Μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς σε μοντέλα spin με μηχανές Boltzmann

Γεώργιος Δουλτσίνος

Σεπτέμβριος 2020



Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθήνας

Ευχαριστίες

Η παρούσα εργασία αποτελεί τη διπλωματική εργασία στα πλαίσια του μεταπτυχιακού προγράμματος Φυσική με ειδίκευση στη Πυρηνική Φυσική και Φυσική Στοιχειωδών Σωματιδίων του τμήματος Φυσικής. Πριν την παρουσίαση της, αισθάνομαι την υποχρέωση να ευχαριστήσω ορισμένους από τους ανθρώπους που γνώρισα, συνεργάστηκα μαζί τους και έπαιξαν πολύ σημαντικό ρόλο στην περάτωσή της.

Πρώτο από όλους θέλω να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή της διπλωματικής εργασίας, κ. Φώτιο Διάκονο για την καθοδήγηση του, την εμπιστοσύνη και την εκτίμηση που μου έδειξε καθ΄ όλη τη διάρκεια της εργασίας.

Στη συνέχεια θέλω να ευχαριστήσω τον κ. Δημήτριο Γιαταγάνα για τις συμβουλές, τη συνεργασία του καθώς και για το ίδιο το θέμα της εν λόγω εργασίας.

Επιπλέον οφείλω να ευχαριστήσω τον συμφοιτητή μου Απόστολο Κακαμπάκο για τη συνεργασία μαζί του πάνω στο ερευνητικό κομμάτι της διπλωματικής εργασίας.

Περιεχόμενα

| 1 | Εισ | αγωγή | 4 | | | |
|--------------------|--|---|--|--|--|--|
| | 1.1 | Το μοντέλο Ising | 4 | | | |
| | | 1.1.1 Η αλλαγή φάσης και αυθόρμητη ρήξη συμμετρίας | 6 | | | |
| | | 1.1.2 Το δισδιάστατο μοντέλο Ising | 7 | | | |
| | 1.2 | Η ομάδα αναχανονιχοποίησης (Renormalization Group) | 8 | | | |
| | | 1.2.1 Μετασχηματισμοί block-spin | 8 | | | |
| | | 1.2.2 Στάσιμα σημεία | 10 | | | |
| | | 1.2.3 Η βάθμιση της ελεύθερης ενέργειας | 11 | | | |
| | | 1.2.4 Κρίσιμοι Εχθέτες | 13 | | | |
| | | 1.2.5 Βάθμιση πεπερασμένου μεγέθους | 14 | | | |
| 2 | Μέ | θοδοι Monte Carlo και Μαρκοβιανές Αλυσίδες | 17 | | | |
| | 2.1 | Η μέθοδος της δειγματοληψίας σημαντιχότητας (Importance Sampling) | 17 | | | |
| | 2.2 | Στογαστιχές διεργασίες | 18 | | | |
| | | 2.2.1 Στατιχές Μαρχοβιανές Διεργασίες | 19 | | | |
| | | 2.2.2 Εργοδικότητα | 20 | | | |
| | | 2.2.3 Λεπτομερές Ισοζύγιο | 20 | | | |
| | | 2.2.4 Πιθανότητες επιλογής και αποδογής | 22 | | | |
| | 2.3 | Ο αλγόριθμος του Metropolis | 23 | | | |
| | | 2.3.1 Παραλληλοποίηση | 24 | | | |
| | | 2.3.2 Διανυσματιχοποίηση του Metropolis (Vectorization) | 25 | | | |
| | Μελέτη της χρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising 28 | | | | | |
| 3 | Mε | λέτη της χρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising | 28 | | | |
| 3 | Με 3.1 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 | | | |
| 3 | Με 3.1 3.2 | λέτη της χρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 | | | |
| 3 | Με 3.1 3.2 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση Παραγωγή δεδομένων και ανάλυση κρίσιμης συμπεριφοράς 3.2.1 Η κρίσιμη θερμοκρασία του άπειρου συστήματος και ο εκθέτης ν | 28 28 30 31 | | | |
| 3 | Με 3.1 3.2 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 | | | |
| 3 | Με 3.1 3.2 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 | | | |
| 3 | Με ² 3.1 3.2 Μη | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 | | | |
| 3 | Με ² 3.1 3.2 Μη 4.1 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 25 | | | |
| 3 4 | Μ ε ² 3.1 3.2 Μη 4.1 4.2 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 27 | | | |
| 3 | Μ ε ² 3.1 3.2 Μη 4.1 4.2 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση Παραγωγή δεδομένων και ανάλυση κρίσιμης συμπεριφοράς 3.2.1 Η κρίσιμη θερμοκρασία του άπειρου συστήματος και ο εκθέτης ν 3.2.2 Οι κρίσιμοι εκθέτες γ , α και β χανές Boltzmann Η δομή των Περιορισμένων Μηχανών Boltzmann Μη εποπτευόμενη μάθηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 20 | | | |
| 3 | Mε 3.1 3.2 Mη 4.1 4.2 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 38 20 | | | |
| 3 | Με 3.1 3.2 Μη 4.1 4.2 4.3 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 38 39 | | | |
| 3 4 | Με 3.1 3.2 Μη 4.1 4.2 4.3 Εφα | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 38 39 40 | | | |
| 3 4 5 | Με 3.1 3.2 Μη 4.1 4.2 4.3 Εφc 5.1 | λέτη της χρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 38 39 40 40 | | | |
| 3 4 5 | Mε 3.1 3.2 Mη 4.1 4.2 4.3 Eφc 5.1 5.2 | λέτη της χρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 38 39 40 40 43 | | | |
| 3 4 5 | Mε 3.1 3.2 Mη 4.1 4.2 4.3 Eφc 5.1 5.2 5.3 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 38 39 40 43 44 | | | |
| 3 4 5 | Mε 3.1 3.2 Mη 4.1 4.2 4.3 Eφc 5.1 5.2 5.3 5.4 | λέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | 28 28 30 31 31 33 34 35 37 38 39 40 40 43 44 45 | | | |
| 3 4 5 | Mε 3.1 3.2 Mη 4.1 4.2 4.3 Eφc 5.1 5.2 5.3 5.4 | λέτη της χρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | $\begin{array}{c} 28 \\ 30 \\ 31 \\ 31 \\ 33 \\ 34 \\ 35 \\ 37 \\ 38 \\ 39 \\ 40 \\ 40 \\ 43 \\ 44 \\ 45 \\ 45 \end{array}$ | | | |
| 3 4 5 | Mε 3.1 3.2 Mη 4.1 4.2 4.3 Eφc 5.1 5.2 5.3 5.4 | λέτη της χρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising Κρίσιμη Καθυστέρηση | $\begin{array}{c} 28 \\ 28 \\ 30 \\ 31 \\ 31 \\ 33 \\ 34 \\ 35 \\ 37 \\ 38 \\ 39 \\ 40 \\ 40 \\ 43 \\ 44 \\ 45 \\ 45 \\ 46 \end{array}$ | | | |

