Posudek diplomové práce “Gradient models” posluchače Marka Bernáta

12. září 2012

Modely Gibbsova stavu na d-rozměrné mříži ($d \geq 2$) s Hamiltoniánem typu

$$H(x) = \sum_{|i-j|=1} (x_i - x_j)^2 + \sum_i U(x_i)$$

tedy Dirichletova forma (“gradientní” člen) plus jednočásticový energetický člen typu potenciální “jámy” $U(x_i)$ (s dvěma či více lokálními minimy) jsou jedním z nejdůležitějších a nejjednodušších, základních objektů které studuje matematická statistická fyzika a také kvantová teorie pole. Velká pozornost byla věnována zkoumání fázových přechodů v těchto modelech s použitím různých postupů. Jednou z nejvýznačnějších technik v tomto směru je (od dob fundamentálních článků Simona, Frohlicha, Spencera a dalších v 70. letech) takzvaná metoda “reflection positivity”, které je věnována i předložená práce.

V podstatě jde o pozorování, že zrcadlová symetrie interakcí daného modelu, plus jejich rozložitelnost, pro každou nadrovinu typu $i_k = \text{const}$, $k = 1, \dots d$ na interakce horního poloprostoru plus interakce dolního poloprostoru (fakticky požadavek interakce pouze nejbližších sousedů v daném modelu) umožnuje na příslušné Gibbsově pravděpodobnosti zkonstruovat jistou význačnou bilineární, positivně definitní formu. Ta je tvaru “středni hodnota $\theta F.G$ ” kde θF označuje zrcadlový obraz funkce F, zrcadlí se podél zvolené nadroviny mřížky a obě funkce F,G jsou měřitelné stejně zvoleným poloprostorem (řekněme tím horním) dané reflexe. Vícenásobné použití (podle různých rovin reflexe) Cauchyovy nerovnosti pak umožňuje získat, provedeme li to šikovně, tzv. chessboard estimates což jsou poměrně silné odhady malosti pravděpodobnosti středních hodnot i komplikovaných funkcí od konfigurací. Myšlenka je v tom ta, že zmíněná Cauchyho nerovnost jakoby “zhomogenizuje” postupným zrcadlením jednotlivé úseky dané konfigurace, “rozplemení” je na soustavu prostorově jiz stejnorodých konfigurací resp. událostí, jejichž matematické očekávání se pak efektivně spočte (odhadne) různými metodami; zde například Fourierovou transformací.

Nehledě na nectnosti dané metody - není schopna pracovat s perturbacemi a vyžaduje symetrii potenciálních jam (ten druhý požadavek nemá nic společného se zabezpečením samotné reflection positivity, viz pozn. níže) je to stále asi nejsilnější, co se numerických požadavků na model týče, technický prostředek zkoumání fázových přechodů s dvěma symetricky položenými jamami. Pozn. Pro nesymetrické případy metoda reflection positivity nefunguje, tam je nutno použít konkurenční metody rozvojů, a na ně navazující Pirogov Sinaiovy teorie. V metodě reflection positivity se pracuje přímo s pravěpodobnostmi různých událostí, ne s jejich "vahami" v partiční funkci, naopak P.S. teorie pracuje zásadně s nenormalizovanými "vahami", kterýžto postup dává možnost pracovat i s komplexními Hamiltoniány, a rozšiřovat dosažené výsledky i pro malé perturbace, což metoda reflection positivity z principu neumožnuje.

Pro práci s těmito potenciály se dále velmi hodí další technický prostředek, totiž vyjádření $\exp(-U(x_i)$ "gaussovou transformací" (pozn. tenhle název není standardní, evokuje jakousi analogii Fourierovy/Laplaceovy transformace, kde zakladními kameny nejsou obyčejné exponenciály ale gaussovy křivky) tedy v základním příkladě vyjádření $\exp(-U(x_i)$ jako superpozice dvou gaussovskych funkcí. To vlastně odpovídá zavedení další diskretní proměnné ("nového spinu") s hodnotami $\pm$. Při hodnotě plus pracujeme (v daném bodě mříže) s pravou gaussovskou jamou, při hodnotě minus s levou. Tím se - za cenu trochu komplikovanější (zvláště pro netriviální hraniční podmínky) interpretace nového rozšířeného modelu dostaváme do oblasti práce s čistě gaussovskými modely.

