arXiv:2303.00227v1 [math.PR] 1 Mar 2023

# 亚临界温度下居里-外斯模型磁化强度的非渐近集中

YINGDONG LU IBM T.J. 沃森研究中心

Abstract. 在这篇短文中，我们得到了亚临界温度下居里-外斯模型磁化强度的非渐近集中结果，进而得出由 Metropolis-Hasting 算法驱动的缩放并中心化磁化强度的扩散极限定理。这些结果补充了 [Bierkens 和 Roberts（2017）]关于超临界温度和临界温度下的研究结果。

## 1. Introduction

居里-外斯模型是统计力学中用于量化相变的最简单铁磁模型之一，详细说明见 [Ellis(2006)] 第四章。数学上，居里-外斯模型由定义在 S 上的以下概率测度给出：$=\{-1,1\}^n$,

$$\pi^n(x)=\exp[-\beta H^n(x)]/Z_n,\quad x\in\mathbf{S}, \tag{1}$$

with

$$H^n(x)=\frac{1}{2n}\sum_{i,j=1}^{n}x_ix_j-h\sum_{i=1}^{n}x_i,$$

其中， $Z_n$ 是归一化常数（也称为配分函数）， $\beta>0$表示绝对温度的倒数, $h\in\mathbb{R}$ 是外加磁场的强度。对于每个状态 $x\in$ S，定义一个重要量——磁化强度, 记作 $m^n(x)$，其定义为 $m^n(x):=\sum_{i=1}^{n}x_i$。于是，哈密顿函数$H^n(x)$可表示为:

$$H^n(x)=-n\left[\frac{1}{2}(m^n(x))^2+hm^n(x)\right].$$

计算配分函数、进而计算整个概率分布的一种常见做法，是使用马尔可夫链蒙特卡罗（MCMC）方法，而 Metropolis-Hastings 算法就是其中一种在许多情况下都被证明有效的方法。 [Bierkens 和 Roberts（2017）], 指出，经过适当的中心化与尺度变换后，由 Metropolis-Hastings 算法生成的马尔可夫链的磁化强度，在临界（$\beta=1$和 $h=0$）及超临界（$\beta<1$）温度下具有扩散极限。其推导依赖于这两种情况下得到的非渐近集中结果。本文在次临界温度（（$\beta<1$ 和 $h\neq0$））下也得到了类似的非渐近集中结果，进而获得了类似的扩散极限。

*Key words and phrases.* 居里-外斯模型、集中性、扩散极限。

本文其余部分安排如下：第 2 节将介绍与中心化和尺度变换后的磁化强度扩散近似相关的概念和结果；第 3 节将呈现非渐近集中方面的关键结果。

## 2. Diffusion approximations to Magnetization

2.1. 平均磁化强度的集中性。众所周知（例如参见 [Ellis(2006)], 第 IV.4 节），磁化强度 $m^n$ 集中于 $m_0$附近； $m_0$是以下量的唯一极小点,

$$-\left(\frac{1}{2}\beta m^2+\beta hm\right)+\frac{1-m}{2}\log(1-m)+\frac{1+m}{2}\log(1+m),\quad m\in(-1,1). \tag{2}$$

在 [Ellis(2006)], 中，集中性分析以及对 $m_0$ 的识别是通过大偏差原理分析得到的；另一种不同且更简化的推导也可参见 [Bovier(2006)] 。此外， $m_0$ 满足以下居里-外斯方程

$$\beta m+\beta h=\frac{1}{2}\log\frac{1+m}{1-m}, \tag{3}$$

它也可以写成 $m=\tanh(\beta(m+h))$。定量而言，以下来自 [Chatterjee(2007)], 的关键结果可以阐明这种集中性

命题 1（ [Chatterjee(2007)]）。对于所有 $\beta\geq 0$、 $h\in\mathbb{R}$ 和 $t\geq 0$,

$$\pi^n\left(|m^n-\tanh(\beta(m^n+h))|\geq\frac{\beta}{n}+\frac{t}{\sqrt{n}}\right)\leq 2\exp\left(-\frac{t^2}{4(1+\beta)}\right). \tag{4}$$

2.2. Metropolis-Hastings 算法。对于从一个仅知其配分函数的分布中采样, Metropolis-Hastings 算法的一种典型实现方式是利用随机游走生成一个提议，然后根据目标分布的密度函数之比接受或拒绝该提议；这种方法无需计算配分函数。

所考虑的 S 上的随机游走会随机选取一个坐标（每个坐标被选取的概率均为 $1/n$ ），并翻转其符号。因此，转移概率的形式为

$$P(x,y)=\begin{cases}\frac{1}{n} & y\in R(x),\\ 0 & \text{otherwise}\end{cases}$$

