Pro Mathematica : Vol. III, Nos. 5 – 6, 1989

ESTADOS DE GIBBS PARA UN SISTEMA DE PARTICULAS INTERACTUANTES

Arturo KOHATSU HIGA*

I. Introducción.

Esta nota intenta exponer un modelo para un sistema de partículas en el cual la interacción viene definida por una función que representa a la energía potencial. El sistema puede ser imaginado como un retículo (i.e. un conjunto de hilos cruzados formando una red); una partícula sólo puede estar en las intersecciones de dos hilos y se mueve instantáneamente de una intersección a otra.

Consideramos el caso general, y luego, nos limitaremos al caso en el cual el potencial de la partícula viene determinado por lo que ocurre alrededor de ella.

Este modelo fue expuesto superficialmente por Preston y de él se piensa que es "equivalente" a un proceso de nacimiento y muerte. A pesar de que existen muchas razones para pensar que tal equivalencia es cierta, una de las dudas aparece en el generador del semigrupo, el cual no tiene analogía alguna con el generador de

* Ex alumno PUCP. Estudiante de doctorado en Purdue University

un proceso de nacimiento y muerte (ver (1)).
Sin embargo, los teoremas enunciados por Preston son ciertos bajo condiciones mucho más débiles. Estas condiciones no son suficientes en el caso general. (Ver Preston. 1973.)
En lo posible se ha intentado presentar el tema de tal manera que también pueda servir de introducción a los estados de Gibbs.
Un estado de Gibbs es una distribución probabilística que pertenece a la familia exponencial de distribuciones. Los estados de equilibrio que aquí se deducen, son todos estados de Gibbs, que parecen tener importancia en mecánica estadística.
También se ha añadido un apéndice acerca de semigrupos markovianos, el cual debe servir de relativa ayuda para el lego.
Quisiera agradecer a Steve Lalley por introducirme al tema de estados de Gibbs y Dinámica Simbólica de una manera menos dolorosa de lo normal, gracias a su paciencia.
También me interesaría mantener correspondencia con probabilistas trabajando en universidades peruanas, que tengan interés en algún tipo de investigación en el área.

II. Modelo.

El modelo describe la interacción de m partículas indistinguibles que se mueven en el conjunto Λ (Λ puede imaginarse como una "red", las partículas saltan de intersección en intersección de dos "hilos"), obviamente $m <|\Lambda|$ ($|\ \ |$ denota la cardinalidad del conjunto). No aceptaremos que haya ocupación múltiple de un elemento de Λ, es decir, no puede haber más de una partícula en cada punto de Λ. Sea $\Gamma_m := \{A \subset \Lambda / |A| = m\}$.

Definiremos un semigrupo $\{P_t\}_{t\geq 0}$ siendo $P_t : \Gamma_m \times \Gamma_m \to \Re$, por intermedio de su generador $G : \Gamma_m \times \Gamma_m \to \Re$. (ver apéndice)

Sea

1) $d : \Lambda \times \mathcal{P}(\Lambda) \to \Re$ tal que $d(x, A) > 0$ para todo $x \notin A \subset \Lambda$
2) $P : \Lambda \times \Lambda \to [0,1]$ una función de transición

(i.e. $P(x,y) =$ "probabilidad de ir de x a y"), simétrica (i.e. $P(x,y) = P(y,x)$), irreducible (i.e. ergódico) con $P(x,x) = 0$ para todo $x \in \Lambda$.

Ahora empezaremos la descripción de la "velocidad" de transición (i.e. el generador). Supongamos que $x \notin A \subset \Lambda$, entonces:

$$
\begin{aligned}
&P \text{ (una partícula en } x \text{ salte en el intervalo } [t, t+dt] \\
&\qquad / \text{ existen partículas en } A \cup \{x\} \text{ en el tiempo } t) \\
&\qquad\qquad = d(x,A)dt + O(dt^2), \\
&P(\text{ una partícula salte de } x \text{ a } y \\
&\qquad / \text{ la partícula en } x \text{ tiene que saltar}) = P(x,y), \\
&P(\text{ más de un salto en } [t, t+dt]) = O(dt^2).
\end{aligned}
$$

Entonces el generador debe estar definido por:

$$
\begin{cases}
G(A \cup x, A \cup y) = d(x,A)P(x,y) & \text{si } A \in \Gamma_{m-1}, \\
 & x, y \in \Lambda - A,\ x \neq y \\
G(A,B) = 0 & \text{si } A, B \in \Gamma_m \text{ y } A \neq B
\end{cases}
\tag{1}
$$

donde $G(A,A)$ está definido de tal forma que:

$$\sum_{B \in \Gamma_m} G(A,B) = 0$$

Esto es, el sistema no tiende a volverse caóticamente rápido, ni tampoco a estacionarse. Usualmente se llama semigrupo de m partículas a cualqüier sistema con un generador caracterizado por (1), d es la función velocidad y P la matriz de transición del semigrupo.

