\Delta t)}{\pi_x(x)}\right]^+\pi_v(v')\,T_v(v'\to v|x). \tag{22}$$

除确定性碰撞规则 $v'=-v$ 等特殊选择外，对于有限的 Δt，通常很难精确满足式（ ）。 (22)

这种情况 在极限 $\Delta t\to 0$ 下会变得简单。对于玻尔兹曼分布， [式 (5)] 有 s

$$\left[1-\frac{\pi_x(x+v\Delta t)}{\pi_x(x)}\right]^+ = \big[1-\exp\big(-\beta\,[U(x+v\Delta t)-U(x)]\big)\big]^+ \approx \beta\,[v\cdot\nabla U(x)]^+\,\Delta t, \tag{23}$$

因此，式 (22) 变为

$$[-v\cdot\nabla U(x)]^+\,\pi_v(v) = \sum_{v'}[v'\cdot\nabla U(x)]^+\,\pi_v(v')\,T_v(v'\to v|x). \tag{24}$$

这允许许多可能的解。一类简单而重要的情形由

$$\sum_{v'} \pi_v(v')\, T_v(v' \to v|x) = \pi_v(v), \text{ with } T_v(v \to v'|x) = 0, \text{ if } v' \cdot \nabla U(x) \neq -v \cdot \nabla U(x), \tag{25}$$

因此，这类提升方案具有两个关键特征：首先，仅当沿势能上坡方向运动时才会发生碰撞（$v \cdot \nabla U > 0$）；其次，碰撞会反转速度在 ∇U 方向上的分量。必须构造这些碰撞，使其保持所选速度分布 $\pi_v(v)$ 不变。由于主要目标通常是对构型分布 $\pi_x(x)$ 进行采样，速度 v 充当辅助变量，从而可以灵活选择 π_v。然而，一个关键约束随之出现：尽管碰撞转移概率 $T_v(v' \to v|x)$ 本质上取决于位置 x（通过 $\nabla U(x)$），速度分布 $\pi_v(v)$ 必须与 x 无关，才能实现因子分解 $\pi(x,\ v) = \pi_x(x)\pi_v(v)$。这一要求严格限制了满足公式（24）的可行碰撞规则。

2.3 因子化 Metropolis 筛选

到目前为止讨论的提升式 Metropolis 方案在概念上很有用，但对于分子模拟而言仍不实用。特别是，提升方案中的一次碰撞通常会反转构型中所有相关粒子的速度，这种操作的全局性太强，计算效率远低于要求。通过将 Metropolis 接受率进行因子化，可以实现一项关键改进，使碰撞仅局部地作用于参与特定相互作用的粒子。

在分子模拟中，总势能几乎总是可以表示为相互作用项之和，

$$U = \sum_{\alpha} U_\alpha, \tag{26}$$

其中，每个 U_α 通常只取决于少数几个粒子（例如成对相互作用、角度项、二面角势能）。如前文所述（参见式（9）），任何产生的概率流小于或等于 Metropolis 概率流的接受规则，都仍能正确采样平衡分布。

对于能量增量为 ΔU_α的候选移动，传统的 Metropolis 接受规则为

$$p_{\text{acc}} = \min\left(1,\, \exp(-\beta \sum_{\alpha} \Delta U_\alpha)\right) = \exp\left(-\beta \big[\sum_{\alpha} \Delta U_\alpha\big]^+\right). \tag{27}$$

利用不等式

$$[\sum_{\alpha} \Delta U_\alpha]^+ \ \leq \ \sum_{\alpha} [\Delta U_\alpha]^+, \tag{28}$$

我们得到因子化 ***Metropolis*** 滤波器 [3]:

$$\min\left(1,\, e^{-\beta \sum_\alpha \Delta U_\alpha}\right) \ \geq \ \prod_{\alpha} e^{-\beta [\Delta U_\alpha]^+}. \tag{29}$$

在传统的 Metropolis 蒙特卡罗中，式（29）右侧只会提高拒绝率，因此不会带来计算优势。然而，在提升算法中，这种因子分解具有变革性。

在提升方案中，Metropolis 拒绝会变成一次碰撞。借助因子化滤波器，该碰撞概率被分解为来自各个势能分量的独立贡献 α。于是，公式（29）中的每个因子都有了自然的解释：$1 - \exp\big(-\beta[\Delta U_\alpha]^+\big)$ 表示系统与势能项 α发生碰撞的概率。

当发生带有相互作用 α 的碰撞时，必须根据局部能量梯度反转 v 沿梯度方向的分量（根据公式 (25)）：

$$v' \cdot \nabla U_\alpha = -\, v \cdot \nabla U_\alpha. \tag{30}$$

至关重要的是，这一约束仅涉及出现在 U_α中的粒子。因此，碰撞是局部的：只需更新一小部分粒子速度，通常对于两体势涉及一对粒子，对于角度势则涉及三个粒子。

因子化 Metropolis 框架由此解决了提升式 Metropolis 方案的一个关键局限。碰撞不再对应于耦合整个系统的全局速度反转，而是对应于局域相互作用。这构成了提升式马尔可夫链与事件驱动蒙特卡罗算法（如事件链方法及其推广）之间的概念桥梁：碰撞对每个相互作用分量独立发生，使系统能够在事件之间确定性地演化。

2.4 事件驱动实现

提升式 Metropolis 方案的碰撞要求（式 (24)）仅在步长 $\Delta t \to 0$ 趋于零的极限下严格成立。为得到连续时间描述，我们由平衡流（式 (13)）导出转移概率，并将其代入主方程（式 (2)）。取极限 $\Delta t \to 0$即得到偏微分方程

$$\frac{\partial p(x,v,t)}{\partial t} = -\,v\cdot\nabla_x p(x,v,t) - \beta \sum_\alpha [v\cdot\nabla U_\alpha]^+ \, p(x,v,t) + \beta \sum_\alpha \int_{v'} [v'\cdot\nabla U_\alpha]^+ \, p(x,v',t)\, T_\alpha(v'\to v|x)\, dv'. \quad (31)$$

