2.6. Holleyn kriteeri Markov-ketjujen teorian sovelluksena

Tarkastelemme tässä todennäköisyysmittoja joukolla $\Omega = \{-1,+1\}^V$, missä V on jokin äärellinen joukko. Esimerkiksi äärellisellä graafilla $G = (V, E)$ määrite Ising-mallin todennäköisyysavaruus on tätä muotoa, ja alla käsiteltävällä Holleyn kriteerillä on tärkeitä sovelluksia muun muassa Ising-malliin.

Joukolla $\Omega = \{-1,+1\}^V$ on luonteva osittaisjärjestys $\preceq$: kun $\underline{\sigma}, \underline{\tau} \in \Omega$ merkitsemme

$$\underline{\sigma} \preceq \underline{\tau} \qquad \text{jos ja vain jos} \qquad \sigma_v \leq \tau_v \quad \forall v \in V$$

Sanomme, että funktio $f \colon \Omega \to \mathbb{R}$ on kasvava, jos aina kun $\underline{\sigma} \preceq \underline{\tau}$ pätee $f(\underline{\sigma}) \leq f(\underline{\tau})$. Tapahtumaa $E \subset \Omega$ sanotaan kasvavaksi, jos sen indikaattorifunktio $\mathbb{1}_E$ on kasvava.

Jos ν_1, ν_2 ovat todennäköisyysmittoja joukolla Ω, niin sanomme, että

$$\nu_1 \leq \nu_2$$

jos ja vain jos kaikilla kasvavilla tapahtumilla E pätee $\nu_1[E] \leq \nu_2[E]$. Helposti nähdään, että päällisin puolin vahvempi vaatimus

$$\int_\Omega f \, \mathrm{d}\nu_1 \leq \int_\Omega f \, \mathrm{d}\nu_2 \qquad \text{kaikilla kasvavilla } f \colon \Omega \to \mathbb{R}$$

on yhtäpitävää tämän kanssa.

Jos $\underline{\sigma} \in \{-1,+1\}^V$ on konfiguraatio ja $w \in V$, niin merkitään $\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup +1}$ ja $\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup -1}$ niitä konfiguraatioita, jotka on saatu muuttamalla kohdassa w arvo $+1$:ksi tai -1:ksi, vastaavasti, eli

$$\sigma_v^{w \rightharpoonup \pm 1} = \begin{cases} \pm 1 & \text{jos } v = w \\ \sigma_v & \text{jos } v \neq w \end{cases}.$$

Lause V.31. *Olkoot $\nu, \tilde{\nu}$ todennäköisyysmittoja joukolla $\Omega = \{-1,+1\}^V$, joille kaikkien yksiöiden todennäköisyydet ovat positiiviset. Oletetaan, että aina kun $\underline{\sigma} \preceq \underline{\tau}$ pätee*

$$\tilde{\nu}\left[\left\{\underline{\tau}^{w \rightharpoonup +1}\right\}\right] \nu\left[\left\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup -1}\right\}\right] \;\geq\; \tilde{\nu}\left[\left\{\underline{\tau}^{w \rightharpoonup -1}\right\}\right] \nu\left[\left\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup +1}\right\}\right]. \tag{V.13}$$

Silloin on olemassa jakaumien ν ja $\tilde{\nu}$ koplaus, satunnainen pari $(X, \tilde{X}) \in \Omega \times \Omega$, jonka marginaalit ovat $X \sim \nu$ ja $\tilde{X} \sim \tilde{\nu}$, ja jolle pätee $X \preceq \tilde{X}$.

Erityisesti pätee $\nu \leq \tilde{\nu}$.

Todistuksesta on luontevaa erottaa seuraava aputulos.

Lemma V.32. *Olkoon ν todennäköisyysmitta joukolla $\mathcal{S} = \Omega = \{-1,+1\}^V$, jolle kaikkien yksiöiden todennäköisyydet ovat positiiviset. Olkoon lisäksi $c > 0$ riittävän pieni siten, että kaavat*

$$P_{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup +1}, \underline{\sigma}^{w \rightharpoonup -1}} = c \qquad\qquad P_{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup -1}, \underline{\sigma}^{w \rightharpoonup +1}} = c \, \frac{\nu[\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup +1}\}]}{\nu[\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup -1}\}]}$$

$$P_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}} = 0 \quad \textit{jos} \quad \#\{v \in V \mid \sigma_v \neq \tau_v\} > 1 \qquad\qquad P_{\underline{\sigma}, \underline{\sigma}} = 1 - \sum_{\underline{\tau} \neq \underline{\sigma}} P_{\underline{\sigma}, \underline{\tau}}$$

määrittelevät stokastisen matriisin $P \in \mathbb{R}^{\mathcal{S}\times\mathcal{S}}$, jolle $P_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}} > 0$ kaikilla $\underline{\sigma} \in \mathcal{S}$. Silloin siirtymätodennäköisyysmatriisia P vastaava Markov-ketju on redusoitumaton aperiodinen Markov-ketju, jonka stationaarinen jakauma on ν.

