ODHAD TLAKU V ISINGOVĚ MODELU

Antonín Otáhal

ÚTIA ČSAV, Pod vodárenskou věží 4, 182 08 Praha 8

Gibbsovským (a zejména markovským) náhodným polím je věnována značná pozornost jednak ve statistické fyzice, jednak (hlavně v posledních letech) ve statistickém zpracování obrazů, viz např. Ripley (1989). Jednou z důležitých veličin charakterizujících gibbsovské pole je tzv. tlak, který do značné míry shrnuje podstatné informace o gibbsovském poli. V rámci statistické fyziky je tlak zkoumán hlavně z "kvalitativního" hlediska; např. nehladkosti tlaku jako funkce výchozích parametrů svědčí o přítomnosti fázových přechodů apod. Ve statistice náhodných polí (a tedy i zpracování obrazů) má svou důležitost "kvantitativní" hledisko, tj. snaha o (alespoň přibližné) stanovení hodnoty tlaku - tato hodnota může sloužit např. jako základ "pseudolikelihood" odhadů, neboť asymptoticky aproximuje normovací konstantu konečněrozměrných podmíněných rozdělení.

Práce se zabývá odvozením jisté třídy horních odhadů tlaku v Isingově modelu, který představuje jeden z nejjednodušších netriviálních modelů gibbsovského markovského náhodného pole.

1. Isingův model

Náhodné pole X je systém náhodných veličin indexovaný množinou $\mathbb{Z}^2$, kde $\mathbb{Z}$ je množina všech celých čísel, $X = (X(m,n): (m,n) \in \mathbb{Z}^2)$. Náhodné pole X je binární, jestliže každá náhodná veličina v X může nabývat hodnot pouze z dvouprvkové stavové množiny $B = \{b_1, b_2\}$.

Isingův model můžeme stručně charakterizovat jako stacionární markovské náhodné pole s interakcemi omezenými na nejbližší sousedy. Podrobný výklad tohoto pojmu je možno najít např. v monografii Prestona (1976), 5.17. Zde uveďme jen jeho stručný nástin.

Položme $B = \{0,1\}$ (k ekvivalentní teorii vede volba $B' = \{-1,1\}$, která je častá ve statistické fyzice). Pak v Isingově modelu X je podmíněná pravděpodobnost

$$P\Big(X(0,0) = b(0,0) \mid \{X(m,n) = b(m,n): (m,n) \neq (0,0)\}\Big)$$

rovna podmíněné pravděpodobnosti

$$P\Big(X(0,0) = b(0,0) \mid \{X(m,n) = b(m,n): (m,n) \in \Delta\}\Big), \tag{1}$$

kde $\Delta = \{(m,n) \in \mathbb{Z}^2: |m| + |n| = 1\}$. Označme $b_\Delta = (b(m,n): (m,n) \in \Delta)$ a (1) pišme ve zkratce jako $p(b(0,0)|b_\Delta)$. Isingův model je pak charakterizován explicitním vztahem pro (1)

$$p\Big(b(0,0)\,|b_\Delta\Big) = \frac{\exp\{b(0,0)\cdot\varphi(b_\Delta)\}}{1 + \exp\{\varphi(b_\Delta)\}}$$

kde

$$\varphi(b_\Delta) = x + y\Big(b(1,0) + b(-1,0)\Big) + z\Big(b(0,1) + b(0,-1)\Big)$$

a reálná čísla x, y, z jsou určující parametry Isingova modelu, tzv. interakce, nebo též potenciály.

2. Definice tlaku

Pro přirozená čísla M, N označme

$$A(N) = \Big\{(\alpha(n):\ n = 1,\dots,N):\ \alpha(n) \in B \text{ pro všechna } n\Big\},$$

$$A(M,N) = \Big\{(\alpha(n):\ m = 1,\dots,M;\ n = 1,\dots,N):\ \alpha(m,n) \in B \text{ pro všechna } m,n\Big\},$$

kde $B = \{0,1\}$, tj. $A(N)$ (resp. $A(M,N)$) označuje množinu všech binárních posloupností (resp. "matic") délky N (resp. na tabulce o rozměrech M, N).

Pro interakce x, y, z a přirozená čísla M, N definujeme tzv. statistickou sumu v Isingově modelu (při periodické okrajové podmínce - viz např. Sinai (1982), I.3):

$$(2)\quad Z(M,N;x,y,z) = \sum_{\alpha\in A(M,N)} \exp\Big\{\sum_{m=1}^{M}\sum_{n=1}^{N} \alpha(m,n)\Big[x + y\cdot\alpha(m+1,n) + z\cdot\alpha(m,n+1)\Big]\Big\},$$

kde klademe $M+1 \equiv 1$, $N+1 \equiv 1$.

Tlak p je dán vztahem

$$(3)\qquad p(x,y,z) = \lim_{M,N\to\infty} \frac{1}{M\cdot N} \ln Z(M,N,;x,y,z).$$

Z obecných úvah o tzv. gibbsovských náhodných polích plyne existence (dvojné) limity v (3), viz Ruelle (1970), věta 3.4.

