La Matematica nella Società e nella Cultura

Rivista dell'Unione Matematica Italiana

Micaela Fedele

Modello di campo medio per particelle multispecie interagenti. Risultati matematici e applicazione al problema inverso

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. **5** (2012), n.1 (Fascicolo tesi di Dottorato), p. 75–78.

Unione Matematica Italiana

<http://www.bdim.eu/item?id=RIUMI_2012_1_5_1_75_0>

La Matematica nella Società e nella Cultura. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Unione Matematica Italiana, 2012.

La Matematica nella Società e nella Cultura
Rivista dell'Unione Matematica Italiana
Serie I, Vol. V, Aprile 2012, 75-78

Modello di campo medio per particelle multispecie interagenti. Risultati matematici e applicazione al problema inverso

MICAELA FEDELE

1. – Introduzione

In letteratura diversi modelli di campo medio a due specie sono stati introdotti a partire dalla metà degli anni '50 per riprodurre le transizioni di fase dei metamagneti. In tempi recenti la versione generale di tali modelli è stata proposta come tentativo di descrivere e predire gli effetti su larga scala del comportamento individuale di agenti socio-economici [1]. Modelli di spin multispecie non interagenti sono alla base della teoria di scelta discreta dell'economista Daniel Mc Fadden. L'estensione di tale teoria al caso interagente rappresenta pertanto un primo passo verso la comprensione di quei fenomeni socio-economici in cui la scelta individuale è condizionata dall'interazione con gli altri agenti. Il modello introdotto in [1] è stato analizzato a livello matematico nell'articolo [4] dove viene dimostrata l'esistenza del limite termodinamico e calcolata l'energia libera. Questa tesi di dottorato prosegue lo studio delle proprietà del modello interagente multispecie, in particolare determinando il comportamento, nel limite termodinamico, della distribuzione di probabilità congiunta delle somme parziali di spin, ed illustra una procedura per stimare i parametri del modello a partire da un set di dati empirici.

2. – Modello di campo medio multispecie

Si consideri un insieme di N particelle suddiviso in n sottoinsiemi $P_1, \dots, P_n$ di cardinalità $|P_l| = N_l$, tali che $P_l \cap P_s = \emptyset$, per $l \neq s$ e $\sum_{l=1}^{n} N_l = N$. Le particelle interagiscono fra loro a coppie e con un campo esterno come definito dalla seguente Hamiltoniana di campo medio:

$$H_N(\sigma) = -\frac{1}{2N}\sum_{i,j=1}^{N} J_{ij}\sigma_i\sigma_j - \sum_{i=1}^{N} h_i\sigma_i \, . \tag{1}$$

dove σ_i rappresenta lo spin della particella i-esima, $\sigma_i = \pm 1$; J_{ij} è il parametro di mutua interazione tra la particella i-esima e la particella j-esima; h_i è il valore del campo esterno con cui interagisce la particella i-esima. Sia il parametro di accoppiamento J_{ij} sia il campo h_i assumono valori differenti a seconda del sottoinsieme di appartenenza delle particelle. In particolare J_{ls} indica il valore assunto dal parametro di accoppiamento che regola l'interazione tra una particella di P_l e una particella di P_s, mentre h_l indica il valore del campo magnetico con cui interagiscono le particelle dell'insieme P_l. I valori di $J_{11}, J_{22}, \ldots, J_{nn}$ sono assunti positivi, mentre quelli di J_{ls} per $l \neq s$ possono essere sia positivi che negativi permettendo interazioni ferromagnetiche e antiferromagnetiche. La distribuzione di probabilità congiunta di una configurazione di spin $\sigma = (\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$ è data dalla misura di Boltzmann-Gibbs:

$$P\{\sigma\} = \frac{\exp(-H_N(\sigma))}{Z_N} \prod_{i=1}^{N} d\rho(\sigma_i)\,. \tag{2}$$

In tale distribuzione Z_N è la costante di normalizzazione (detta funzione di partizione) mentre ρ è la misura $1/2(\delta(x-1)+\delta(x+1))$ dove $\delta(x-x_0)$ denota la delta di Dirac concentrata nel punto reale x_0. Il modello descritto è ben posto, in quanto esiste il limite per $N \to \infty$ (si veda [4]) della funzione pressione $p_N = 1/N \ln Z_N$. Definita la magnetizzazione $m_l(\sigma)$ del sottoinsieme P_l come rapporto tra la somma $S_l(\sigma)$ dei suoi spin e la sua cardinalità N_l, l'Hamiltoniana (1) può essere riscritta nella forma $H_N(\sigma) = -Ng(m_1(\sigma), \ldots, m_n(\sigma))$ dove la funzione g è

