

TEST EXISTENCE VNĚJŠÍHO POLE V ISINGOVĚ MODELU

MARTIN JANŽURA A KAREL VRBENSKÝ

ABSTRAKT. The null hypothesis for the external field in the Ising model is tested. The proposed test is based on the pseudolikelihood approach and works both from theoretical and practical points of view even in the phase transition area.

Резюме. В работе изучается тест нулевой гипотезы для внешнего поля в модели Изинга. Предложенный тест основан на принципе максимального псевдоправдоподобия и работает хорошо с теоретической и практической точки зрения даже в области фазовых переходов.

1. ÚVOD

Isingův model je považovaný za nejjednodušší netriviální pravděpodobnostní model pro statistickou analýzu binárních dat v rovině (obecněji prostoru), například pro binární (černo-bílé) obrazy. Přes svou relativní jednoduchost však přináší většinu komplikací, které souvisejí se zobecňováním výsledků z dimenze 1 do dimenzí vyšších. V pozadí všech obtíží leží neexistence přirozeného lineárního uspořádání a následná neexistence rozložitelných (rekurentních, acyklických, součinných) modelů typu Markovova řetězce.

Markovské modely ve vyšší dimenzi (mezi něž např. Isingův model náleží) zobecňují vlastnost “oboustranné markovosti” (založené na pojmu “okolí”), která je v dimenzi 1 ekvivalentní s obvyklou “jednostrannou markovostí”. Tato ekvivalence však ve vyšší dimenzi nemá přímou analogii, což ovšem není dáno nějakou chybnou konstrukcí či nešikovnou parametrizací. Jedná se o přirozené vlastnosti náhodných polí, které se u náhodných procesů v dimenzi 1 prostě nevyskytují. Podstatným kvalitativním rozdílem je existence tzv. fázových přechodů, které mají velmi dobrou interpretaci z hlediska statistické fyziky. Matematicky to znamená existenci různých nekonečněrozměrných distribucí (náhodných polí) se stejným systémem konečněrozměrných podmíněných marginálních rozdělení. Podrobněji viz Georgii (1988) nebo Ellis (1985).

Takový fenomén přináší ovšem komplikace i při statistické analýze. Problémy, s nimiž se lze setkat při analýze založené na věrohodnostním přístupu, lze rozdělit zhruba do dvou (vzájemně souvisejících) oblastí:

- (1) výpočetní – absence analytických formulek, absence realizovatelných výpočetních algoritmů;
- (2) teoreticko-matematické – neregulárnost (nespojitosť, nehladkost, nejednoznačnost) stěžejních charakteristik, neplatnost limitních vět.

Ukážeme, že analýza založená na pseudověrohodnostním přístupu (Besag (1975), Comets (1992), Comets a Janžura (1998), Janžura (1999a)) umožňuje vypořádat se

2000 *Mathematics Subject Classification*. Primary 62M40; Secondary 65C40.

Klíčová slova. Isingův model, analýza obrazu, Gibsovská náhodná pole, MCMC.

Tato práce vznikla za podpory grantu GAČR 201/00/1149.

s oběma typy problémů. Konkrétně zde předvedeme, jak lze testovat hypotézu (ne-) existence vnějšího pole (jednoho z parametrů) v Isingově modelu. Problém budeme řešit jako Úlohu testování složené hypotézy; navrženou testovou statistiku lze relativně snadno numericky vypočítat a metoda funguje jak teoreticky tak prakticky i v oblasti fázových přechodů.

2. ISINGŮV MODEL

2.1. Definice. Dvourozměrný Isingův model je pravděpodobnostní rozdělení $P^{h,J}$ na prostoru $\{-1, +1\}^{Z^2}$, kde Z označuje množinu celých čísel. Je to tedy rozdělení náhodného procesu (pole) v diskrétní rovině, s hodnotami v dvoubodové množině $\{-1, +1\}$. Rozdělení náhodného procesu bývá zpravidla definováno prostřednictvím systému konečněrozměrných marginálních rozdělení. Ta bývají někdy explicitně známa (jako u gaussovských procesů) nebo mohou být vyjádřena pomocí určité rekurentní (např. součinné) formule (jako u markovských řetězců). Nic takového zde není k dispozici, proto bude Isingův model $P^{h,J}$ určen pomocí “přibližných” vztahů:

$$(I) \quad P_V^{h,J}(x_V) = \exp \left\{ h \cdot \sum_{t \in V} x_t + J \sum_{t,s \in V: \|t-s\|=1} x_t x_s - c(V, h, J) + O(\|\partial V\|) \right\}$$