第一项描述以恒定速度 v 进行的确定性流动。第二项表示因碰撞 $v \to v'$ 而损失的概率，而第三项则计入由碰撞$v' \to v$获得的概率。作为一致性检验：对于平衡分布， $p(x,\ v,\ t) = \pi_x(x)\ \pi_v(v)$，其中 π_x 为玻尔兹曼分布（式 (5)），可得 $-v\cdot\nabla_x\pi_x(x)\ \pi_v(v) = \beta v\cdot\nabla\sum_\alpha U_\alpha$。代入该关系并利用 $a - [a]^+ = [-a]^+$，即可恢复要求式 (24)（其中求和被替换为对速度的积分）。

在一个很短的时间间隔 Δt 内，系统要么沿直线匀速运动，

$$x(t+\Delta t) = x(t) + v\,\Delta t, \quad (32)$$

要么发生碰撞并改变速度。令 t' 为一个较晚的时刻。到 t' 为止未发生任何碰撞的概率，等于各个势能分量 α 的生存概率之积:

$$P_{\text{no–coll}}(t,t') = \prod_\alpha \exp\left(-\beta \int_t^{t'} \left[\frac{dU_\alpha(t')}{dt'}\right]^+ dt'\right), \qquad U_\alpha(t') = U_\alpha\big(x(t) + v(t'-t)\big). \quad (33)$$

使用逆变换抽样，通过抽取一个均匀随机数 $u \in$ （0，1）并求解下式，可得到与特定势能项 α 相关的碰撞时间:

$$\int_t^{t_{\text{coll},\alpha}} \left[\frac{dU_\alpha(t')}{dt'}\right]^+ dt' = -\beta^{-1}\,\ln u. \quad (34)$$

由此可为每种相互作用 α得到一个候选碰撞时间$t_{\text{coll},\ \alpha}$。

事件驱动提升式 Metropolis 蒙特卡罗方法 [2, 3, 5] 的步骤如下 s:

1. 对每个势能分量 α，通过求解式（34）计算下一个候选碰撞时间 $t_{\text{coll},\ \alpha}$。
2. 确定最早的碰撞时间 $t_{\text{coll}} = \min_\alpha t_{\text{coll},\alpha}$。
3. 将系统弹道式地移动到该时刻。
4. 更新参与引起该碰撞的相互作用 α 的粒子的速度。
5. 重新计算所有涉及速度已改变的粒子的势分量的碰撞时间。
6. 重复。

对于两体势，每次碰撞只更新两个粒子的速度；对于角度项或扭转项，通常涉及三个或四个粒子。因此，尽管完整势能具有全局性，碰撞仍严格局限于局部。

实际实现中会使用优先队列（事件堆）来存储所有候选碰撞时间。为了在大型分子系统中提高效率，通常会采用若干优化方法。邻居列表和细胞列表用于限制需要监测其碰撞的相互作用项数量 α，而界定势则提供计算成本低廉的碰撞时间下界，从而将昂贵的计算推迟到确有必要时再进行。按批次管理事件也很有优势：将选定时间范围内的碰撞时间插入堆中并按顺序维护，而更远未来的事件则不排序，仅在需要时才添加。达到时间范围终点后，再根据下一批事件重建事件堆。综合运用这些策略，事件驱动提升式蒙特卡罗算法便能保持良好的性能。

2.5 碰撞检测与事件调度

事件驱动蒙特卡罗的核心计算任务是求解式（34），以确定碰撞时间 t_{coll}。虽然形式上这是一个积分问题，但实际上只需找到最早时刻 $t > t_{\mathrm{now}}$，使势能的累积正向变化等于随机阈值 $E^* = -\beta^{-1}\ln u$。

对于大多数标准力场，相互作用势 U_α 取决于单个标量坐标 $q(t)$，例如成对距离 r_{ij}、键角 θ_{ijk}或二面角 ϕ_{ijkl}。时间导数可分解为 $\dot{U}_\alpha = (dU_\alpha/dq)(dq/dt)$。因此，积分区间由两个函数的根界定：势能极值点（$dU_\alpha/dq = 0$）和轨迹极值点（$dq/dt = 0$）。

势能极值点是势函数的静态属性。对应的 q_n 值可以预先计算并存储。请注意，如果势函数不可微，还必须追踪 U_α中的不连续点，同时记录极值点。轨迹极值点是弹道轨迹的几何属性，例如成对粒子的最近接距离，或角度的转折点。

这些极值点将 $U_\alpha(q)$划分为若干区间，其中一些区间不对积分产生贡献，因为 $\mathrm{sgn}(dU_\alpha/dq) = -\mathrm{sgn}(dq/dt)$（即势能沿轨迹递减）。从初始值 $U_\alpha(q_0)$出发，可以对满足 $U_\alpha(t) > 0$ 的区间内能量变化进行累加，并找出累积能量变化越过阈值 E^*的具体区间 $[q_n, q_{n+1}]$。对于这个区间，碰撞时的目标势能值为：

$$U_{\alpha,\mathrm{coll}} = U_\alpha(q_n) + E^* - \sum_{i=1}^{n}[U_\alpha(q_i) - U_\alpha(q_{i-1})]^+. \tag{35}$$

E^* 可能过大，因此在有效轨迹范围内不存在这样的$U_{\alpha,\ \mathrm{coll}}$；这仅表示在当前移动过程中不会与 U_α 发生碰撞。对于复杂势能，可以预先处理单调区间，并存储反函数 $q(U)$（例如通过样条插值），以便快速查找碰撞坐标 $q_{\mathrm{coll}} = q(U_{\alpha,\ \mathrm{coll}})$。

最后，求解几何方程 $q(t_{\mathrm{coll}}) = q_{\mathrm{coll}}$，以求得 t_{coll}。这个几何问题通常可以表述为求一个低次多项式的根。请注意，求出满足$dq/dt = 0$ 的边界 q_n 值，也涉及类似的求根问题。