其中，集合 $R(x)=\{y\in\mathsf{S}:\ y_k=-x_k$ 对于某个 $k\in[n]$成立，而 $y_i=-x_i$ 对于所有 $i\neq k\}$ 成立。为确保可逆性，进而保证收敛，Metropolis-Hastings 步骤以如下概率接受由随机游走生成的提议移动:

$$\min\left\{1,\frac{\pi^n(y)P(y,x)}{\pi^n(x)P(x,y)}\right\}=\min\left\{1,\frac{\pi^n(y)}{\pi^n(x)}\right\}.$$

这个等式成立，是因为当 $y$是向 $x$移动的提议时， $P(y,x)=P(x,y)=\frac{1}{n}$。

2.3. 中心化和缩放后的磁化强度。本文将研究的关键量是下面定义的中心化和缩放后的磁化强度,

$$\eta^n(x):=n^{1/2}[m^n(x)-m_0],\quad x\in\mathbf{S}.$$

在 [Bierkens 和 Roberts（2017）] 中，该量被称为平移并重新归一化的磁化强度。遵循 Metropolis-Hastings 算法，记缩放后的马尔可夫链为 $X^n$，其转移概率为，

$$P^n(\eta,\eta\pm 2n^{-\frac{1}{2}}) = Q^n(\eta,\eta\pm 2n^{-\frac{1}{2}})(1\wedge\exp\{\beta[\Phi^n(\eta)-\Phi^n(\eta\pm 2n^{\frac{1}{2}})]\}),$$

with

$$Q^n(\eta,\eta\pm 2n^{-\frac{1}{2}}) := \frac{1}{2}(1\mp(m_0+n^{-\frac{1}{2}}\eta)),\quad \Phi^n(\eta) = -\frac{1}{2}\eta^2 - n^{\frac{1}{2}}(m_0+h)\eta.$$

令 $Y^n$ 表示以速率 $n$跳跃、转移概率为 $P^n$的平稳连续时间马尔可夫链，其平稳分布为 $\mu^n \propto \exp(-\beta\Phi^n(\eta))$。

2.4. 扩散逼近定理。Bierkens 和 Roberts（2017）], 的分析给出了在临界温度（$\beta=1$ 和 $h=0$）及超临界温度（$\beta<1$）下，随着 $n$ 趋于无穷，中心化并缩放后的磁化强度的扩散极限。本文将他们的结果推广至亚临界相$\beta>1$ 和 $h\neq 0$，并得出以下结果。

定理 2. 假设 $\beta>1$ 和 $h\neq 0$，$Y^n$ 以速率 $n$跳跃，则 $Y^n$ 在 $D([0,\infty)\ \mathbb{R})$ 中弱收敛至 $Y$，其中 $Y$是如下定义的平稳奥恩斯坦-乌伦贝克过程:

$$dY(t) = 2\ell(h,\beta)Y(y)dt + \sigma(h,\beta)dB(t), \tag{5}$$

*with*

$$\sigma(h,\beta) = 2\sqrt{1-|m_0(h,\beta)|},\quad \ell(h,\beta) = \frac{1}{1+|m_0(h,\beta)|} - \beta(1-|m_0(h,\beta)|).$$

证明定理 2 的关键是建立非渐近集中结果，这将在下一节中完成。

## 3. Non-Asymptotic Concentration Inequality for Sub-Critical Phase

当 $\beta>1, h>0$ 时（ $\beta>1, h<0$ 的情形可通过对称性类似处理），众所周知（例如参见 [Ellis(2006)]，第四章），居里-外斯方程 (3) 可能有三个根，其中 $m_0>0$ 是最大的，另外两个根为负数。 [Ellis(2006) 第六章] 和 [ Bierkens 和 Roberts（2017）], 都指出，在 $h\neq 0$ 的情形下，另外两个根并非全局最小值。下面的引理确定了式 (3) 两边在 $m_0$ 处的导数阶数。

引理 3. $\beta < \frac{1}{1-m_0^2}$ 当 $\beta>1$ 且 $h>0$。

证明。定义 $m_1 := \sqrt{(\beta-1)/\beta}$, 因此 $m_1\in[0,1)$ 和 $\beta = \frac{1}{1-m_1^2}$。注意， $\beta$是居里-外斯方程 (3) 左侧的斜率，该方程为仿射形式。 $\frac{1}{1-m^2}$ 是右侧的导数，并且它随$m$递增。 $m_1$ 是这两个导数相等的点。当 $m\geq m_1$时，左侧的导数将保持为 $\beta$; 另一方面，右侧的导数将在 $m$中递增。下面我们将证明 $\beta m_1+\beta h > \frac{1}{2}\log\frac{1+m_1}{1-m_1}$。因此，两侧相等必定发生在 $m_1$之后，即 $m_1<m_0$，结论得证。