pro každé $x_V \in \{-1, 1\}^V$ a konečnou $V \subset Z^2$, kde $h, J \in R$ jsou reálné parametry, $P_V^{h,J}$ je marginální rozdělení na $\{-1, +1\}^V$ a

$$c(V, h, J) = \log \sum_{x_V \in \{-1, 1\}^V} \exp \left\{ h \sum_{t \in V} x_t + J \sum_{t,s \in V: \|t-s\|=1} x_t x_s \right\}$$

je normalizační konstanta. Pracujeme s normou $\|t - s\| = \max_{i=1,2} |t_i - s_i|$; tudíž $\|t - s\| = 1$, jsou-li t, s nejbližší sousedé v horizontálním nebo vertikálním směru, a $\partial V = \{s \in V^c; \min_{t \in V} \|t - s\| = 1\}$ je nejbližší okolí množiny V .

Vliv parametrů h, J na vlastnosti rozdělení je zřejmý:

- (1) Pokud $h > 0$, budou pravděpodobnější konfigurace s převahou hodnot $+1$, pro $h < 0$ nastává opak. Tento parametr má v modelech statistické fyziky (zejména v modelu ferromagnetu) smysl “vnějšího pole”, které ve směru svého působení natáčí jednotlivé “spiny”.
- (2) Jestliže $J > 0$, budou pravděpodobnější konfigurace s převahou stejných hodnot v sousedících bodech. Tento parametr má tedy význam interakce mezi sousedy, je kladný pro ferromagnet a záporný pro antiferromagnet.

Výše uvedená definice I pro Isingův model je ekvivalentní s následující podmínkou:

$$(II) \quad P_{t|\{t\}^c}^{h,J}(x_t|x_{\{t\}^c}) = P_{t|\partial t}^{h,J}(x_t|x_{\partial t}) = \frac{\exp\{x_t (h + J \sum_{s \in \partial t} x_s)\}}{2 \cosh(h + J \sum_{s \in \partial t} x_s)},$$

kde $P_{t|\{t\}^c}$ je podmíněné rozdělení veličiny v bodě $t \in Z^2$ při zadaných hodnotách ve všech ostatních bodech diskrétní roviny Z^2 , $\partial t = \{s \in Z^2; \|s - t\| = 1\}$ je nejbližší okolí bodu $t \in Z^2$. Vzhledem k tomu, že podmíněné rozdělení závisí pouze na nejbližších sousedech, má rozdělení $P^{h,J}$ vlastně (prostorovou) markovskou vlastnost.

Na první pohled je možná překvapivé, že “přibližné” určení v definici I je ekvivalentní s “přesnými” vztahy v definici II. Důkaz implikace $I \Rightarrow II$ skutečně není zcela triviální, vyplývá z variačního principu pro gibbsovská náhodná pole (viz např. Ellis (1985), kapitola III.8, Georgii (1988), kapitola 15.4, nebo Janžura (1999b)).

2.2. Fázové přechody. Otázka existence pravděpodobnostní distribuce $p^{h,J}$ s výše uvedenými vlastnostmi není obtížná, řešení zde vyplývá přímo ze známých vlastností měr na kompaktních prostorech. Mnohem závažnější je problém jednoznačnosti. Jestliže pro dané parametry h, J splňuje podmínku I (nebo II) více než jedna pravděpodobnostní distribuce, nastává jev nazývaný ve statistické fyzice fázovým přechodem. (To odpovídá přírodním úkazům, kdy se při určité teplotě může vyskytnout daná látka v různých skupenstvích.)

Problém fázových přechodů je poměrně dobře popsán pro případ Isingova ferromagnetu, tj. když $J \geq 0$. Potom $P^{h,J}$ je dáno jednoznačně, pokud

$$h \neq 0 \quad \text{a současně} \quad J \geq 0$$

nebo

$$h = 0 \quad \text{a současně} \quad 0 \leq J \leq J_c.$$

Pro $h = 0$ a $J > J_c$ platí

$$P^{h,J} \in \{ \alpha P^{h,J,+} + (1 - \alpha) P^{h,J,-}; \alpha \in [0, 1] \},$$

kde $P^{h,J,+}$ a $P^{h,J,-}$ jsou tzv. čisté fáze; všechny ostatní distribuce splňující definici I (nebo II) jsou jejich konvexní kombinací.