事件驱动算法的一个关键特点是，任何一次碰撞都会改变相关粒子的速度，从而立即使涉及这些粒子的所有其他预定事件失效。在致密系统中，一个粒子可能参与数百次弱相互作用，但物理上实际发生的只有最早的事件；因此，为所有相互作用计算精确的碰撞时间会造成不必要的计算开销。高效实现主要依赖以下三种策略来尽量减少这种开销：

首先，不必立即求解精确的碰撞时间，而是可以先计算一个成本较低的下界 $t_{\mathrm{bound}} \le t_{\mathrm{coll}}$。然后将这个下界插入事件队列。当 t_{bound} 到达队列顶部时，再计算精确时间。如果精确时间仍是最早的，就执行该事件；否则，将新的精确时间重新插入队列。

其次，对于复杂或长程势能，即使计算下界的成本也很高，此时可以使用事件率的简化上界， $\Lambda(t) \geq \lambda(t) = \beta[\dot{U}_\alpha(t)]^+$。使用 $\Lambda(t)$ 高效生成候选事件，然后以概率 $\lambda(t)/\Lambda(t)$ 接受它们作为真实事件。被拒绝的候选事件会直接丢弃（即“稀疏化”）。这样就无需对势能求逆。

第三，对于弱长程相互作用，累积事件率较低。无需逐一追踪每个相互作用，可以将它们分组（例如，将两个空间单元之间的所有相互作用归为一组）。估算整个分组的上界速率 Λ_{group}。发生分组事件时，按照各相互作用的贡献所占比例，以相应概率选取一个特定相互作用 α。这正是 *Cell-Veto* 算法 [5], 的基础，它使得每个事件处理长程力的复杂度为 $O(1)$。

最后，事件队列本身也必须高效维护。如果粒子数量不太多（例如， N 低于 10^4），通常使用复杂度为 $O(\log\ N)$ 的标准二叉堆就足够了，前提是实现了高效的簿记，以便快速查找并移除失效的碰撞。不过，对于处理海量事件率的高度优化代码，通常更倾向于使用锦标赛树（例如 Paul's Queue）等专用结构，以实现 $O(1)$ 的摊销性能。

2.6 碰撞处理

有效碰撞的一个基本要求由式（30）给出：沿梯度 ∇U_α 方向的速度分量必须改变符号。反射自然满足这一条件。虽然从理论上说，全局平衡并不约束垂直于梯度的速度分量如何变化，但最简单、最合理的选择是保持这些分量不变。

反射的具体选择决定了不变速度分布 $\pi_v(v)$ 的形式。为确保与标准分子动力学（MD）程序及物理直觉相容，以麦克斯韦-玻尔兹曼分布为目标是有利的。这要求碰撞规则使总动能 $K = \sum_i \frac{1}{2} m_i \mathbf{v}_i^2$ 保持不变。作用于所有 i 参与相互作用 α的粒子速度的适当反射由下式给出：

$$\mathbf{v}_i' = \mathbf{v}_i - 2\frac{\sum_j \nabla_j U_\alpha \cdot \mathbf{v}_j}{\sum_j m_j^{-1} \nabla_j U_\alpha \cdot \nabla_j U_\alpha} m_i^{-1} \nabla_i U_\alpha. \tag{36}$$

在此选择下，事件驱动提升式 Metropolis 方案同时保持麦克斯韦-玻尔兹曼速度分布以及玻尔兹曼分布的构型部分。然而，由此产生的动力学与牛顿力学有根本差异。在标准 NVE 分子动力学中，总能量（ $H = K + U$ ）守恒，从而导致动能和势能之间持续交换。相比之下，此处定义的碰撞方法在每一次事件中都精确守恒动能。因此，动能与构型自由度之间不存在内在的平衡化机制；系统针对给定的逆温度 β 采样正确的构型分布，但总体速度大小仍冻结在其初始值。

为了正式定义一般的碰撞要求，将整个系统的速度 v表示为高维列向量 $\mathbf{v}$ 会很方便。对于势能贡献 α，碰撞要求是将式 (25) 专用于 U_α。我们引入投影算子 $\mathbf{P}$，在矩阵记法中，其中 ∇U_α 表示所有粒子的梯度向量，其形式为：

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{M}^{-1} \nabla U_\alpha \nabla U_\alpha^T}{\nabla U_\alpha^T \mathbf{M}^{-1} \nabla U_\alpha}. \tag{37}$$

这里，$\mathbf{M}$ 是一般的正定对称质量矩阵。

通过将确定性反射与正交分量的随机更新相结合，可以构造一种通过反射生成高斯速度分布的一般方案：

$$\mathbf{v}' = (\mathbf{I} - 2\mathbf{P})\,\mathbf{v} + (\mathbf{I}_\alpha - \mathbf{P})\left(-(1-a)\,\mathbf{v} + \sqrt{1-a^2}\,\mathbf{v}_G\right), \quad \text{where } -1 \leq a \leq 1. \tag{38}$$

在此表达式中，沿梯度方向的速度分量始终会被反射（第一项）。参数 a 用于调节垂直于梯度的速度分量的行为。$\mathbf{I}_\alpha$ 表示一个对角矩阵

其中参与相互作用的粒子对应的元素为 1 α ，其他元素为 0，从而确保更新具有局部性。$\mathbf{v}_G$ 是从目标高斯分布中抽取的速度向量。

选择 $a = 1$ 会产生确定性碰撞，并保持二次型 $\mathbf{v}^T\mathbf{M}\mathbf{v}$ 不变；如果 $\mathbf{M}$ 的对角线上包含粒子质量，就可以得到式（36）。选择 $a = -1$ 对应于所有粒子在 α中的速度完全反转。中间值会混入随机速度 $\mathbf{v}_G$。若从协方差为 $\langle \mathbf{v}_G \mathbf{v}_G^T \rangle = \beta^{-1}\mathbf{M}^{-1}$的分布中抽取 $\mathbf{v}_G$ ，则这一广义更新的不变分布 π_v 为麦克斯韦-玻尔兹曼分布。