Todistus. Todistamme stationaarisuuden käyttäen Lemman V.19 "detailed balance" ehtoa. Haluamme siis osoittaa, että kaikilla $\underline{\sigma}, \underline{\tau} \in \mathcal{S}$ pätee

$$\nu[\{\underline{\sigma}\}]\ P_{\underline{\sigma},\underline{\tau}} = \nu[\{\underline{\tau}\}]\ P_{\underline{\tau},\underline{\sigma}}.$$

siirtymätodennäköisyyksien kaavan (V.18) perusteella molemmat puolet ovat nollia jos $\#\,\{v \in V | \sigma_v \neq \tau_v\} > 1$. Jos $\underline{\sigma} = \underline{\tau}$, niin molemmat puolet ovat joka tapauksessa samat. Riittää siis tarkistaa ehto tapauksessa, jossa konfiguraatiot $\underline{\sigma}$ ja $\underline{\tau}$ eroavat tasan yhdessä kohdassa $w \in V$, jolloin ehto voidaan kirjoittaa muodossa

$$\nu[\{\underline{\sigma}^{w\rightharpoonup+1}\}]\ P_{\underline{\sigma}^{w\rightharpoonup+1},\underline{\sigma}^{w\rightharpoonup-1}} \ = \ \nu[\{\underline{\sigma}^{w\rightharpoonup-1}\}]\ P_{\underline{\sigma}^{w\rightharpoonup-1},\underline{\sigma}^{w\rightharpoonup+1}},$$

ja tämän ehdon molempien puolten nähdään tuottavan $c\nu[\{\underline{\sigma}^{w\rightharpoonup+1}\}]$ suoraan lemman siirtymätodennäköisyyksien P määritelmästä. Stationaarisuus $\nu P = \nu$ seuraa.

Koska kaikilla $\underline{\sigma}$ pätee $P_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}} > 0$, on Markov-ketju selvästi aperiodinen.

Olkoon $\underline{\sigma}, \underline{\tau} \in \mathcal{S}$, ja $m = \#\,\{v \in V | \sigma_v \neq \tau_v\}$. Silloin on olemassa jono konfiguraatioita

$$\underline{\sigma} = \underline{\sigma}^{(0)}, \underline{\sigma}^{(1)}, \underline{\sigma}^{(2)}, \ldots, \underline{\sigma}^{(m-1)}, \underline{\sigma}^{(m)} = \underline{\tau}$$

siten, että jokainen saadaan edellisestä muuttamalla konfiguraatiota tasan yhdessä kohdassa, $\#\left\{v \in V | \sigma_v^{(j-1)} \neq \sigma_v^{(j)}\right\} = 1$. Koska kaikki siirtymätodennäköisyydet $P_{\underline{\sigma}^{(j-1)},\underline{\sigma}^{(j)}}$ ovat positiivisia, näemme, että m askeleen siirtymätodennäköisyys

$$(P^m)_{\underline{\sigma},\underline{\tau}} \geq P_{\underline{\sigma}^{(0)},\underline{\sigma}^{(1)}}\, P_{\underline{\sigma}^{(1)},\underline{\sigma}^{(2)}} \cdots P_{\underline{\sigma}^{(m-1)},\underline{\sigma}^{(m)}} > 0$$

on myös positiivinen. Markov-ketju on siis redusoitumaton. □

Lauseen V.31 todistus. Määrittelemme Markov-ketjun $(X(t), \tilde{X}(t))_{t\in\mathbb{Z}_{\geq 0}}$ joukolla

$$\mathcal{S} = \left\{(\underline{\sigma}, \underline{\tau}) \in \Omega \times \Omega \;\middle|\; \underline{\sigma} \preceq \underline{\tau}\right\}.$$

siirtymätodennäköisyydet $P_{(\underline{\sigma},\underline{\tau}),(\underline{\sigma}',\underline{\tau}')}$ määrittelemme seuraavasti. Jos $(\sigma_v, \tau_v) = (\sigma'_v, \tau'_v)$ kaikilla $v \in V \setminus \{w\}$, niin määrittelemme siirtymätodennäköisyyden $P_{(\underline{\sigma},\underline{\tau}),(\underline{\sigma}',\underline{\tau}')}$ alla taulukoidun mukaisesti