Přitom kritická hodnota parametru J je dána jako

$$J_c = \frac{1}{2} \log(1 + \sqrt{2}) \doteq 0,44$$

Označíme-li

$$\mu^{h,J} = E^{P^{h,J}}[X_0] = P^{h,J}(1) - P^{h,J}(-1)$$

potom při pevném $J \geq 0$ je

$$\mu^{h,J}$$

spojitá rostoucí funkce h , záporná na intervalu $(-\infty, 0)$ a kladná na $(0, +\infty)$. Přitom platí $\mu^{0,J} = 0$ pokud $J \leq J_c$ a $\mu^{0,J} \in [\mu^{0,J,-}, \mu^{0,J,+}]$ pro $J > J_c$, kde

$$\mu^{0,J,+} = -\mu^{0,J,-} = [1 - (\sinh(2J))^{-4}]^{1/8}.$$

Při pevném $J > J_c$ se pak v bodě $h = 0$ funkce $\mu^{h,J}$ stává multifunkcí. Podobně viz např. Ellis (1985), kapitola V.5.

2.3. Úloha. V tomto článku budeme řešit statistickou úlohu, jak v rámci Isingova modelu testovat hypotézu

$$H_0 : h = 0$$

na základě dat $\hat{x}_{V_n} = (\hat{x}_t)_{t \in V_n} \in \{-1, +1\}^{V_n}$, kde např. $V_n = [-n, n]^2 \subset Z^2$ je (čtvercová) pozorovací oblast. Příklady takových datových souborů vidíme pro $h = 0$ a $J = 0,125$ resp. $J = 0,625$ na obr. 1a) resp. 1b).

Obr. 1a)

Obr. 1b)

Vzhledem k interpretaci parametru h budeme říkat, že testujeme (ne-)existenci vnějšího pole v Isingově modelu.

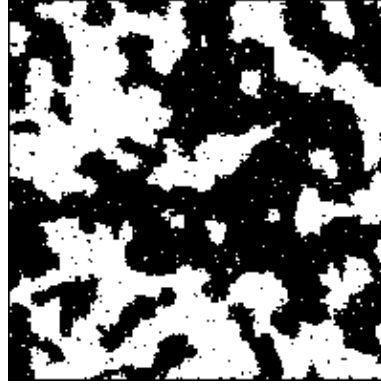
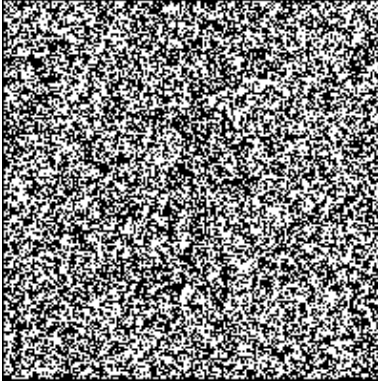
Vidíme, že ani jedna z hodnot $+1, -1$ není parametrem favorizována, intuitivně by se dalo očekávat, že se za platnosti hypotézy budou obě vyskytovat přibližně stejně často, tedy, označíme-li

$$\bar{X}_n = |V_n|^{-1} \sum_{t \in V_n} \hat{x}_t,$$

mělo by být

$$P^{0,J}(-\varepsilon < \bar{X}_n < \varepsilon) \rightarrow 0 \quad \text{pro } n \rightarrow \infty$$

při každém $\varepsilon > 0$.



Tato představa je však pro $J > J_c$ vyvrácena existencí fázových přechodů, neboť máme zaručeno pouze (díky větě o velkých odchylkách – viz např. Janžura (1987))

$$P^{0,J}(\mu^{0,J,-} - \varepsilon < \bar{X}_n < \mu^{0,J,+} + \varepsilon) \rightarrow 1 \quad \text{pro } n \rightarrow \infty$$

při každém $\varepsilon > 0$. Hypotézu bychom tudíž mohli zamítnout jenom v případě naprosto extrémních hodnot, neboť např. už pro $J = 0,5$ máme $\mu^{0,J,+} \doteq 0,9$.

Je proto evidentní, že test hypotézy H_0 nemůže být založen na statistice \bar{X}_n ani jiném odhadu střední hodnoty. Úlohu zformulujeme jako problém testování složených hypotéz v obecnějším modelu gibbovských náhodných polí a řešení ukážeme v následující kapitole.

3. GIBBOVSKÁ NÁHODNÁ POLE

3.1. Definice. Nechť \mathcal{X}_0 je konečný prostor stavů a Z^d je d -rozměrná celočíselná mříž se systémem konečných podmnožin $\mathcal{V} = \{V \subset Z^d; |V| < \infty\}$.