2.7 事件链碰撞

用于硬球 [1] 的原始事件链蒙特卡罗（ECMC）算法可以理解为一般事件驱动提升式 Metropolis 方案的一种特定极限情况。其显著特点是，在任意时刻，“活动”状态仅限于单个粒子。

这种活动转移可以看作一种特殊类型的弹性碰撞，其中速度从一个粒子完全转移到另一个粒子。考虑一个系统，其中只有粒子 i 以速度 $\mathbf{v}$运动，而所有其他粒子都处于静止状态。该系统的高维速度向量为 $v = (0, \ldots, 0, \mathbf{v}_i, 0, \ldots, 0)$。标准的事件链碰撞会将这种活动转移给目标粒子 j，使得碰撞后的状态满足 $\mathbf{v}_i = 0$。

在直线事件链（SEC）方法中，速度直接转移：$\mathbf{v}^j = \mathbf{v}_i = \mathbf{v}$。也可以采用其他方式；例如，反射事件链（REC）方法会反转垂直于势梯度 ∇U_α 的速度分量。对于对势，我们有 $\nabla_j U_\alpha = -\nabla_i U_\alpha$。因此，如果转移过程中沿梯度方向的速度分量保持不变（即 $\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i U_\alpha = \mathbf{v}_j \cdot \nabla_i U_\alpha$），则基本碰撞条件式（30）会自动满足。

在硬球相互作用的极限下，“碰撞”成为硬约束。此时没有随机接受步骤；事件会在接触瞬间精确发生。由于该方案满足全局平衡，因此无需细致平衡即可保持正则分布。这使得一种独特的无拒绝模拟模式成为可能：纯确定性链。固定总链长（或持续时间），并依次遍历起始粒子后，整个模拟便成为一个确定性映射。

图 4 展示了这种确定性特征。图中显示了采用纯确定性 ECMC 演化的二维硬圆盘系统的轨迹。这些复杂、交织的轨迹并非由随机扰动产生，而是源于粒子堆积的严格几何结构以及碰撞伙伴的依次激活。全局平衡保证了平衡分布的不变性，但这种确定性马尔可夫链的不可约性（遍历性）则不那么显而易见。混合的最低要求是，提升变量的集合能够覆盖整个空间；例如，如图 4 所示，在 x 和 y 方向的运动之间交替。理论上很难推导出保证，但数值实验表明，简单的方案——例如交替改变方向或随机化链长——足以确保稠密流体中的遍历性。

若要将碰撞方案推广到简单两体势以外的情形，转换视角会很有帮助。我们不再将速度视为粒子之间传递的量，而是可以这样描述系统：所有 粒子都具有速度，但在任一时刻，只有一个粒子，即活动 粒子，带着该速度运动。其他粒子则保持静止，直至被激活。

通过这种视角转变，我们可以扩展单粒子 ECMC 方案的状态空间描述，使其适用于一般多体势，而不仅限于两体势。我们考虑一个状态 $(x,\ v,\ i)$，其中 x和 v 分别表示所有粒子的位置和速度，而索引 i 表示当前唯一活动的粒子。平衡分布可因式分解为：

$$\pi(x, v, i) = \pi_x(x)\,\pi_v(v)\ \frac{1}{N}. \tag{39}$$

这假设 在平衡态下，每个粒子成为活动粒子的概率都相等（$p = 1/N$ ）.

在此形式体系中，活动粒子 i 以速度 $\mathbf{v}_i$移动，产生碰撞率 $[\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i U_\alpha]^+$.

当与势能项 U_α 发生碰撞时，算法可以改变所有参与粒子的速度

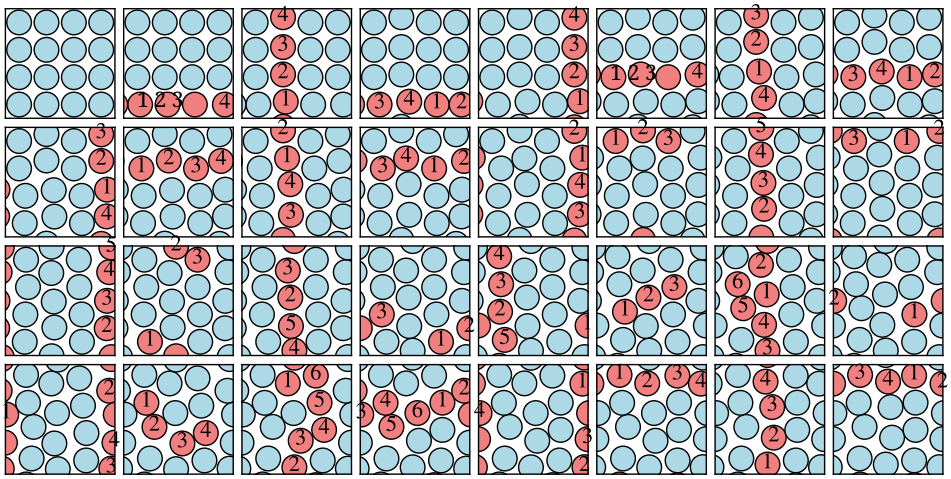


图 4：二维硬圆盘系统中纯确定性 ECMC 轨迹的可视化。模拟在晶格上初始化（盒子尺寸 $L = 8$，圆盘半径 $R = 0.9$）。算法按顺序遍历粒子，并以固定的事件链长度 $l = 0.7\sqrt{2}$ 移动它们。运动方向在 $+x$ 与 $+y$之间严格交替。由此产生的“编织”图案说明了该算法如何通过协作的多粒子链而非独立的随机游走来探索构型空间，同时仍使系统发生混合。

并且必须选择一个新的活动粒子。碰撞转移概率的一般条件为：

$$[-\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i U_\alpha]^+ \pi_v(v) = \sum_{(v',j)} [\mathbf{v}'_j \cdot \nabla_j U_\alpha]^+ \pi_v(v')\, T_\alpha((v',j) \to (v,i)|x). \tag{40}$$

此处，求和遍及 所有可能转移到当前状态 (v,i) 的碰撞前状态 (v',j) .