Uvedená práce aplikuje zmíněné, dříve již vyvinuté postupy pro modely s jamami potenciálu $U(x_i)$ na připad čistě gradientních modelů, tedy bez jednospinového potenciálu zato s nekonvexní, párovou interakcí která je gaussovskou transformací dvou delta funkcí: $\exp(-U(x_i - x_j)$ je zde uvažována jako součet dvou gaussovských funkcí stejného tvaru, v proměnné $(x_i - x_j)$. Z technických důvodů je přidána ještě další, dosti tedy umělá podmínka na "silnou vazbu s ob-sousedním spinem" (ve vzdálenosti 2). Takováto podmínka stále zachovává reflekční positivitu a zajistí, aby množina základních stavů nebyla nepřehledně složité struktury. Střední hodnoty obou uvažovaných gaussových funkcí jsou zde symetricky rozloženy kolem nuly. Ukazuje se, že příslušný rozšířený model (který je gaussovský, ovšem tedy za cenu toho, že do výpočtu partiční sumy vstupuje sumace přes další hodnotu diskretního spinu $\pm$) je reflekčně positivní. To vede k otázce efektivního odhadu pravděpodobností "rozsemeněných událostí". Tahleta otázka je technickým jádrem předložené práce, autor v ní používá metody diskrétní Fourierovy transformace k výpočtu volné energie "rozsemeněné události" rozšířeného modelu. Výpočet je proveden detailně pro dvojrozměrnou mřížku, jsou rozebrány všechny možné lokální konfigurace, ve vyšších dimenzích by byl analogický výpočet velmi komplikovaný a lze tam provést pouze hrubší odhady. Tato část diplomky je původním výsledkem autora práce a dle mého názoru si zasluhuje publikaci. Následuje další krok téhle metody, tedy využití zmíněných "chessboard" odhadů k ověření tzv. Peierlsovy podmínky pro (vhodně definované v rozšířeném modelu) kontury rozšířeného modelu. Zde se navazuje - a to je již standardní postup - na dříve provedené chessboard estimates "rozsemeněných" konturů.

Zbytek práce tvoří stručně, ale dobře napsané dodatky na téma Gibbsovy modely v nekonečném objemu (tedy příslušné matematické pojmy pro termodynamickou limitu; veškerá tvrdá práce se ovšem v těchto i jiných zkoumáních dělá na konečném toru libovolného rozměru), algebraická topologie (možná až příliš elegantně obecně pojatá kapitolka vzhledem k používaným aplikacím), grafy (a jejich probíhání cestami), elementy teorie abstraktních pravděpodobnostních jader, elementy teorie representací (hlavně s aplikacemi na diskrétní Fourierovu transformaci). Práce je velmi dobře napsaná, dosti stručně tedy, tu a tam by čtenář asi uvítal doplňující poznámku či ideu důkazu - při odkazu na klíčovou Větu 2.9 například. Našel jsem několik překlepů (místo rovnosti má být nerovnost v (2.3), nejasná zmínka o veličině b uprostřed strany 12, ne vždy dokonalé formulace, je li řeč o "$\pm$ symetrii", nepřesně znějící výrok o absenci fázových přechodů v gaussovských modelech (míni se buď dvojdimensionální případ, nebo nějaká speciálnější formulace s podmínkou hodnoty spinu nula v počátku) které ale nemění mé celkové přesvědčení, že se jedná o velmi kvalitní diplomovou práci.

doc. RNDr. Miloš Zahradník, CSc.

Praha, KMA MFF UK