Zobrazení $\Phi : \mathcal{X}_0^V \rightarrow R$ pro nějaké pevné $V \in \mathcal{V}$ nazveme potenciálem. Množinu V můžeme považovat za “řád” (nebo “rozsaň”) potenciálu a potenciál s konečným řádem budeme nazývat lokálním.

Pravděpodobnostní míru P na $\mathcal{X}_0^{Z^d}$ nazveme gibbovským náhodným polem vzhledem k potenciálu Φ , píšeme $P \in G(\Phi)$, jestliže jsou dána konečněrozměrná podmínečná rozdělení

$$P(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = \Pi_\Lambda^\Phi(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) \quad \text{pro každé } \Lambda \in \mathcal{V}, \quad x = (x_\Lambda, x_{\Lambda^c}) \in \mathcal{X}_0^{Z^d},$$

kde

$$\Pi_\Lambda^\Phi(x_\Lambda | x_{\Lambda^c}) = N_\Lambda^\Phi(x_{\Lambda^c})^{-1} \exp \left\{ \sum_{j \in \Lambda - V} \Phi(x_{V+j}) \right\}$$

s normalizační konstantou

$$N_\Lambda^\Phi(x_{\Lambda^c}) = \sum_{y_\Lambda \in \mathcal{X}_0^\Lambda} \exp \left\{ \sum_{j \in \Lambda - V} \Phi(y_{(V+j) \cap \Lambda} x_{(V+j) \cap \Lambda^c}) \right\}$$

(zde značíme $\Lambda - V = \{\lambda - v; \lambda \in \Lambda, v \in V\} = \{j \in Z^d; (j + V) \cap \Lambda \neq \emptyset\}$).

Poznámka 1. Všimněme si, že

$$\Pi_{\Lambda}^{\Phi}(x_{\Lambda}|x_{\Lambda^c}) = \Pi_{\Lambda}^{\Phi}(x_{\Lambda}|x_{\partial\Lambda}),$$

tedy Φ_{Λ} závisí ve skutečnosti pouze na hodnotách $x_{\bar{\Lambda}}$ kde $\bar{\Lambda} = \Lambda \cup \partial\Lambda$ a $\partial\Lambda = (\Lambda - V + V) \setminus \Lambda$. To znamená, že i obecně gibbovské náhodné pole (s lokálním potenciálem Φ) má prostorovou markovskou vlastnost příslušného řádu. \square

Poznámka 2. Mohli bychom opět zformulovat ekvivalentní definici, zobecňující definici I. Isingovu modelu, tedy

$$P_{\Lambda}(x_{\Lambda}) = \exp \left\{ \sum_{j:j+V \subset \Lambda} \Phi(x_{V+j}) - c(\Lambda, \Phi) + \delta(|\partial V|) \right\}$$

pro každé $\Lambda \in \mathcal{V}$. \square

Systém markovských jader (lokálních charakteristik)

$$\{\Pi_{\Lambda}^{\Phi}\}_{\Lambda \in \mathcal{V}}$$

je evidentně konzistentní, nic tudíž nebrání, abychom s pomocí kompaktnosti prostoru $\mathcal{X}_0^{Z^d}$ ukázali existenci gibbovského pole $P \in G(\Phi)$, tedy obecně platí

$$|G(\Phi)| \geq 1.$$

Současně však problém jednoznačnosti je poměrně velmi komplikovaný. Množina gibbovských polí může obsahovat i pole neergodická, ale i zcela nestacionární (přestože lokální charakteristiky Π_{Λ}^{Φ} jsou homogenní, tj. invariantní na posunutí v prostoru Z^d). Např. v Isingově modelu jsou čisté fáze $P^{0,J,+}$ a $P^{0,J,-}$ ergodické, jejich kombinace pak jsou stacionární neergodické. Nestacionární stavy se vyskytují až ve vyšších dimenzích $d \geq 3$, kdy spolu mohou koexistovat různé fáze v různých částech prostoru. Podrobněji viz Georgii (1988) nebo Ellis (1985).

3.2. Parametrická rodina a odhad parametrů. Uvažujme nyní vektor potenciálů

$$\Phi^1, \dots, \Phi^p : \mathcal{X}_0^V \rightarrow R$$

a označme pro každé $\theta \in R^p$

$$\Phi^{\theta} = \sum_{i=1}^p \theta_i \Phi^i.$$

Budeme uvažovat parametrickou rodinu

$$\{P^{\theta}\}_{\theta \in R^p}$$

kde $P^{\theta} \in G(\Phi^{\theta})$ pro každé $\theta \in R^p$.