这个方程的一个初步解法是要求所有粒子都具有相同的固定速度向量$\mathbf{v}$，并且严格转移活动状态而不改变速度。式（40）于是简化为：

$$[-\mathbf{v} \cdot \nabla_i U_\alpha]^+ = \sum_j [\mathbf{v} \cdot \nabla_j U_\alpha]^+ T_\alpha(j \to i|x). \tag{41}$$

假设向粒子 i的转移概率仅取决于目标状态（而非源状态 j），我们得到以下选择规则：

$$T_\alpha(j \to i|x) = \frac{[-\mathbf{v} \cdot \nabla_i U_\alpha]^+}{\sum_k [\mathbf{v} \cdot \nabla_k U_\alpha]^+}. \tag{42}$$

该规则实际上会将活动转移到一个“拉着”系统下坡的粒子 i（因为只有当力与速度方向相反时，$[-\mathbf{v} \cdot \nabla_i U_\alpha]^+ \neq 0$ 才成立）。我们可以对所有可能的下一个粒子 i求和，以验证这确实是一个有效的概率分布。利用恒等式 $[-a]^+ = [a]^+ - a$ 以及势能的平移不变性（$\sum_i \nabla_i U_\alpha = 0$）：

$$\sum_i T_\alpha(j \to i|x) = \frac{\sum_i [-\mathbf{v} \cdot \nabla_i U_\alpha]^+}{\sum_k [\mathbf{v} \cdot \nabla_k U_\alpha]^+} = \frac{\sum_i [\mathbf{v} \cdot \nabla_i U_\alpha]^+ - \sum_i \mathbf{v} \cdot \nabla_i U_\alpha}{\sum_k [\mathbf{v} \cdot \nabla_k U_\alpha]^+} = 1. \tag{43}$$

该方案将直线事件链算法（SEC）推广到了平移不变的多体势，并在文献 [6] 中首次提出，随后在文献 [7]中应用于原子力场。

一种更一般的解允许任意粒子速度和速度变化。我们假设碰撞有两种可能结果：(1) 速度保持不变（$v \to v$），但发生活动转移；或 (2) 更新速度

（$v \to v'$），通过确定性反射（例如公式 (36)）并发生活动转移。对于 $\pi_v(v) = \pi_v(v')$，平衡条件变为：

$$[-\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i U_\alpha]^+ = \sum_j \left([\mathbf{v}_j \cdot \nabla_j U_\alpha]^+ T_\alpha((v,j) \to (v,i)|x) + [\mathbf{v}'_j \cdot \nabla_j U_\alpha]^+ T_\alpha((v',j) \to (v,i)|x) \right). \tag{44}$$

若再次假设转移概率仅取决于目标状态，我们便可得到选择规则：

$$T_\alpha((v,j) \to (v,i)|x) = T_\alpha((v',j) \to (v,i)|x) = \frac{[-\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i U_\alpha]^+}{\sum_k ([\mathbf{v}_k \cdot \nabla_k U_\alpha]^+ + [\mathbf{v}'_k \cdot \nabla_k U_\alpha]^+)}. \tag{45}$$

这定义了一条随机规则，用于处理由活动粒子 j触发的事件。算法会考虑所有参与 U_α 的粒子 k 以及两种可能的速度状态（v 和 v'）。它会选取一个新的活动粒子 i 和一种速度配置，其概率与该配置沿势能下降方向移动（降低势能）的速率成正比。关键的是，如果选中了未受踢动的速度状态 v，活动必须 转移到新的粒子，因为当前粒子 j 正沿势能上升方向移动（从而触发了事件），所以它的权重 $[-\mathbf{v}_j \cdot \nabla_j U_\alpha]^+$ 为零。

对所有目标状态（ v 和 v'）求和，即可验证归一化：

$$\begin{aligned} \sum_i \left(T_\alpha((v,j) \to (v,i)) + T_\alpha((v,j) \to (v',i)) \right) &= \frac{\sum_i ([-\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i U_\alpha]^+ + [-\mathbf{v}'_i \cdot \nabla_i U_\alpha]^+)}{\sum_k ([\mathbf{v}_k \cdot \nabla_k U_\alpha]^+ + [\mathbf{v}'_k \cdot \nabla_k U_\alpha]^+)} \\ &= 1 - \frac{\sum_i (\mathbf{v}_i \cdot \nabla_i U_\alpha + \mathbf{v}'_i \cdot \nabla_i U_\alpha)}{\sum_k ([\mathbf{v}_k \cdot \nabla_k U_\alpha]^+ + [\mathbf{v}'_k \cdot \nabla_k U_\alpha]^+)} = 1. \end{aligned} \tag{46}$$

额外项为零，这是因为反射规则（式 30）。按照式（36）进行反射时，该算法实现了弹性碰撞，在保持事件链无拒绝和全局平衡特性的同时，守恒总动能（以及线动量和角动量）。这一方法最初是为硬球模拟而引入的，称为“牛顿型” ECMC [8], ；在多体势的语境下，则称为广义牛顿型 ECMC [9]。

3 讨论

事件链蒙特卡罗（ECMC）及其推广的发展，标志着我们对采样算法的理解发生了范式转变。几十年来，细致平衡一直被视为不得不接受的代价：人们认为必须施加严格的对称性条件以保证算法正确，却因此付出了扩散随机游走动力学的代价（$x \sim \sqrt{t}$）。Bernard 等人的开创性工作 [1], 及其后续推广 [2, 3], 表明，这一限制是人为的。通过打破细致平衡，同时满足更为根本的全局平衡条件，可以构造出非可逆的弹道型马尔可夫链（$x \sim t$），其收敛至平衡态的速度可快出数个数量级。