1 Εισαγωγή

Τις τελευταίες δεκαετίες, η μηχανική μάθηση και συγκεκριμένα τα νευρωνικά δίκτυα, αποτέλεσαν ένα ισχυρό εργαλείο μελέτης και επίλυσης προβλημάτων σε πολλούς επιστημονικούς τομείς. Παρά την επιτυχία τους σε πρακτικό επίπεδο, ελάχιστα πράγματα είναι γνωστά ως προς την θεωρητική τους μελέτη. Πρόσφατες ωστόσο εφαρμογές στο πεδίο της στατιστικής μηχανικής και της φυσική στερεάς κατάστασης, ανέδειξαν σημαντικές ομοιότητες μεταξύ του τρόπου λειτουργίας τους και των κρίσιμων φαινομένων. Στη παρούσα εργασία, εστιάζουμε ακριβώς σε αυτή η σύνδεση για την περίπτωση του μοντέλου Ising, χρησιμοποιώντας τα νευρωνικά δίκτυα Restricted Boltzmann Machines (RBM).

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται αναφορά στα βασικά θέματα της στατιστικής μηχανικής τα οποία μας απασχόλησαν ξεκινώντας από τη περιγραφή του μοντέλου Ising. Εστιάζουμε στη κρίσιμη συμπεριφοράς του καθώς και στα αποτελέσματα τα οποία προέκυψαν από την αναλυτική λύση του Onsager. Στη συνέχεια, αναπτύσσουμε το βασικό εργαλείο για την μελέτη των κρίσιμων συστημάτων: την ομάδα ανακανονικοποίησης και τις μεθόδους πεπερασμένης βάθμισης. Τα συμπεράσματα από αυτή την ενότητα θα χρησιμοποιηθούν αργότερα για τους υπολογισμούς των κρίσιμων μεγεθών.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται μια θεωρητική εισαγωγή στις μεθόδους προσομοίωσης Monte Carlo. Ξεκινάμε περιγράφοντας αναλυτικά την έννοια των Μαρκοβιανών αλυσίδων και την δειγματοληψία σημαντικότητας, καταλήγοντας στην περιγραφή του αλγόριθμου του Metropolis. Επιπρόσθετα παρουσιάζουμε μια βελτιστοποιημένη εκδοχή του βασισμένη στην λογική της παραλληλοποίησης, την οποία μετέπειτα χρησιμοποιούμε εκτενώς για την καταστάσεων.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται η παρουσίαση των πρώτων μας αποτελεσμάτων. Τα αποτελέσματα αυτά περιλαμβάνουν τους υπολογισμούς των κρίσιμων εκθετών του Ising, της κρίσιμης θερμοκρασίας και τέλος του δυναμικού κρίσιμου εκθέτη του Metropolis.