3. Algebraické vyjádření tlaku

Nechť $H = (H_{jk})$ je čtvercová matice řádu 2^N. Pak její prvky je možné indexovat hierarchicky, $H = (H_{\alpha,\beta}:\ \alpha,\beta \in A(N))$. Přitom $H_{\alpha,\beta} = H_{j(\alpha),j(\beta)}$, kde $j(\alpha) = \Sigma_{k=0}^{N-1}\ \alpha(N-k)\ 2^k$.

Jsou-li např. matice $H(1),\dots,H(N)$ čtvercové řádu 2, $H(n) = (H_{jk}(n):\ j,k = 0,1)$ pro $n = 1,\dots,N$, je každý element jejich kroneckerovského součinu $G = H(1) \otimes \dots \otimes H(N)$ pomocí hierarchických indexů zapsán

$$(4)\qquad G_{\alpha,\beta} = \prod_{j=1}^{N} H_{\alpha_j,\beta_j}(j).$$

Pro každé přirozené číslo N definujme permutační matici $P = P(N)$ řádu 2^{2N} těmito vztahy hierarchických indexů $\alpha,\ \beta \in A(2N)$:

$$(5)\qquad P_{\alpha,\beta} = \begin{cases} 1 & \text{pro } \alpha_1 = \beta_2,\ \alpha_2 = \beta_3,\dots,\ \alpha_{2N-1} = \beta_{2N},\ \alpha_{2N} = \beta_1, \\ 0 & \text{jinak.} \end{cases}$$

Matici P(N) je možno ekvivalentně charakterizovat tak, že pro libovolné matice $H(1),\dots,H(2N)$ řádu 2 platí

$$(6)\quad P(N)\cdot\Big[H(1)\otimes\dots\otimes H(2N)\Big] = \Big[H(2N)\otimes H(1)\otimes\dots\otimes H(2N-1)\Big]\cdot P(N)$$

kde "." na obou stranách značí obvyklý součin matic.

Definujme matici

$$(7)\qquad F = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ e^{x} & e^{x+z} & e^{x+y} & e^{x+y+z} \end{pmatrix}$$

a označme $F^{N\otimes}$ N-tou kroneckerovskou mocninu matice F, dále označme $G(N) = P(N)\cdot F^{N\otimes}$.

Porovnáním (2), (5) a (7) dostaneme

$$(8)\qquad Z(M,N;x,y,z) = \mathrm{Tr}\ G(N)^M,$$

tj. statistická suma je vyjádřena jako stopa M-té (obvyklé) mocniny matice G(N).

Z tvaru matice F a z toho, že P(N) je permutační matice, plyne, že největší vlastní číslo λ_N matice G(N) je jednoduché a kladné (podle Perron-Frobeniovy věty, protože zřejmě všechna nenulová vlastní čísla matice G(N) jsou zároveň všemi nenulovými vlastními čísly matice, která vznikne z G(N) vynecháním všech nulových řádků i příslušných sloupců a která má všechny prvky kladné).

Z této skutečnosti a z toho, že limita v (3) existuje jako dvojná, limitním přechodem $M \to \infty$ v (3) po dosazení podle (8) plyne

$$p(x,y,z) = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \ln \lambda_N . \tag{9}$$

4. Odhad tlaku

Nechť U, V jsou libovolné regulární čtvercové matice řádu 2. Označme

$$W = (U \otimes V)^{N\otimes}.$$

Největší vlastní číslo λ_N matice G(N) je stejné jako největší vlastní číslo matice $G'(N) = W \cdot G(N) \cdot W^{-1}$, pro kterou vzhledem k (4), (5) platí

$$G'(N) = P(N) \cdot (F')^{N\otimes},$$

kde

$$F' = (V \otimes U) \cdot F \cdot (U \otimes V)^{-1}.$$

Označme $\mu(U,V)$ největší vlastní číslo matice $(F')^* \cdot F'$, kde $(F')^*$ značí matici adjungovanou k F'.

Věta. Pro libovolné regulární čtvercové matice U, V řádu 2 platí

$$p(x,y,z) \le \tfrac{1}{2} \ln \mu(U,V) .$$

Důkaz. Podle známých nerovností mezi vlastními a singulárními hodnotami čtvercových matic (viz např. Gantmacher (1966), IX.12) platí $\lambda_N \le \sqrt{\mu}$, kde μ je největší vlastní číslo matice $G'(N)^* \cdot G'(N)$. Tvrzení věty tedy plyne z toho, že $P(N)^* \cdot P(N)$ je jednotková matice a že největší vlastní číslo kroneckerovského součinu matic je součinem největších vlastních čísel jednotlivých matic.

Literatura

Gantmacher F. R. (1966): Teorija matric. Nauka, Moskva.

Preston C. (1976): Random Fields. Lecture Notes in Mathematics 534, Springer-Verlag, Berlin - Heidelberg - New York.

Ripley B. D. (1989): Gibbsian interaction models. In: Spatial Statistics; Past Present and Future ed. D. A. Griffith, IMAGE.

Ruelle D. (1978): Thermodynamic Formalism. Addison-Wesley, London - Amsterdam - Don Mills.

Sinai Ja. G. (1982): Theory of Phase Transitions: Rigorous Results. Akadémiai Kiadó, Budapest.