这一突破之后，该领域的发展展现出清晰的思想演进脉络。Bernard 等人通过硬球研究提供了物理层面的概念验证，证明将拒绝“提升”为重新定向，可以产生持续概率流。Peters 和 de With [2] 通过引入随机事件率的概念，将这一方法推广至连续势能，实质上弥合了蒙特卡罗与事件驱动分子动力学之间的差距。最后，Michel、Kapfer 和 Krauth [3] 实现了严格的统一，阐明因子化 Metropolis 滤波器如何使这些连续时间过程能够被视为数学上精确的无穷小步。

这种效率促成了此前在计算上难以处理的科学突破。最突出的例子是二维硬圆盘熔化转变的解析。ECMC强大的采样能力使Bernard和Krauth得以确凿地确认六角相的存在，从而解决了一场持续数十年的争议 [10]。除硬球之外，该方法在致密聚合物熔体中也取得了成功，其中事件链能够在不发生位阻拒绝的情况下促进爬行式移动 [11]。最近，

Castagn`ede等人（2024年）运用ECMC研究了软球系统在极低温度下拉弗斯相的成核——在这一区域，标准分子动力学会因陡峭排斥势能所需的时间步长极小而停滞 [12]。在自旋系统中，该方法已被证明能够有效消除临界减速 [13, 14]。

至关重要的是，这些思想的影响远不止于物理学。Peters 和 de With 提出的 EDMC 形式体系 [2] 被统计学界改造为“弹跳粒子采样器”（BPS） [15]。这推动了用于贝叶斯推断的分段确定性马尔可夫过程（PDMP）迅速发展，为机器学习中高维后验分布的采样提供了一种强有力的新工具 [16]。这种跨学科应用印证了事件链思想的根本意义。

除了这些直接应用之外，本文回顾的广义框架还为随后出现的两项重大算法突破奠定了基础，解决了该领域长期存在的瓶颈。

首先，长程相互作用的处理曾是事件驱动方法的一大难题，传统上其计算复杂度随规模呈立方增长；单元排斥蒙特卡罗算法 [5]解决了这一问题。该方法将因子化 Metropolis 滤波器与界定势相结合，在不采用近似、截断或 Ewald 求和网格的情况下，使长程库仑系统中的每次粒子移动达到 $O(1)$复杂度。这实际上消除了将 ECMC 应用于带电原子系统时的计算上限。

其次，该方法的经验性加速效果近来已获得严谨的解析基础。早期的论证依赖于对动力学指数的启发式比较（z），而近期对提升型TASEP（完全非对称简单排斥过程）的研究 [17, 18] 已从数学上证明，非可逆提升链属于比其可逆对应链更快的普适类。这些解析结果证实，弛豫时间呈多项式级缩短（例如，从 $\sim N^{5/2}$降至 $\sim N^2$或更短），为复杂模拟中观察到的效率提供了理论依据。

然而，尽管理论和算法方面取得了这些突破，实际计算瓶颈依然存在。现代高性能计算主要依赖GPU和大规模并行。标准分子动力学（MD）通过域分解即可轻松扩展，而标准事件驱动蒙特卡罗本质上是串行的。这种串行特性有利于混合（算法加速），但会限制其在为数百万个线程同时运行而设计的硬件上的墙钟吞吐量。

4 展望

事件驱动蒙特卡罗的应用价值，在于解决其卓越的算法尺度（混合速率）与现代架构的硬件效率（每秒浮点运算次数）之间的矛盾。对于简单流体，高度优化的并行分子动力学很可能仍占主导地位。然而，对于玻璃态、受挫或极度致密的系统，如果系统仍被困在局部能谷中，再高的每秒浮点运算次数也无济于事。在这种情况下，事件驱动蒙特卡罗的无拒绝特性便带来了决定性优势。

我们已经看到，这些方法正从“玩具模型”迈向完整规模的分子模拟。近期研究已展示了对致密全原子系统（例如 SPC/Fw 水模型）的无近似采样 [7, 9]。与需要恒温器且存在时间步积分误差的标准分子动力学不同，这些现代事件驱动蒙特卡罗实现能够精确采样正则系综。此外，牛顿事件链 [8, 19] 和不可逆交换算法 [20, 21] 等变体也已问世，以进一步加快高密度区域中的动力学过程。

事件驱动的特性使大规模并行化变得困难。一种方法是使用多个线程并行处理事件。如果线程数远少于粒子数，就可以并行运行多个事件链，且很少发生干扰。这种策略已用于硬球的事件链模拟 [22]。他们的方法通过将线程数 k 保持在较低水平（$k \propto \sqrt{N}$），使活动链之间的碰撞在统计上很少发生，从而处理冲突。如果检测到冲突（视界违规），就会中止更新，并从上一个有效断点开始，使用新随机选取的活动粒子重新启动。尽管这种中止并重新启动流程的严格有效性证明起来较为复杂，但在冲突很少时，它似乎相当稳健。

另一种实现方式是从初始构型并行生成试探链，而不立即进行更新。所有链生成后，将涉及的粒子标记出来。被多次标记的粒子表示存在冲突，可通过确定优先级来解决。保留链中的有效片段，丢弃冲突部分并重新生成，直到解决所有冲突。只要线程数相对于 N仍然较少，在冲突稀疏时，这一流程就能快速收敛，并实现随线程数线性增长的加速。这种方法非常适合在 CPU 上进行多线程处理，但并行度有限且冲突解决过程复杂，因此不太适合用于 GPU 实现。

在事件驱动分子动力学（EDMD）及其无拒绝蒙特卡洛推广方法中，并行化一直是个棘手问题。研究文献探讨了在 EDMD 中采用乐观同步的空间分解方法 [23]。然而，这些方法并未得到广泛采用，因为其性能提升很少超过高度优化的串行实现，例如 DynamO 代码 [24]。