Představujme si věc tak, že P^{θ} je (v případě $|G(\Phi^{\theta})| > 1$) nějaké pevně vybrané gibbovské pole vzhledem k potenciálu Φ^{θ} . Nemáme tudíž předem zaručeno, že P^{θ} je ergodické nebo alespoň stacionární.

Pro rozumné řešení statistických úloh potřebujeme podmínku identifikovatelnosti, která bude mít v tomto případě následující tvar:

$$\text{jestliže } G(\Phi^{\theta}) = G(\Phi^{\bar{\theta}}), \quad \text{potom } \theta = \bar{\theta}.$$

Poznámka 3. Tato podmínka je poněkud silnější než obvyklá podmínka lineární nezávislosti; redukuje se však na ni, pokud doplníme nějakou normalizační podmínku (např. se omezíme na tzv. vakuové potenciály), která není na úkor obecnosti. Problém ekvivalentnosti potenciálů (potenciály jsou ekvivalentní, jestliže $G(\Phi) = G(\Psi)$) zde nebude detailně řešen, viz např. Georgii (1988), Kapitola 2, nebo Janžura (1997). Užitečná a relativně jednoduše ověřitelná podmínka zní takto:

$$\Phi \text{ a } \Psi \text{ jsou ekvivalentní, jestliže } \Pi_{\{0\}}^{\Phi}(\cdot|\cdot) = \Pi_{\{0\}}^{\Psi}(\cdot|\cdot).$$

□

Máme tedy parametrickou rodinu pravděpodobnostních rozdělání, která ovšem obecně není regulární. Viděli jsme, že zobrazení

$$\theta \mapsto P^{\theta}$$

nemusí být dokonce ani spojitý, natož pak hladký. To ovšem značně komplikuje konstrukci a vyšetřování vlastností maximálně věrohodného odhadu, jehož výpočet navíc vede na úlohu, pro niž neexistuje efektivní deterministický numerický algoritmus. Je sice možné využít pravděpodobnostní metodu “stochastického gradientu” (viz Younes (1988)), ale ta je výpočetně velmi náročná. Navíc neregulárnost parametrické rodiny souvisí i s neplatností standardní verze centrální limitní věty v plné obecnosti, což bychom potřebovali pro odvození asymptotického rozdělení příslušné testové statistiky.

Budeme tedy postupovat jinak a testy (složených) hypotéz založíme na odhadu maximálně pseudověrohodném. Pro daný datový soubor $\hat{x}_{V_n} \in \mathcal{X}_0^{V_n}$ a pevně zvolené $\Lambda_0 \in \mathcal{V}$ definujeme

$$\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} = \operatorname{argmax}_{\theta \in R^p} PL_n^{\Lambda_0}(\theta)$$

kde

$$PL_n^{\Lambda_0}(\theta) = \sum_{j \in V_n(\Lambda_0)} \log \Pi_{\Lambda_0}^{\theta}(\hat{x}_{\Lambda_0+j} | \hat{x}_{\partial\Lambda_0+j})$$

a

$$V_n(\Lambda_0) = \{j \in Z^d; j + \bar{\Lambda}_0 \subset V_n\}.$$

Pro jednoduchost píšeme Π^{θ} místo $\Pi^{\Phi^{\theta}}$.

Je známo, že maximálně pseudověrohodný odhad $\hat{\theta}^{n, \Lambda_0}$ existuje (s pravděpodobností rostoucí k 1), je konzistentní (viz např. Comets (1992)) a také asymptoticky normální – Comets a Janžura (1998). (Není však plně eficientní, jak ukazuje srovnání s Rao–Cramérovou mezí tam, kde je to možné, tzn. v oblasti regularity (jednoznačnosti) – Janžura (1997)).

Poznámka 4. Přímo na asymptotické normalitě odhadu $\hat{\theta}^{n, \Lambda_0}$ je možné založit test jednoduché hypotézy $H_{00} : \theta = \theta^0$. Pro složenou hypotézu $H_0 : \theta \in \Theta$ však potřebujeme obecnější verzi centrální limitní věty. Není cílem této práce zabývat se problematikou limitních vět, zdůrazníme pouze, že díky fázovým přechodům jsme v netypické situaci. Jsme schopni dokázat centrální limitní větu pouze ve “studentizované” formě

$$(\Sigma^n)^{-\frac{1}{2}} S_n \implies \mathcal{N}_p(0, I),$$

kde ale odhad kovarianční matice Σ^n sám o sobě nekonverguje.