$$g(x_1, \ldots, x_n) = \frac{1}{2}\sum_{l,s=1}^{n} \alpha_l \alpha_s J_{ls} x_l x_s + \sum_{l=1}^{n} \alpha_l h_l x_l\,. \tag{3}$$

con $\alpha_l = N_l/N$ grandezza relativa del sottoinsieme P_l. L'Hamiltoniana scritta in questa forma permette di calcolare esattamente il valore del limite termodinamico della pressione. In particolare se la funzione g è convessa vale $\lim_{N\to\infty} p_N = \sup_{x\in[-1,1]^n} f(x)$, dove

$$f(x_1, \ldots, x_n) = -\frac{1}{2}\sum_{l,s=1}^{n} \alpha_l \alpha_s J_{ls} x_l x_s + \sum_{l=1}^{n} \alpha_l \ln\left(\cosh\left(\sum_{s=1}^{n} \alpha_s J_{ls} x_s + h_l\right)\right)\,. \tag{4}$$

Dalle condizioni estremali di f si ricavano le equazioni di campo medio del modello $\mu_l = \tanh(h_l + \sum_{s=1}^{n} \alpha_s J_{ls}\, \mu_s)$, $l = 1, \ldots, n$. Per $n = 1$ quello descritto rappresenta il modello di Curie-Weiss.

3. – Comportamento asintotico di somme di spin

Nel limite termodinamico il vettore aleatorio $(m_1(\sigma), \ldots, m_n(\sigma))$ converge debolmente, rispetto alla misura di Boltzamann-Gibbs, al vettore $(\mu_1, \ldots, \mu_n)$ soluzione delle equazioni di campo medio. Ciò significa che la varianza delle magnetizzazioni si annulla per $N \to \infty$ (si veda [4]). In questa tesi di dottorato viene determinata l'opportuna normalizzazione del vettore aleatorio $(S_1(\sigma), \ldots, S_n(\sigma))$ affinché nel limite termodinamico converga a una variabile aleatoria ben definita. Per particelle non interagenti, e quindi indipendenti, il teorema del limite centrale fornisce la risposta a questo problema. Il caso di particelle interagenti costituenti un'unica specie è risolto negli articoli [2] e [3]. Nel caso generale si dimostra che la normalizzazione di

$(S_1(\sigma), \dots, S_n(\sigma))$ e il comportamento della variabile aleatoria a cui converge dipendono dalla natura dei punti di massimo del funzionale pressione f definito in (4). Tale funzionale ammette sempre un numero finito non nullo di massimi assoluti sotto l'ipotesi che la funzione g definita dalla (3) sia convessa. Considerato uno di tali punti di massimo $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)$ esistono le funzioni $f_{2j}^{\mu}(x) \leq 0$, tali che intorno a μ il funzionale f può essere scritto come:

$$f(x) = f(\mu) + \sum_{j=0}^{d} f_{2j}^{\mu}(x-\mu) + o\left(\left(|x' - \mu'|^2 + |x'' - \mu''|^{2/q}\right)^d\right) \tag{5}$$

dove (x', x'') è una partizione delle coordinate $x = (x_1, \dots, x_n)$ e q è un numero razionale positivo tale che $1/q$ è naturale e $f_{2j}^{\mu}(tx', t^q x'') = t^{2j} f_{2j}^{\mu}(x', x'')$ per ogni $t > 0$. Si definisce tipo del punto di massimo μ il numero naturale k pari al più piccolo d tale che $f_{2d}^{\mu}(x-\mu) \neq 0$ per $x \neq 0$ e $f_{2j}^{\mu}(x-\mu) = 0$ per $j = 1, \dots, d-1$. Per $q = 1$ l'espressione (5) è l'espansione di Taylor della funzione f. In questo caso k è detto tipo omogeneo del punto di massimo μ.

Si dimostra il seguente

TEOREMA 1. – *Si consideri un sistema di particelle definito dall'Hamiltoniana di campo medio $H_N(\sigma) = -Ng(m_1(\sigma), \dots, m_n(\sigma))$ dove g è la funzione convessa definita dalla* (3). *Sia $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_n)$ l'unico punto di massimo assoluto del funzionale pressione f dato dalla* (4). *Sia k il tipo omogeneo del punto di massimo. Allora quando $N_1 \to \infty, \dots, N_n \to \infty$, per valori fissati di $\alpha_1, \dots, \alpha_n$, il vettore aleatorio*

$$\left(\frac{S_1(\sigma) - N_1\mu_1}{(N_1)^{1-1/2k}}, \dots, \frac{S_n(\sigma) - N_n\mu_n}{(N_n)^{1-1/2k}}\right) \tag{6}$$