Lema 1. G es irreducible.
G es irreducible o ergódico si "el proceso tiende a visitar todos los estados con una frecuencia determinada por una medida inicial apropiada". (α)

En términos matemáticos:

$$\forall A, B \subset \Lambda \quad (A \neq B) \quad \exists n \quad \exists A_1, \ldots, A_n \quad \text{tales que}$$
$$P_t(A, A_1) \prod_{i=1}^{n-1} P_t(A_i, A_{i+1}) P_t(A_n, B) > 0. \quad (2)$$

Lo cual nos dice; "partiendo de cualquier estado A siempre se puede llegar a B" (el teorema ergódico de Birkhoff prueba la equivalencia con (α)) en función del generador, (2) puede ser escrito como:

$$\forall A, B \subset \Lambda \quad (A \neq B) \quad \exists n \quad \exists A_1, \ldots, A_n \quad \text{tales que}$$
$$G(A, A_1) \prod_{i=1}^{n-1} G(A_i, A_{i+1}) G(A_n) > 0. \quad (3)$$

Esto es obvio, pues: si $A \neq B$ tales que:

1) $|A| = |B| = m$
2) $\{x_1, \ldots, x_n\} = A - B$
3) $\{y_1, \ldots, y_n\} = B - A$, y si definimos

$A_1 = (A \backslash \{x_1\}) \cup \{y_1\}, \quad A_{i+1} = (A_i \backslash \{x_{i+1}\}) \cup \{y_{i+1}\}$
$i = 1, \ldots, n-1$, entonces $G(A_i, A_{i+1}) > 0$

[pues $G(A_i, A_{i+1}) = d(x_{i+1}, A_i \backslash \{x_{i+1}\}) P(x_{i+1}, y_{i+1})$
la función velocidad es siempre positiva y la probabilidad de salto de x_{i+1} a y_{i+1} es también positiva ya que la matriz de transición es irreducible.]

La aserción (α) habla de la existencia de una medida inicial "apropiada", llamada estado de equilibrio, que cumple:

$$\sum_{A \subset \Lambda} \Pi(A) P_t(A, B) = \Pi(B) \qquad \forall B \subset \Lambda, \ t \geq 0; \quad (4)$$

que es equivalente a:

$$\sum_{A \subset \Lambda} \Pi(A) G(A,B) = 0. \tag{5}$$

Lo cual significa en nuestro caso (usando (1))

$$\sum_{x \notin B} \sum_{y \in B} \Pi((B \backslash \{y\}) \cup \{x\}) G((B \backslash \{y\}) \cup \{x\}, B) + \\ + \Pi(B) G(B,B) = 0 \text{ para } B \in \Gamma_m \tag{6}$$

$$\Longleftrightarrow \\ \sum_{x \notin B} \sum_{y \in B} \Pi((B \backslash \{y\}) \cup \{x\}) d(x, B \backslash \{y\}) P(x,y) + \\ + \Pi(B) G(B,B) = 0$$

$G(B,B)$ puede ser calculado por intermedio de (ver (1))

$$\sum_{B \in \Gamma_m} G(A,B) = 0.$$

i.e.,

$$G(B,B) + \sum_{c \in \Gamma_m} G(B,c) = 0$$
$$\Longleftrightarrow G(B,B) + \sum_{x \notin B} \sum_{y \in B} G(B, (B \backslash \{y\}) \cup \{x\}) = 0$$
$$\Longleftrightarrow G(B,B) + \sum_{x \notin B} \sum_{y \in B} d(y, B \backslash \{y\}) P(y,x) = 0.$$