3.3. **Testování složených hypotéz.** Budeme tedy testovat hypotézu

$$H_0 : \theta \in \Theta_0,$$

kde $\Theta_0 = \{\theta \in R^p; \theta_1 = \dots = \theta_q = 0\}$ pro nějaké $q < p$.

Testovou statistiku založíme na porovnání odhadu za hypotézy s odhadem v saturovaném modelu. Označme tedy navíc

$$\hat{\theta}_0^{n, \Lambda_0} = \operatorname{argmax}_{\theta \in \Theta_0} PL_n^{\Lambda_0}(\theta)$$

a hledejme takovou posloupnost matic $M_n^{\Lambda_0}(\theta)$, při které

$$\hat{\chi}_{n, \Lambda_0}^2 = \left(\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} - \hat{\theta}_0^{n, \Lambda_0} \right)^T M_n^{\Lambda_0} \left(\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} \right) \left(\hat{\theta}^{n, \Lambda_0} - \hat{\theta}_0^{n, \Lambda_0} \right) \implies \chi_q^2.$$

Vynecháme-li ze značení závislost na n a Λ_0 , dostaneme

$$M(\theta) = B(\theta)_{[1, p] \times [1, q]} [C(\theta) A(\theta) C(\theta)^T]^{-1} B(\theta)_{[1, q] \times [1, p]},$$

kde

$$\begin{aligned} A(\theta) &= \sum_{t, s \in V_n(\Lambda_0) : (t + \bar{\Lambda}_0) \cap (s + \bar{\Lambda}_0) \neq \emptyset} \nabla \log \Pi_{\Lambda_0 + t}^\theta(\cdot | \cdot) \nabla \log \Pi_{\Lambda_0 + s}^\theta(\cdot | \cdot)^T, \\ B(\theta) &= \sum_{t \in V_n(\Lambda_0)} \nabla^2 \log \Pi_{\Lambda_0 + t}^\theta(\cdot | \cdot) \end{aligned}$$

a

$$C(\theta) = \left(-B(\theta)_{(1, q] \times [q+1, p]} [B(\theta)_{[q+1, p] \times [q+1, p]}]^{-1}, I_{[1, q] \times [1, q]} \right).$$

Důkaz je založen na platnosti centrální limitní věty ve tvaru

$$(C_n(\theta) A_n(\theta) C_n(\theta)^T)^{-\frac{1}{2}} C_n(\theta) S_n(\theta) \implies \mathcal{N}_q(0, I)$$

kde

$$S_n(\theta) = \sum_{t \in V_n(\Lambda_0)} \nabla \log \Pi_{\Lambda_0 + t}^\theta(\cdot | \cdot).$$

Podrobněji viz Janžura (1999a), pro $p = q$ také Comets a Janžura (1998).

4. TEST EXISTENCE VNĚJŠÍHO POLE V ISINGOVĚ MODELU

Budeme nyní tvrzení předchozí části specifikovat pro úlohu formulovanou v odstavci 2.3.

Mějme tedy opět stavový prostor $\mathcal{X}_0 = \{-1, 1\}$ a dimenzi $d = 2$. Pro parametrickou rodinu považujeme za řád potenciálů množinu $V = \{(0, 0), (0, 1), (1, 0)\}$ a konkrétní báze bude dána vektorem

$$\begin{aligned} \Phi_1(x_V) &= x_{(0,0)} \\ \Phi_2(x_V) &= x_{(0,0)} x_{(0,1)} \\ \Phi_3(x_V) &= x_{(0,0)} x_{(1,0)}, \end{aligned}$$

tedy $p = 3$. Pro $\theta = (\theta_1, \theta_2, \theta_3) \in R^3$ máme tedy např.

$$\begin{aligned} &\Pi_{\{0\}}^\theta(x_{\{0\}} | x_{\partial 0}) = \\ &= \frac{\exp\{\theta_1 x_{(0,0)} + \theta_2 x_{(0,0)} (x_{(0,1)} + x_{(0,-1)}) + \theta_3 x_{(0,0)} (x_{(1,0)} + x_{(-1,0)})\}}{2 \cosh\{\theta_1 + \theta_2 (x_{(0,1)} + x_{(0,-1)}) + \theta_3 (x_{(1,0)} + x_{(-1,0)})\}}. \end{aligned}$$

Porovnáme-li tento výraz s funkcí v definici II v odstavci 2.1, shodují se pro $h = \theta_1$, $J = \theta_2 = \theta_3$. V části 2 byl totiž uvažován izotropní model, kde vertikální a horizontální interakce jsou stejné. Zde však budeme pracovat s obecnějším modelem, který připouští anizotropii.