1) *se $k = 1$ converge a una distribuzione normale multivariata con matrice di covarianza C di elementi $C_{ls} = \sqrt{\dfrac{\partial \mu_l}{\partial h_s} \dfrac{\partial \mu_s}{\partial h_l}}$;*

2) *se $k > 1$ ha densità proporzionale a*

$$\exp\left(f_{2k}^{\mu}\left(\frac{x_1}{(\alpha_1)^{1/2k}}, \dots, \frac{x_n}{(\alpha_n)^{1/2k}}\right)\right). \tag{7}$$

Nel caso in cui il funzionale pressione f ammetta più di un punto di massimo assoluto, considerato uno di tali punti se il vettore aleatorio delle magnetizzazioni è sufficientemente vicino ad esso, si dimostra che la distribuzione di probabilità del vettore aleatorio (6) ha un comportamento asintotico analogo a quello descritto nel Teorema 1.

4. – Problema inverso

Considerato un campione di M configurazioni di spin $\sigma^{(1)}, \dots, \sigma^{(M)}$ indipendenti e identicamente distribuite secondo la misura di Boltzmann-Gibbs definita in (2), si vogliono determinare i valori da attribuire al parametro di accoppiamento (matrice J) e al campo esterno (vettore h) che massimizzano la probabilità di ottenere il campione dato. La probabilità congiunta del campione (funzione di massima verosimiglianza) è massima quando

$$(8) \qquad \langle m_l(\sigma)\rangle = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} m_l\left(\sigma^{(m)}\right), \qquad \langle m_l(\sigma)m_s(\sigma)\rangle = \frac{1}{M}\sum_{m=1}^{M} m_l\left(\sigma^{(m)}\right)m_s\left(\sigma^{(m)}\right)$$

dove $\langle\cdot\rangle$ denota il valore medio rispetto alla distribuzione di Boltzmann-Gibbs. Si definisce suscettività la matrice di elementi $\chi_{ls} = \partial\mu_l/\partial h_s,\ l,s = 1,\dots,n$ con $(\mu_1,\dots,\mu_n)$ soluzione delle equazioni di campo medio. Nel limite termodinamico vale $\langle m_l(\sigma)\rangle = \mu_l,\ l = 1,\dots,n$ pertanto gli elementi della matrice suscettività possono essere calcolati come $\chi_{ls} = N_s(\langle m_l(\sigma)m_s(\sigma)\rangle - \langle m_l(\sigma)\rangle\langle m_s(\sigma)\rangle)$. Dalla definizione di matrice suscettività si ha:

$$(9) \qquad \begin{aligned} \chi_{ls} &= \frac{\partial}{\partial h_l}\left(\tanh\left(h_l + \sum_{k=1}^{n} \alpha_k J_{lk}\,\mu_k\right)\right) \\ &= (1-m_l^2)\left(\delta_{ls} + \sum_{k=1}^{n} \alpha_k J_{lk}\,\chi_{ks}\right). \end{aligned}$$

dove δ_{ls} denota la delta di Dirac concentrata in $l = s$. La (9), riscritta in forma matriciale come $J = (P^{-1} - \chi^{-1})D^{-1}$ dove $P_{ls} = (1-m_l^2)\delta_{ls}$ mentre $D_{ls} = \alpha_l\delta_{ls}$, permette di ricavare la matrice di accoppiamento J a partire dal valore medio e dalle correlazioni delle magnetizzazioni nel limite termodinamico rispetto alla distribuzione di Boltzmann-Gibbs. Determinato J, gli elementi del campo esterno h si ottengono dalle equazioni di campo medio come $h_l = \tanh^{-1}(\mu_l) - \sum_{k=1}^{n} \alpha_k J_{lk}\,\mu_k$.

BIBLIOGRAFIA

[1] CONTUCCI P. e GHIRLANDA S., *Modeling society with statistical mechanics: an application to cultural contact and immigration*, Quality and Quantity, **41** (2007), 569-578.

[2] ELLIS R.S. e NEWMAN C.M., *Limit theorems for sums of dependent random variables occurring in statistical mechanics*, Probability Theory and Related Fields, **44** (1978), 117-139.

[3] ELLIS R.S., NEWMAN C.M. e ROSEN J.S., *Limit theorems for sums of dependent random variables occurring in statistical mechanics*, Probability Theory and Related Fields, **51** (1980), 153-169.

[4] GALLO I. e CONTUCCI P., *Bipartite Mean Field Spin Systems. Existence and Solution*, MPEJ, **14** (2008).

Dipartimento di matematica, Università di Bologna
e-mail: micaela.fedele2@unibo.it
Dottorato in Matematica, con sede presso l'Università di Bologna – Ciclo XXIII
Direttore di ricerca: Pierluigi Contucci, Università di Bologna