Regresando a (6),

$$\Longleftrightarrow \sum_{x \notin B} \sum_{y \in B} \Pi((B \backslash \{y\}) \cup \{x\}) d(x, B \backslash \{y\}) P(x,y) \\ = \Pi(B) \sum_{x \notin B} \sum_{y \in B} d(y, B \backslash \{y\}) P(y,x).$$

Esta ecuación será cierta si

$$\frac{\Pi((B\backslash\{y\})\cup\{x\})}{\Pi(B)} = \frac{d(y, B-\{y\})}{d(x, B-\{y\})}, \text{ pues } P \text{ es simétrica.} \qquad (7)$$

Generalizando (7) para $B \subset \Lambda$, tomemos $B = \{y\}$ en (7):

$$\frac{\Pi(\{x\})}{\Pi(\{y\})} = \frac{d(y,\phi)}{d(x,\phi)} \qquad (8)$$

$$\Longrightarrow \Pi(\{x\})d(x,\phi) = d(y,\phi)\Pi(\{y\}) \qquad \forall x, y \in \Lambda$$

Usualmente, es interesante definir el estado de equilibrio, Π en función de un potencial V, de la siguiente forma:

$\Pi(\{y\}) = Kexp(V(y))$, (K es una constante normalizadora) por (8);

$$Kexp(V(y)) = \frac{K_1}{d(y,\phi)} \qquad (9)$$

(9) es opuesto totalmente al resultado "mostrado" por Preston (Proposición 2.3), lo cual significa que su interpretación de este sistema, como "paralelo" a un proceso de nacimiento y muerte, es inapropiado. En este sistema se obtiene:

Teorema 1. Sea $\{P_t\}_{t\geq 0}$ un semigrupo de m-partículas con función velocidad d, entonces

(i) Existe un único potencial $V : \mathcal{P}(\Lambda) \to \Re$ tal que:

$$d(x, A)^{-1} = exp[V(A\cup x) - V(A)], \text{ para todo } x \notin A \subset \Lambda. \qquad (10)$$

(ii) Si Π es un estado de equilibrio de $\{P_t\}_{t\geq 0}$, entonces:

$$\Pi(A) = Z^{-1}exp[V(A)], \text{ para todo } A \in \Gamma_m, \qquad (11)$$

$$\textit{donde} \qquad Z = \sum_{B \in \Gamma_m} expV(B)$$

(iii) $\{P_t\}_{t\geq 0}$ es reversible en el tiempo. (i.e. $\Pi(A)P_t(A,B) = \Pi(B)P_t(B)$)

Prueba.

(i) Un potencial es cualquier función $V : \mathcal{P}(\Lambda) \to \Re$ tal que $V(\emptyset) = 0$. En este caso, basta definir V por inducción;

$$V(x) = logd(x,A)^{-1},$$

Supongamos $V(A)$ está definido para A, tal que $|A| = m-1$; definimos $V(A \cup x) = V(A) + logd(x,A)^{-1}$.

(iii) $\{P_t\}_{t\geq 0}$ es reversible, lo cual significa $\Pi(A)P_t(A,B) = \Pi(B)P_t(B,A)$, que es equivalente a $\Pi(A)G(A,B) = \Pi(B)G(B,A)$.

$$\Longleftrightarrow \Pi(A \cup x)G(A \cup x, A \cup y) = \Pi(A \cup y)G(A \cup y, A \cup x),$$

usando (1);

$$\Longleftrightarrow \Pi(A \cup x)d(x,A)P(x,y) = \Pi(A \cup y)d(y,A)P(y,x),$$

$A \in \Gamma_{m-1}$

$$\Longleftrightarrow \Pi(A \cup x)d(x,A) = \Pi(A \cup y)d(y,A),$$

pues P es simétrica. Esta última igualdad se obtiene usando (10) y (11).

(ii) Para probar (11) sólo necesitamos probar que (11) cumple (7). Lo cual se puede verificar fácilmente usando (10). La unicidad es una consecuencia del teorema ergódico.