在 $m_1$ 处，将居里-外斯方程 (3) 的两侧都写成关于 $\beta$ 的函数。左侧的形式为 $f_L(\beta) = \sqrt{(\beta-1)\beta}+h\beta$，右

侧 $f_R(\beta) = \log(\sqrt{\beta}+\sqrt{\beta-1})$。因此， $f_L'(\beta) = \frac{2\beta-1}{2\sqrt{(\beta-1)\beta}} + h$， 且 $f_R'(\beta) = \frac{1}{2\sqrt{(\beta-1)\beta}}$。所以，对于 $\beta \geq 1$ 和 $h > 0$， $f_L'(\beta) > f_R'\beta)$。此外， $f_L(1) = h > 0 = f_R(1)$。由此可得 $f_L(\beta) > f_R(\beta)$，即 $\beta m_1 + \beta h > \frac{1}{2}\log\frac{1+m_1}{1-m_1}$。 □

引理4。存在 $\iota_0 > 0$ 和 $M_1, M_2 \in [0,1]$，满足 $0 \leq M_1 < m_0$ 和 $m_0 < M_2 \leq 1$，使得

$$\beta m + \beta h \geq \frac{1}{2}\log\frac{1+m'}{1-m'}, \tag{6}$$

对所有 $M_1 \leq m \leq m_0$ 均成立，其中 $m' = m - \iota_0(m - m_0)$。同时，

$$\beta m + \beta h \leq \frac{1}{2}\log\frac{1+m'}{1-m'}, \tag{7}$$

对所有 $m_0 \leq m \leq M_2$ 均成立。

证明。考虑二元函数 $K(m,\iota) = \frac{1}{2}\log\frac{1+m-\iota(m-m_0)}{1-m+\iota(m-m_0)} - (\beta m + \beta h)$。容易看出， $K(m_0, 0)=0$。同时，根据引理 3，我们有 $\frac{\partial}{\partial m}K(m_0, 0) = \frac{1}{1-m_0^2} - \beta > 0$。因此，存在 $(m_0, 0)$ 的一个邻域，在该邻域内 $\frac{\partial}{\partial m}K(m,\iota) > 0$。取一个 $\iota_0 > 0$，以及满足 $0 \leq M_1 < m_0$ 和 $m_0 < M_2 \leq 1$ 的 $M_1, M_2 \in [0,1]$，使得 $\frac{\partial}{\partial m}K(m,\iota_0) > 0$ 对 $m \in [M_1, M_2]$ 成立。显然，当 $m \leq m_0$ 时，$K(m,\iota_0) \leq 0$；当 $m \geq m_0$ 时， $K(m,\iota_0) \geq 0$，它们分别对应于不等式 (6) 和 (7)。□

记 $F^{n,\delta} := \{\eta \in X^n : |\eta| \leq n^\delta\}$. 那么，上述引理使我们得到以下结果，它将 [Bierkens 和 Roberts（2017）] 中的引理5推广到了亚临界温度。

引理5. 设 $0 < \delta < \frac{1}{2}$. 对于 $\beta > 1$, $h \neq 0$ 以及任意的 $\alpha > 0$，有，

$$\lim_{n\to\infty} n^\alpha \pi^n(\eta^n(x) \notin F^{n,\delta}) = 0.$$

证明。引理4表明，存在 $\iota_0 > 0$，使得不等式 (6) 和 (7) 成立，或者等价地， $|m - tanh(\beta(m+h))| \geq \iota_0|m - m_0|$ 对于 $m \in [M_1, M_2]$ 成立。因此，对于充分大的 $n$，有

$$\begin{aligned}\pi^n(|m-m_0| \geq n^{\delta-\frac{1}{2}}) \leq& \pi^n(|m - tanh(\beta(m+h))| \geq \iota_0 n^{\delta-\frac{1}{2}}) \\ =& \pi^n\left(|m - tanh(\beta(m+h))| \geq \frac{\beta}{n} + \frac{t_n}{\sqrt{n}}\right) \leq 2\exp\left(-\frac{t_n^2}{4(1+\beta)}\right),\end{aligned}$$

with

$$t_n = \left(\iota_0 n^{\delta-\frac{1}{2}} - \frac{\beta}{n}\right) n^{\frac{1}{2}}.$$