第二种并行化方法是采用“冻结”的棋盘格构型进行域分解 [25]。这种方法已成功应用于 Metropolis 蒙特卡洛，其中进入冻结区域的移动会被直接拒绝，以维持细致平衡。对于 ECMC，则改为在域边界处反射，而非拒绝移动 [26]。然而，冻结会深刻影响动力学。Metropolis 蒙特卡洛本质上具有扩散性，因此采用许多小域并频繁解除冻结十分有效，也很适合大规模 GPU 并行。相比之下，事件驱动蒙特卡洛依赖沿关联长度进行弹道运动来实现平衡化。当域变得过小时，这一弹道长度尺度会受到截断，运动的有效性质便退化为扩散，从而削弱算法优势。因此，EDMC 的域分解似乎只适用于 CPU 集群上的大域（混合使用 OpenMP/MPI），而不利于大规模 GPU 应用；但在高密度系统中或许例外，因为无拒绝带来的益处可能超过弹道输运的损失。

大多数关于事件驱动蒙特卡罗的研究都聚焦于单粒子事件链蒙特卡罗。将其推广到分子系统的做法十分优雅，而针对长程力的单元格否决法也极具创新性。然而，性能基准测试 [9]表明，执行时间主要消耗在这些长程力上。尽管 ECMC 在概念上十分优美，要让它在通用原子模拟中与高性能分子动力学代码相抗衡，仍是一项重大挑战。

第二条鲜少有人探索的途径，是将事件驱动蒙特卡罗与分子动力学结合起来。这种方法将采用全粒子变体 [2] ，如同硬球事件驱动分子动力学那样，让所有粒子同时运动。尽管这种动力学不同于牛顿力学，却具有定义良好的速度，并能保持玻尔兹曼分布。我们设想，未来可采用算子分裂方案：由标准分子动力学处理长程力，而由 EDMC 处理局部相互作用。在这样的方案中，先由长程分子动力学力更新速度，再执行键合力的 EDMC 传播步骤，依此类推。仅对键合相互作用应用 EDMC，即可并行处理各个分子（例如采用多线程）。由于键合相互作用很强，这种做法可以用统计上精确、无拒绝的蒙特卡罗方法取代临时设置的约束（如 SHAKE），或缓解时间步长限制。此类混合方法还可用于将粗粒化结构反向映射为原子结构：分子动力学常因重叠而失败，而 EDMC 则能通过碰撞自然地消解冲突。

总而言之，Bernard、Krauth 和 Wilson 的工作带来的启示是：蒙特卡罗中的“拒绝”并非失败，而是一个机遇。通过将拒绝提升为新的轨迹，EDMC 将能量势垒转化为运动的引擎。事件链蒙特卡罗为模拟具有硬相互作用的致密系统作出了重大贡献。尽管由于并行化方面的障碍，EDMC 不太可能转变为大规模原子模拟领域的通用竞争方法，但仍有许多尚未探索的应用领域，它有望在其中带来变革性影响。

A 一维提升链中的混合速率

为了说明扩散式 Metropolis动力学与对流式提升动力学在定性上的差异，考虑一个具有均匀分布 $\pi_i = 1/N$ 的简单一维链。纯对流运动缺乏混合，且不是不可约的：该链分解为彼此不连通的循环。对于这种一维情况，一个简单的补救方法是引入

一个较小的碰撞概率 ε。相应的平衡流可写为

$$\pi((v,x_i);(v,x_{i+v})) = (1-\varepsilon)\,\min(\pi(v,x_i),\,\pi(v,x_{i+v}))\,, \qquad v=\pm 1, \tag{47}$$

$$\pi((v,x_i);(-v,x_i)) = \varepsilon\,\pi(v,x_i) + (1-\varepsilon)\,[\pi(v,x_i) - \pi(v,x_{i+v})]^+, \tag{48}$$

其中 $[a]^+ \equiv \max(0,a)$。

对于均匀分布 $\pi(v,x_i) = 1/(2N)$，它们简化为特别简单的转移概率

$$T((v,x_i)\to(v,x_{i+v})) = 1-\varepsilon, \qquad T((v,x_i)\to(-v,x_i)) = \varepsilon, \tag{49}$$

它们本质上是 Diaconis、Holmes 和 Neal [27] 所引入的动力学。在有限链的边界处，翻转方向的概率则被设为 1。

为比较混合速率，考虑一个具有 N 个节点的周期链。由于平移不变性，特征模态可以写成

$$p^n(v,x_j) = z^n a_v\,\exp(ikx_j)\,, \tag{50}$$

其中 k 为 $2\pi/L$ 的整数倍，且 $x_j = j(L/N)$。将此拟设代入主方程，并使用式 (49) 中的转移概率，可得到特征值

$$z = (1-\varepsilon)\,\cos(k\Delta x) + i\,\sqrt{(1-2\varepsilon) - (1-\varepsilon)^2\cos^2(k\Delta x)}. \tag{51}$$

为了快速收敛，$|z|$ 应尽可能小。当平方根为虚数时，$|z| = 1-2\varepsilon$，这表明较大的 ε 是有利的。然而，一旦平方根的自变量变为正值，特征值便获得实部，且 $|z|$ 再次增大。最优的 ε 出现在最小非零波数 $k\Delta x = 2\pi/N$ 处平方根的自变量为零时，从而得到

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{2}\,\sin(\pi/N) + \cos(2\pi/N) - 1}{\cos(2\pi/N)} \approx \frac{\sqrt{2}\,\pi}{N}, \tag{52}$$

因此

$$|z|^n \approx \exp\left(-\frac{2\sqrt{2}\pi\,n}{N}\right). \tag{53}$$

因此，弛豫时间随 N 呈线性增长。这应与均匀分布下的标准 Metropolis方案形成对比，此时 $T(x_i\to x_{i\pm1}) = 1/2$，而最慢的傅里叶模态满足

$$z = \cos\left(\frac{2\pi}{N}\right) \approx 1 - \frac{2\pi^2}{N^2}, \qquad |z|^n \approx \exp\left(-\frac{2\pi^2 n}{N^2}\right), \tag{54}$$