(σ_w, τ_w)	(σ'_w, τ'_w)	$P_{(\underline{\sigma},\underline{\tau}),(\underline{\sigma}',\underline{\tau}')}$
$(+1, +1)$	$(-1, +1)$	0
$(+1, +1)$	$(-1, -1)$	c
$(-1, +1)$	$(+1, +1)$	$c\,\frac{\nu[\{\underline{\sigma}'\}]}{\nu[\{\underline{\sigma}\}]}$
$(-1, +1)$	$(-1, -1)$	c
$(-1, -1)$	$(+1, +1)$	$c\,\frac{\nu[\{\underline{\sigma}'\}]}{\nu[\{\underline{\sigma}\}]}$
$(-1, -1)$	$(-1, +1)$	$c\left(\frac{\tilde{\nu}[\{\underline{\tau}'\}]}{\tilde{\nu}[\{\underline{\tau}\}]} - \frac{\nu[\{\underline{\sigma}'\}]}{\nu[\{\underline{\sigma}\}]}\right)$

Jos $\{v \in V \,|\, (\sigma_v, \tau_v) \neq (\sigma'_v, \tau'_v)\} > 1$ asetamme $P_{(\underline{\sigma},\underline{\tau}),(\underline{\sigma}',\underline{\tau}')} = 0$. siirtymätodennäköisyydet $P_{(\underline{\sigma},\underline{\tau}),(\underline{\sigma},\underline{\tau})}$ tilasta $(\underline{\sigma}, \underline{\tau})$ itseensä määritellään niin, että normalisaatio (V.10) saadaan voimaan. Vakio $c > 0$ yllä voidaan valita mielivaltaisesti, kunhan se on riittävän pieni, että $P_{(\underline{\sigma},\underline{\tau}),(\underline{\sigma},\underline{\tau})} > 0$. Holleyn kriteeriä (V.15) tarvittiin tässä takaamaan, että myös erotuksena määritelty siirtymätodennäköisyys on positiivinen.

Näin määritelty Markov ketju on jälleen selvästi aperiodinen. Redusoitumattomuudesta toteamme seuraavaa. Valitaan jokin palautuva tila $(\underline{\sigma}^0, \underline{\tau}^0)$ (harjoitustehtävänä lukija voi osoittaa, että esimerkiksi tila, jossa molemmat komponentit ovat samoja vakiokonfiguraatioita on palautuva). Olkoon $\mathcal{S}' \subset \mathcal{S}$ kaikkien niiden tilojen joukko, joihin on pääsy tilasta $(\underline{\sigma}^0, \underline{\tau}^0)$. Silloin $\mathcal{S}'$ on epätyhjä, ja siirtymätodennäköisyysmatriisin rajoittuma tälle joukolle on selvästi redusoitumaton. Tämä riittää meille jatkossa: oletamme alkutilan valituksi tältä osajoukolta, $X(0) \in \mathcal{S}'$.

Lauseen V.28 perusteella, määrittelemämme Markov-ketjun tilat $(X(t), \tilde{X}(t))$ konvergoivat kun $t \to \infty$ kohti stationaarista jakaumaa $\underline{\pi}$ joukolla $\mathcal{S} \subset \Omega \times \Omega$ (itseasiassa osajoukolla $\mathcal{S}'$). Toisaalta ensimmäinen komponenttiprosessi $(X(t))_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$ on yksinään Markov-ketju tila-avaruudella Ω, itseasiassa sen siirtymätodennäköisyydet ovat täsmälleen Lemman V.32 mukaiset. Siis stationaarisen jakauman $\underline{\pi}$ marginaali ensimmäisellä komponentilla on välttämättä ν. Vastaavasti toinen komponenttiprosessi $(\tilde{X}(t))_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$ on yksinään Markov-ketju tila-avaruudella Ω, ja sen siirtymätodennäköisyydet saadaan samasta Lemmasta korvaamalla mitta ν mitalla $\tilde{\nu}$. Siis stationaarisen jakauman $\underline{\pi}$ marginaali toisellä komponentilla on välttämättä $\tilde{\nu}$. Toteamme, että stationaarinen jakauma $\underline{\pi}$ on mittojen ν ja $\tilde{\nu}$ koplaus.

Koko Markov-ketju $(X(t), \tilde{X}(t))_{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$ on rakennettu sellaisella osajoukolla $\mathcal{S} \subset \Omega \times \Omega$, että komponenttien välillä on voimassa osittaisjärjestysrelaatio: erityisesti, jos pari $(Z, \tilde{Z})$ noudattaa stationaarista jakaumaa $\underline{\pi}$, niin $Z \preceq \tilde{Z}$. Silloin kasvavalle funktiolle $f \colon \Omega \to \mathbb{R}$ pätee $f(Z) \leq f(\tilde{Z})$, ja saamme

$$\int_\Omega f \, \mathrm{d}\nu = \mathsf{E}[f(Z)] \leq \mathsf{E}[f(\tilde{Z})] = \int_\Omega f \, \mathrm{d}\tilde{\nu}.$$

□

2.6.1. *FKG korrelaatioepäyhtälö Ising-mallille*

Osan II Luvussa 5.3.1 tarvitsimme seuraavaa korrelaatioepäyhtälöä Ising-mallille.