Στο τέταρτο κεφάλαιο αναπτύσσουμε τη βασική θεωρία γύρω από τα νευρωνικά δίκτυά (RBM). Περιγράφουμε αναλυτικά τη διαδικασία της εκπαίδευσής τους καθώς επίσης και τη μέθοδο τις αντιφατικής απόκλισης που χρησιμοποιήσαμε για αυτό το σκοπό. Τέλος περιγράφουμε τη διαδικασία της ροής RBM, μια έννοια η οποία αναπτύχθηκε τα τελευταία χρόνια με σκοπό την θεωρητική μελέτη των παραπάνω νευρωνικών.

Στο πέμπτο και τελευταίο κεφάλαιο παρουσιάζουμε τα βασικά αποτελέσματα από την μελέτη των RBM. Εκπαιδεύσαμε μηχανές πάνω σε καταστάσεις του Ising και τις χρησιμοποιήσαμε για να μελετήσουμε τη ροή RBM. Υπολογίζοντας θερμοδυναμικές ποσότητες από τις καταστάσεις που παρήγαγε η μηχανή, συμπεράναμε ότι εκπαιδεύοντας κατάλληλα τις μηχανές, η παραπάνω ροή συγκλίνει στην κρίσιμη περιοχή.

1.1 Το μοντέλο Ising

Στις ενότητες που θα ακολουθήσουν θα εστιάσουμε στο πιο μελετημένο σύστημα στατιστικής μηχανικής με αλληλεπιδράσεις: το μοντέλο Ising. Το συγκεκριμένο μοντέλο θα αποτελέσει το κεντρικό αντικείμενο μελέτης αυτής της εργασίας, καθώς στα κεφάλαια 2 και 3 θα μελετηθεί η κρίσιμη συμπεριφορά του με τη χρήση προσομοιώσεων Monte Carlo, ενώ μετέπειτα στο χεφάλαιο 5 θα εφαρμόσουμε σε αυτό μεθόδους της μηχανιχής μάθησης χαι των νευρωνιχών διχτύων.

Το μοντέλο Ising προτάθηκε για πρώτη φορά το 1920 από τον W. Lenz [15] ως μοντέλο για την περιγραφή των σιδηρομαγνητών. Η κεντρική ιδέα στην οποία βασίζεται είναι ότι η μαγνητική συμπεριφορά των υλικών είναι αποτέλεσμα των μαγνητικών διπολικών ροπών των ατομικών spin, τα οποία αλληλεπιδρούν μεταξύ τους μέσω ηλεκτρομαγνητικών δυνάμεων. Οι δυνάμεις αυτές, στις χαμηλές θερμοκρασίες, αναγκάζουν τις ροπές να πάρουν ομόρροπους προσανατολισμούς, αποδίδοντας στο υλικό συνολική μαγνήτιση. Από μία θερμοκρασία και πάνω ωστόσο, το σύστημα υφίσταται αλλαγή φάσης, οι θερμικές διακυμάνσεις προσδίδουν στα spin τυχαίους προσανατολισμούς και τα υλικά συμπεριφέρονται ως παραμαγνήτες.

Στο Ising η ειχόνα αυτή παίρνει μία πιο αφαιρετιχή μορφή: τα spin αντιμετωπίζονται ως δυϊχοί βαθμοί ελευθερίας $s_i = \pm 1$ - οι οποίοι αντιστοιχούν σε δύο δυνατούς προσανατολισμούς των ροπών - και οι αλληλεπιδράσεις τους προκύπτουν εισάγοντας στην χαμιλτονιανή όρους ανάλογους των γινομένων $s_i s_j$. Στην απλούστερη περίπτωση, οι αλληλεπιδράσεις έχουν το ίδιο σθένος J (το οποίο μετριέται σε μονάδες ενέργειας) και αφορούν μόνο spin που έχουν μεταξύ τους σχέση πρώτων γειτόνων. Το μοντέλο επιπλέον επιτρέπει και αλληλεπιδράσεις των βαθμών ελευθερίας με ένα εξωτεριχό πεδίο H. Οι όροι αυτοί είναι γραμμιχοί ως προς τα s_i και η πλήρης χαμιλτονιανή παίρνει την μορφή:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - H \sum_i s_i \tag{1}$$

όπου τα πρόσημα επιλέχθηκαν έτσι ώστε για J > 0 τα γειτονικά σπιν τείνουν να έχουν ομόρροπους προσανατολισμούς - το σύστημα συμπεριφέρεται ως σιδηρομαγνήτης - και ταυτόχρονα τείνουν να προσανατολιστούν με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο.