其表现出熟悉的扩散弛豫时间，该时间按 N^2 的尺度增长。

另一个颇具启发性的测试案例是一个单调分布，其中对所有 i 都有 $\pi_{i+1} < \pi_i$，这对应于严格递增的势能。在这种情况下，沿上坡方向的移动具有有限的碰撞概率，而下坡移动则不会发生碰撞。因此，一旦提升链切换到下坡分支，它就会确定性地向低势能方向返回。这种强烈的方向不对称性是违反细致平衡的提升链所具有的特征。

参考文献

[1] E. P. Bernard、W. Krauth 和 D. B. Wilson，《硬球系统的事件链蒙特卡罗算法》，*Physical Review E*，80:056704，2009年，https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.80 .056704。

[2] E. A. J. F. Peters 和 G. de With，《一般势的无拒绝蒙特卡罗采样》，*Physical Review E*，85:026703，2012，https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.85.026703。

[3] M. Michel、S. C. Kapfer 和 W. Krauth，《广义事件链蒙特卡罗：从无穷小步构建无拒绝的全局平衡算法》，《化学物理学杂志》，140:054116，2014，https://pubs.aip.org/jcp/article/140/5/054116/73740/Generalized-event-chain-Monte-Carlo-Constructing.[4] V. I. Manousiouthakis 和 M. W. Deem，《蒙特卡罗模拟不需要严格的细致平衡》，《化学物理学杂志》，110:2753–2756，1999年。[5] S. C. Kapfer 和 W. Krauth，《适用于长程系统的单元排斥蒙特卡罗算法》，Physical Review E，94:031302，2016年，https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.94.031302。[6] J. Harland、M. Michel、T. Kampmann 和 J. Kierfeld，《适用于三粒子及多粒子相互作用的事件链蒙特卡罗算法》，EPL，117，2017 年。[7] M. Faulkner、L. Qin、A. Maggs 和 W. Krauth，《采用不可逆马尔可夫链进行全原子计算》，《化学物理学杂志》，149，2018年。[8] M. Klement 和 M. Engel，《利用牛顿事件链实现硬球的高效平衡化》，《化学物理学杂志》，150，2019年。[9] P. H¨ollmer、A. Maggs 和 W. Krauth，《利用非可逆马尔可夫链对SPC/Fw 水模型进行快速、无近似的分子模拟》，《科学报告》，14，2024年。[10] E. Bernard 和 W. Krauth，《二维中的两步熔化：一级液体-六方相转变》，《物理评论快报》，107，2011年。[11] T. Kampmann、H.-H. Boltz 和 J. Kierfeld，《利用事件链算法模拟致密聚合物熔体》，《化学物理学杂志》，143，2015年。[12] A. Castagn`ede、L. Filion 和 F. Smallenburg，《软球的快速事件驱动模拟：从动力学到拉弗斯相成核》，《化学物理学杂志》，161，2024年。[13] M. Michel、J. Mayer 和 W. Krauth，《经典连续自旋模型的事件链蒙特卡罗》，EPL，112，2015年。[14] Y. Nishikawa、M. Michel、W. Krauth 和 K. Hukushima，《海森堡模型的事件链算法：动态标度的证据》，《物理评论E：统计、非线性与软物质物理》，92，2015年。[15] A. Bouchard-Cˇot´e、S. J. Vollmer 和 A. Doucet，《弹跳粒子采样器：一种非可逆、无拒绝的马尔可夫链蒙特卡罗方法》，《美国统计学会杂志》，113:855–867，2018年。[16] J. Bierkens、P. Fearnhead 和 G. O. Roberts，《之字形过程与面向大数据贝叶斯分析的超高效采样 1》，《统计年鉴》，47:1288–1320，2019年。[17] F. Essler 和 W. Krauth，《提升型TASEP：加速多粒子马尔可夫链的可解范例》，《物理评论X》，14，2024年。[18] S. C. Kapfer 和 W. Krauth，《快速趋近平衡的不可逆局部马尔可夫链》，《物理评论快报》，119:240603，2017年，https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLe tt.119.240603。[19] M. Klement、S. Lee、J. Anderson 和 M. Engel，《多面体粒子的牛顿事件链蒙特卡罗与碰撞预测》，《化学理论与计算杂志》，17:4686–4696，2021年。[20] Y. Nishikawa、F. Ghimenti、L. Berthier 和 F. V. Wijland，《软球玻璃的不可逆交换算法》，Physical Review E，111，2025年。[21] F. Ghimenti、L. Berthier、G. Szamel 和 F. V. Wijland，《致密液体中的不可逆玻尔兹曼采样器：弱耦合近似与模耦合理论》，Physical Review E，110，2024年。[22] B. Li、S. Todo、A. Maggs 和 W. Krauth，《采用局部时间的多线程事件链蒙特卡罗》，《计算物理通讯》，261，2021年。

[23] S. Miller 和 S. Luding，《并行化的事件驱动分子动力学》，《计算物理学杂志》，193(1):306–316，2004年。[24] M. N. Bannerman、R. Sargant 和 L. Lue，《DynamO：一款免费的 O(N) 通用事件驱动分子动力学模拟器》，《计算化学杂志》，32(15):3329–3338，2011年。[25] J. Anderson、E. Jankowski、T. Grubb、M. Engel 和 S. Glotzer，《面向图形处理器上多粒子模拟的大规模并行蒙特卡罗》，《计算物理学杂志》，254:27–38，2013年。[26] T. Kampmann、H.-H. Boltz 和 J. Kierfeld，《用于致密硬球和聚合物系统的并行事件链算法》，《计算物理学杂志》，281:864–875，2015年。[27] P. Diaconis、S. Holmes 和 R. M. Neal，《非可逆马尔可夫链采样器的分析》，《应用概率年刊》，10:726–752，2000年，
h
t
t
p
s://
projecteuclid.org/journals/annals-of-applied-probability/volume-10/issue-3/Analysis-of-a-nonreversible-Markov-chain-sampler/10.1214/aoap/1019487508.full。