Lause V.33 (Lause II.71: FKG epäyhtälö Ising mallille)**.** *Olkoon $G = (V, E)$ äärellinen graafi, $\Omega = \{-1, +1\}^V$, ja ν Boltzmann jakauma parametrillä $\beta > 0$ ja Hamiltonin funktiolla $H(\underline{\sigma}) = -\sum_{\{x,y\} \in E} \sigma_x \sigma_y - \sum_{x \in V} B_x \sigma_v$. Jos f, g ovat kasvavia funktioita $\Omega \to \mathbb{R}$, niin pätee seuraava FKG epäyhtälö*

$$\mathsf{E}[fg] \geq \mathsf{E}[f] \, \mathsf{E}[g], \tag{V.14}$$

missä E tarkoittaa odotusarvoa mitan ν suhteen.

Holleyn kriteerin, eli Lauseen V.31, avulla saamme tälle epäyhtälölle näppärän todistuksen.

Lauseen II.71 todistus. Vakion lisääminen funktioon g tuottaa yhtäpitävän epäyhtälön, joten yleisyyttä rajoittamatta voimme olettaa, että $g > 0$. Samoin funktion g kertominen positiivisella vakiolla tuottaa myös yhtäpitävän epäyhtälön, joten voimme lisäksi olettaa, että $\mathsf{E}[g] = 1$. Oletamme siis, että g on positiivinen ja $\mathsf{E}[g] = \int g \, \mathrm{d}\nu = 1$.

Määrittelemme toisen mitan $\tilde{\nu}$ kaavalla

$$\tilde{\nu}[\{\underline{\sigma}\}] \; = \; g(\underline{\sigma}) \, \nu[\{\underline{\sigma}\}],$$

jolloin

$$\int f \, \mathrm{d}\tilde{\nu} = \int f \, g \, \mathrm{d}\nu = \mathsf{E}[fg].$$

Ominaisuuksista $g > 0$ ja $\int g \, \mathrm{d}\nu = 1$ seuraa, että myös $\tilde{\nu}$ on todennäköisyysmitta, jolle kaikkien yksiöiden todennäköisyydet ovat positiiviset. Epäyhtälö (V.14) kaikille kasvaville f on silloin yhtäpitävää sen kanssa, että $\nu \leq \tilde{\nu}$. Todistamme tämän tn-mittojen välisen stokastisen dominoinnin tarkistamalla Holleyn kriteerin.

Olkoot $\underline{\sigma} \preceq \underline{\tau}$. Lasketaan Holleyn kriteerissä esiintyvä suhde suoraan mittojen ν ja $\tilde{\nu}$ määritelmistä

$$\frac{\tilde{\nu}\left[\left\{\underline{\tau}^{w \rightharpoonup +1}\right\}\right] \, \nu\left[\left\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup -1}\right\}\right]}{\tilde{\nu}\left[\{\underline{\tau}^{w \rightharpoonup -1}\}\right] \, \nu\left[\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup +1}\}\right]} = \frac{g(\underline{\tau}^{w \rightharpoonup +1}) \, \nu\left[\left\{\underline{\tau}^{w \rightharpoonup +1}\right\}\right] \, \nu\left[\left\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup -1}\right\}\right]}{g(\underline{\tau}^{w \rightharpoonup -1}) \, \nu\left[\{\underline{\tau}^{w \rightharpoonup -1}\}\right] \, \nu\left[\{\underline{\sigma}^{w \rightharpoonup +1}\}\right]} \tag{V.15}$$

$$= \frac{g(\underline{\tau}^{w \rightharpoonup +1})}{g(\underline{\tau}^{w \rightharpoonup -1})} \exp\Big(2\beta \sum_{\substack{v \in V \\ \{v,w\} \in E}} (\tau_v - \sigma_v)\Big) \geq 1 \,, \tag{V.16}$$

missä epäyhtälö seuraa funktion g kasvavuudesta ja osittaisjärjestyksestä $\underline{\sigma} \preceq \underline{\tau}$. Holleyn kriteeri on siis voimassa ja päättelemme Lauseesta V.31 halutun stokastisen dominoinnin $\nu \leq \tilde{\nu}$. □