Ο φασικός χώρος του του παραπάνω συστήματος αποτελείται από όλα τα δυνατά σύνολα τιμών που μπορούν να πάρουν τα N διαφορετικά σπιν του πλέγματος, το πλήθος των οποίων ανέρχεται σε 2^N. Συνεπώς, η συνάρτηση επιμερισμού δίνεται από την έκφραση:

$$\mathcal{Z} = \sum_{s_1 = \pm 1} \sum_{s_2 = \pm 1} \cdots \sum_{s_N = \pm 1} \exp\left[\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \beta H \sum_i s_i\right]$$
(2)

ή ισοδύναμα και πιο συνοπτικά:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{s\}} e^{-\beta \mathcal{H}} \tag{3}$$

Εάν μπορούμε να υπολογίσουμε το παραπάνω άθροισμα, είτε αναλυτικά είτε με την χρήση υπολογιστή, τότε μέσω κατάλληλων παραγωγίσεων τής Z προκύπτει η συμπεριφορά όλων των θερμοδυναμικών ποσοτήτων που θα μας απασχολήσουν. Συγκεκριμένα η μέση μαγνήτιση ανά spin, η μαγνητική επιδεκτικότητα και η ειδική θερμοχωρητικότητα δίνονται από τις παρακάτω εκφράσεις:

$$\langle m \rangle = \frac{1}{N} \langle \sum_{i} s_i \rangle = \frac{1}{N} \frac{\partial \ln \mathcal{Z}}{\partial H}$$
 (4)

$$\chi = \frac{\partial \langle m \rangle}{\partial H} = \beta N(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2) \tag{5}$$

$$c = \frac{\beta^2}{N} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \tag{6}$$

Τέλος, μετατρέποντας το εξωτερικό πεδίο σε τοπική ποσότητα $\sum_i H \sum_i s_i \to H_i s_i$, μπορούμε να υπολογίσουμε και την συνάρτηση συσχέτισης δύο σημείων:

$$G_c(s_i, s_j) = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln \mathcal{Z}}{\partial H_i \partial H_j}$$
(7)

1.1.1 Η αλλαγή φάσης και αυθόρμητη ρήξη συμμετρίας

Η σημασία του μοντέλου Ising, έγκειται στο ότι όπως και οι φυσικοί σιδηρομαγνήτες, μπορεί να βρίσκεται σε δύο διαφορετικές φάσεις: την μη οργανωμένη φάση του (disordered phase) και την οργανωμένη (ordered phase). Η πρώτη περίπτωση εκδηλώνεται στις υψηλές θερμοκρασίες όπου το σύστημα χαρακτηρίζεται από μεγάλη ενέργεια άλλα μηδενική μαγνήτιση. Η φάση αυτή καλείται και συμμετρική καθώς αν αντιστρέψουμε όλα τα σπιν η μακροσκοπική συμπεριφορά του συστήματος παραμένει αμετάβλητη. Εν αντιθέσει, στη μη οργανωμένη φάση η παραπάνω συμμετρία απουσιάζει και τα spin προσανατολίζονται κατά πλειοψηφία σε μία διεύθυνση, αποδίδοντας στο σύστημα μη μηδενική μαγνήτιση. Η φάση αυτή ονομάζεται στο σύστημα και το μαι τα spin προσανατολίζονται κατά πλειοψηφία σε μία διεύθυνση, αποδίδοντας στο σύστημα μη μηδενική μαγνήτιση. Η φάση αυτή ονομάζεται επίσης και σπασμένης συμμετρία ομοτιμίας ($s_i \rightarrow -s_i$) που ικανοποιεί η χαμιλτονιανή (1).