Ahora daremos a Λ una estructura de grafo mediante $c : \Lambda \times \lambda \to \{0,1\}$, $c(x,x) = 0$.
Definimos el "borde de x", para $x \in \Lambda$, por

$$\partial x = \{y \in \Lambda / c(x,y) = 1\}.$$

Un semigrupo de m-partículas se llama "local" si $d(x,A) = d(x, A \cap \partial x)$, para todo $x \notin A \subset \Gamma$. Es decir "la velocidad de los saltos, sólo depende de lo que ocurre en la vecindad del punto".
V es un potencial "local" si para todo $x, y \in \Lambda$, $x \neq y$, $c(x,y) = 0$, y para todo $X \subset \Lambda - x - y$ se tiene:

$$V(X \cup x \cup y) - V(X \cup x) - V(X \cup y) + V(X) = 0. \quad (12)$$

Existen diversos equivalentes a esta definición, aunque ésta no es muy clara en significado, tiene gran utilidad operativa. Un potencial local $V(X)$ solamente depende de lo que ocurre en el borde del conjunto X.

Teorema 2. Si $\{P_t\}_{t \geq 0}$ es un semigrupo local de m partículas entonces V es un potencial local.

Prueba. Basta probar (12).

$$exp(V(X \cup x \cup y) - V(X \cup x) - V(X \cup y) + V(X)) \\ = \frac{d(y, X \cup x)^{-1}}{d(y,X)^{-1}} = \frac{d(y, (X \cup x) \cap \partial y)^{-1}}{d(y, X \cap \partial y)^{-1}}$$

como $c(x,y) = 0$ entonces $(X \cup x) \cap \partial y = X \cap \partial y$.

Apéndice.

Definición. $\{P_t\}_{t \geq 0}$ es un semigrupo sobre $\mathcal{P}(\Lambda)$, si para cada $t \geq 0$ se tiene que $P_t : \mathcal{P}(\Lambda) \times \mathcal{P}(\Lambda) \to \Re$ cumple las siguientes propiedades:

(i) $0 \leq P_t(A,B)$, para todo $A, B \in \mathcal{P}(\Lambda)$, $t \geq 0$;

(ii) $\sum\limits_{B \subset \Lambda} P_t(A,B) = 1$, para todo $A \subset \Lambda$, $t \geq 0$;

(iii) $\sum\limits_{X \subseteq \Lambda} P_t(A,X)P_s(X,B) = P_{t+s}(A,B)$, para todo $A, B \in \mathcal{P}(\Lambda)$, $s, t \geq 0$;

(iv) $\lim\limits_{t \to 0} P_t(A,B) = I(A,B)$, para todo $A, B \in \mathcal{P}(\Lambda)$, donde

$$I(A,B) = \begin{cases} 1 & \text{si } A = B \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

En muchas definiciones de procesos Markovianos, se involucra a la "velocidad relativa de saltos" (e.g. en un Proceso de Poisson, esta "velocidad" es λ); en el caso general, este concepto se define mediante el siguiente Teorema.

Teorema. Existe una única función $G : \mathcal{P}(\Lambda) \times \mathcal{P}(\Lambda) \to \Re$ tal que

(i) $G(A,B) \geq 0$ si $A, B \in \mathcal{P}(\Lambda)$ y $A \neq B$;

(ii) $\sum\limits_{B \subset \Lambda} G(A,B) = 0$ para todo $A \in \mathcal{P}(\Lambda)$;

(iii) $P_t = exp(tG) := \sum\limits_{n=0}^{+\infty} \frac{t^n}{n!} G^n$.

En (iii), G se considera como una matriz de orden $\mid \mathcal{P}(\Lambda) \mid \times \mid \mathcal{P}(\Lambda) \mid$. Se suele llamar a G, "generador del semigrupo".

Definición. $\Pi : \mathcal{P}(\Lambda) \to \Re$, tal que $\sum\limits_{A \subset \Lambda} \Pi(A) = 1$, se llama "estado de equilibrio" si

$$\sum_{A \subset \Lambda} \Pi(A) P_t(A,B) = \Pi(B).$$

Teorema. Π es un estado de equilibrio si y sólo si

$$\sum_{A \subset \Lambda} \Pi(A) G(A, B) = 0.$$

Un resumen sobre cadenas de Markov contínuas con número finito de estados puede ser encontrado en Grimmett y Stirzaker.

Bibliografía.

[1] *C. J. Preston.* "Gibbs states on countable sets". Cambridge University Press. 1974.

[2] *C. J. Preston.* "Generalized Gibbs states and Markov Random fields". Advanced Applied Probability. 1973, 5, 242 - 261.

[3] *G. Grimmett y D. Stirzaker.* "Probability and Random Processes". Clarendon Press. Oxford. 1982.