Poznámka 5. Kdybychom chtěli dostat přesně izotropní model, vzali bychom $p = 2$ a bázi

$$\begin{aligned}\tilde{\Phi}_1(x_V) &= x_{(0,0)} \\ \tilde{\Phi}_2(x_V) &= x_{(0,0)} (x_{(0,1)} + x_{(1,0)}).\end{aligned}$$

□

Poznámka 6. Snadno ověříme, že podmínka identifikovatelnosti je splněna. Využijme Poznámku 3 a předpokládejme, že $\Pi_{\{0\}}^\theta(\cdot|\cdot) = \Pi_{\{0\}}^\beta(\cdot|\cdot)$. Nyní při $x_{(0,1)} + x_{(-1,0)} = 0$ a současně $x_{(0,1)} + x_{(0,-1)} = 0$ dostaneme

$$\frac{\exp\{\theta_1 x_{(0,0)}\}}{2 \cosh\{\theta_1\}} = \frac{\exp\{\beta_1 x_{(0,0)}\}}{2 \cosh\{\beta_1\}}$$

a odtud $\theta_1 = \beta_1$. Podobně dostaneme i ostatní rovnosti a tudíž $\theta = \beta$. □

Pro maximálně pseudověrohodný odhad zvolme pro jednoduchost $\Lambda_0 = \{0\}$. Potom pro pozorovací oblast V_n dostaneme $V_n(\Lambda_0) = V_n(\{0\}) = \{t; \bar{t} \subset V_n\}$.

Hypotéza $H_0 : h = 0$, jak byla formulována v části 2.3, může být přepsána v podobě

$$H_0 : \theta \in \Theta_0,$$

kde $\Theta_0 = \{\theta \in R^3; \theta_1 = 0\}$, tedy $q = 1$.

Na základě pozorovaných dat $\hat{x}_{V_n} \in \{-1, 1\}^{V_n}$ získáme odhady $\hat{\theta}^{n, \{0\}}$ resp. $\hat{\theta}_0^{n, \{0\}}$ pomocí procedury popsané v odstavcích 3.2 a 3.3. A do vzorečků pro matice $A(\theta)$ resp. $B(\theta)$ dosadíme

$$\begin{aligned}\nabla \log \Pi_{\{t\}}^\theta(x_t|x_{\partial t}) &= (x_t - z(t, \theta)) y_t \\ \nabla^2 \log \Pi_{\{t\}}^\theta(x_t|x_{\partial t}) &= (1 - z(t, \theta)^2) y_t y_t^T\end{aligned}$$

kde

$$y_t = \begin{pmatrix} 1 \\ x_{t+(0,1)} + x_{t-(0,1)} \\ x_{t+(1,0)} + x_{t-(1,0)} \end{pmatrix}$$

a

$$\begin{aligned}z(t, \theta) &= E^{P^\theta} [x_t|x_{\partial t}] = \Pi_{\{t\}}^\theta(1|x_{\partial t}) - \Pi_{\{t\}}^\theta(-1|x_{\partial t}) = \\ &= \operatorname{tgh}(\theta_1 + \theta_2(x_{t+(0,1)} + x_{t-(0,1)}) + \theta_3(x_{t+(1,0)} + x_{t-(1,0)})).\end{aligned}$$

Všechny výpočty jsou poměrně snadno numericky realizovatelné.

5. PŘÍKLAD

Zkoušeli jsme účinnost testu pomocí simulovaných dat. Pro simulaci jsme použili metodiku MCMC (Markov Chain Monte Carlo), jmenovitě Gibbsův sampler (viz např. Winkler (1995)). Abychom ověřili použitelnost asymptotických výsledků na konečné rozsahy výběru, volili jsme postupně

$$\text{I. } V_n = 50 \times 50 \quad \text{II. } V_n = 100 \times 100 \quad \text{III. } V_n = 200 \times 200.$$

Pro každou hodnotu parametru jsme opakovali experiment 100 krát. V následujících tabulkách jsou uvedeny četnosti zamítnutí hypotézy H_0 na hladině 5 % při některých hodnotách parametru. V tabulce 1 zůstává fixní hodnota $\theta_1 = h = 0$, mění se pouze parametr $\theta_2 = \theta_3 = J$. Hypotéza by tedy zamítána být neměla (očekávaný počet zamítnutí by neměl překročit 5). V tabulce 2 zůstane fixní hodnota $\theta_2 = \theta_3 = J = 0,5$ a mění se parametr $\theta_1 = h$. Hypotéza by neměla být zamítána pro $h = 0$ a naopak měla být zamítána pro $h > 0$.