该结果由以下事实推出：当 $n \to \infty$ 时， $t_n \to \infty$ 的阶为 $n^\delta$。 □

以下引理见于 [Bierkens 和 Roberts（2017）]。

引理6. 设 $0 < \delta < \frac{1}{2}$。对于 $h \neq 0$、$\beta > 0$，当 $r < \min(1, (k+1)(\frac{1}{2}-\delta))$ 时，我们有，

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{\eta\in F^{n,\delta}} |nE_\eta^n[(Y-\eta)^2] - \ell(h,\beta)^2| = 0,$$

$$\lim_{n\to\infty} \sup_{\eta\in F^{n,\delta}} |nE_\eta^n[(Y-\eta)^2] - \sigma(h,\beta)^2| = 0.$$

$$\lim_{n\to\infty}\sup_{\eta\in F^{n,\delta}} nE_\eta^n[|Y-\eta|^p]=0,$$

对于任意 $p>2$。

定理 2 的证明。证明遵循 [Bierkens 和 Roberts（2017）], 中定理1的基本论证, 并结合引理5中的非渐近集中结果。为完整起见，我们重现关键步骤。基本思路是比较生成元$Y^n$ 和扩散过程 (5) 的定义域中函数所受的作用。设 $G^n$ 是 $Y^n$ 的生成元， $G$ 是扩散过程的生成元。那么我们知道,

$$G^n\phi(\eta)=n[P^n\phi(\eta)-\phi(\eta)],$$

and

$$G\phi(\eta)=-2\ell(h,\beta)\eta\frac{d\phi}{d\eta}+\frac{1}{2}\sigma^2(h,\beta)\frac{d^2\phi}{d\eta^2},$$

对于 $\phi\in D(G):=\{\phi\in C_0^2(\mathbb{R}):\ \eta\mapsto\eta\phi'(\eta)\ \in C_0(\mathbb{R})\}$。我们有,

$$\begin{aligned}
&\sup_{\eta\in F^{n,\delta}}|G^n\phi(\eta)-G\phi(\eta)|\\
\le&\sup_{\eta\in F^{n,\delta}}\left|nE_\eta^n[\phi(Y^n)-\phi(\eta)]-nE_\eta^n[\phi'(\eta)(Y^n-\eta)+\frac{1}{2}\phi''(\eta)(Y^n-\eta)^2]\right|\\
\le&\frac{1}{6}\|\phi^3\|_\infty E_\eta^n[|Y^n-\eta|^3]\to 0,\quad \text{as } n\to\infty,
\end{aligned}$$

其中，第一个不等式由定义得出，第二个不等式由泰勒展开得出，而收敛性则是引理6中对一阶、二阶及更高阶项进行估计的结果。并且

$$P^n(Y^n\notin F^{n,\delta}\text{ for some }0\le t\le T)\le n\pi^n(\eta^n(x)\notin F^{n,\delta})\to 0\quad\text{as } n\to\infty,$$

由引理5得出。然后，所需结果由 [Ethier 和 Kurtz(2009)]中的推论4.8.7得出。□

## References


[Bierkens 和 Roberts（2017）] J. Bierkens 和 G. Roberts。《Curie–Weiss 模型中提升的 Metropolis–Hastings 的分段确定性标度极限》。 *Ann. Appl. Probab.*，27 882，04 2017 2 846 10 1214 16 1217 ( ): – . doi: . / -AAP . URL https://doi.org/10.1214/16-AAP1217。

[Bovier( 2006 )] A. Bovier。《》。 *Statistical Mechanics of Disordered Systems: A Mathematical Perspective*。剑桥统计与概率数学丛书。剑桥大学出版社，2006。doi: 10.1017/CBO9780511616808。

[Chatterjee( 2007 )] S. Chatterjee。用于 *Probability Theory and Related Fields* 138 1 305 321，2007 10 1007 00440 006 0029 集中不等式的 Stein 方法。，( ): – . doi: . /s - - -y. URL https://doi.org/10.1007/s00440-006-0029-y。

[Ellis( 2006 )] R. Ellis。《》，，。 *Entropy Large Deviations and Statistical Mechanics*。数学经典丛书。Springer，。ISBN 。URL https://books.google.com/books?id=jNxKUjihQRYC。

[Ethier 和 Kurtz( 2009 )] S. Ethier 和 T. Kurtz。《》。Wiley 概率与统计丛书。Wiley，。ISBN 。URLhttps://books.google.com/books?id=zvE9RFouKoMC。 *Markov Processes: Characterization and Convergence* 2009 9780470317327