	$J = 0$	0,25	0,5	0,75	1	1,25
$V_n = 50 \times 50$	0	0	0	0	3	25
100×100	0	0	0	0	0	17
200×200	0	0	0	0	0	6

Tabulka 1: $\theta_1 = h = 0$, $\theta_2 = \theta_3 = J$

	$h = 0$	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
$V_n = 50 \times 50$	0	13	88	90	100	100
100×100	0	67	100	100	100	100
200×200	0	99	100	100	100	100

Tabulka 2: $\theta_1 = h$, $\theta_2 = \theta_3 = J = 0,5$

Z výsledků vidíme, že metoda funguje i po překročení kritické hodnoty $J_c \doteq 0.44$. A to tak, že zřejmě naprosto bezpečně pro dostatečný rozsah výběru 200×200 . Chyby v obou tabulkách jsou způsobeny různými důvody. V tabulce 1 se zdá, že interakce $J = 1,25$ je již natolik silná, že dochází k velkým nepřesnostem už při simulaci (připomeňme, že metoda MCMC je pouze přibližná). V tabulce 2 zřejmě nastává klasický efekt nedostatečného datového souboru: pro slabé vnější pole není rozsah 50×50 dostatečně velký, aby byla hypotéza o jeho absenci zamítnuta.

Poznámka 7. Efekt fázových přechodů (a tudíž nenulové střední hodnoty při $h = 0$) se může při simulaci docílit volbou okrajové podmínky, tj. fixní konfigurace na “hranici” množiny V_n . Volbou konstantní okrajové podmínky generovaná data vykazovala empirické střední hodnoty až v rozsahu $\pm 0,3$. Přesto i takové vychýlení ve prospěch $+1$ nebo -1 nemá vliv na účinnost metody, jak ukázaly dodatečné experimenty. Výše uvedené výsledky byly spočteny při datech generovaných s náhodnou okrajovou podmínkou, kde byly výchyly přirozeně menší, maximálně $\pm 0,1$.

LITERATURA

- [1] Besag J. (1975): Statistical analysis of non-lattice data. *The Statistician* 24, 179–195.
- [2] Comets F. (1992): On consistency of a class of estimators for exponential families of Markov random fields on a lattice. *Ann. Statist.* 20, 455–468.
- [3] Comets F., Janžura M. (1998): A central limit theorem for conditionally centred random fields with an application to Markov fields. *J. Appl. Prob.* 35, 608–621.
- [4] Ellis R. S. (1985): *Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics*. Springer–Verlag, New York.

- [5] Georgii H. O. (1988): Gibbs Measures and Phase Transitions. Berlin, De Gruyter.
- [6] Janžura M. (1987): Large deviations theorem for Gibbs random fields: In: Proc. 5th Pannonian Symp. on Math. Statist. (W. Grossmann, J. Mogyorodi, I. Vincze and W. Wertz, eds.), Akadémiai Kiadó, Budapest 1987, pp. 97–112.
- [7] Janžura M. (1997): Asymptotic results in parameter estimation for Gibbs random fields. Kybernetika 33, 2, 133–159.
- [8] Janžura M. (1999a): A central limit theorem for conditionally centred random fields with an application to testing statistical hypotheses. To appear in: Proceedings of Colloquium on Limit Theorems in Probability and Statistics, Hungary 1999.
- [9] Janžura M. (1999b): On the concept of asymptotic Rényi distances for random fields. Kybernetika 5, 3, 353–366.
- [10] Winkler G. (1995): Image Analysis. Random Fields and Dynamic Monte Carlo Methods. Springer-Verlag, Berlin.
- [11] Younes L. (1988): Estimation and annealing for Gibbsian fields. Ann. Inst. Henri Poincaré 24, 2, 269–294.

ÚTIA AV ČR, POD VODÁRENSKOU VĚŽÍ 4, 18208 PRAHA 8
E-MAIL: janzura@utia.cas.cz