Σχήμα 1: Το διάγραμμα φάσης του μοντέλου Ising

Η μετάβαση από την μία φάση στην άλλη χαλείται αυθόρμητη ρήξη συμμετρίας χαθώς το σύστημα μεταβαίνοντας στην σπασμένη φάση αναγχάζεται να "επιλέξει' τον χυρίαρχο προσανατολισμό των spin. Η αλλαγή αυτή συμβαίνει με μη αναλυτιχό τρόπο, όταν στο σύστημα δεν εφαρμόζεται εξωτεριχό πεδίο (H = 0) χαι η θερμοχρασία έχει την χρίσιμη τιμή της $(T = T_c)$. Στο σημείο αυτό η μαγνήτιση μηδενίζεται απότομα με συνεχή τρόπο (σχήμα 1), ενώ οι δεύτερες παράγωγοι της συνάρτησης επιμερισμού (επιδεχτιχότητα, ειδιχή θερμοχωρητιχότητα) εμφανίζουν απειρισμούς (σχήμα 2,3). Επιπλέον, η δυναμιχή του συστήματος παρουσιάζει συμμετρία βάθμισης με αποτέλεσμα οι συναρτήσεις συσχέτισης να έχουν την παραχάτω μορφή:

$$\frac{\langle s_i s_j \rangle \sim |x_i - x_j|^{-2\Delta_s}}{\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \sim |x_i - x_j|^{-2\Delta_\epsilon}} \tag{8}$$

όπου x_i είναι η θέση του i-0στού σπιν και ο τελεστής της ενέργειας ορίζεται ως $\epsilon_i=s_i\sum_{\langle ij\rangle}s_j.$

Στην εγγύς περιοχή αυτού του σημείου οι θερμοδυναμικές ποσότητες ικανοποιούν νόμους δύναμης της μορφής:

$$\langle m \rangle \sim |T - T_c|^{\beta} \chi \sim |T - T_c|^{-\gamma} c \sim |T - T_c|^{-\alpha}$$

$$(9)$$

Τόσο οι εκθέτες των συναρτήσεων συσχέτισης, όσο και των τελευταίων σχέσεων ονομάζονται κρίσιμοι. Στην ενότητα 1.2.4 θα δούμε ότι είναι ανεξάρτητοι από λεπτομέρειες της δυναμικής - όπως φερ΄ ειπείν τη τιμή του J ή τη γεωμετρία του πλέγματος - αλλά καθορίζονται από πιο θεμελιώδεις ιδιότητες όπως η διάσταση του χώρου και οι συμμετρίες που ικανοποιεί το σύστημα.

1.1.2 Το δισδιάστατο μοντέλο Ising

Ένα από τα βασικά πλεονεκτήματα του μοντέλου Ising είναι ότι στις δύο διαστάσεις, διατίθεται αναλυτική έκφραση για την ελεύθερη ενέργεια του συστήματος (Onsager, 1944) [17]. Η παραπάνω λύση είναι έγκυρη στην περίπτωση του άπειρου συστήματος, απουσία εξωτερικού πεδίου και προβλέπει ότι:

$$-\beta f = \ln 2 + \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta_1 \int_0^{2\pi} d\theta_2 \ln \left[\cosh^2(2\beta J) - 2\sinh(2\beta J)\cos\theta_1\cos\theta_2\right]$$
(10)

Από την παραπάνω έκφραση, προκύπτει ότι η ελεύθερη ενέργεια είναι μη αναλυτική όταν ισχύει:

$$\sinh(2\beta_c J) = 1 \tag{11}$$

καθώς τότε το υπερβολικό ημίτονο παίρνει την ελάχιστη τιμή του, από την ταυτότητα $\cosh^2 x - \sinh^2 x = 1$ ισχύει $\cosh^2(2\beta_c J) = 2$ και το όρισμα του λογαρίθμου γίνεται να μηδενιστεί για $\theta_1 = \theta_2 = 0, 2\pi$. Η κρίσιμη θερμοκρασία του συστήματος υπολογίζεται ως η λύση της παραπάνω εξίσωσης:

$$T_c = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2.267...$$
(12)

Από τη σχέση (10) μπορούν να προκύψουν μέσω κατάλληλων παραγωγίσεων οι αναλυτικές εκφράσεις και των υπολοίπων θερμοδυναμικών ποσοτήτων. Στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε μόνο με το αποκλίνον μέρος τους το οποίο μπορεί να βρεθεί αναπτύσσοντας την (10) στην περιοχή του T_c. Συγκεκριμένα ισχύει:

$$m \sim |T - T_c|^{1/8} \chi \sim |T - T_c|^{-7/4} c_{H=0} \sim \ln |T - T_c|$$
(13)

συνεπώς, οι κρίσιμοι εκθέτες έχουν τις τιμές: $\alpha = 0$, $\beta = 1/4$ και $\gamma = 7/4$. Κατ' επέκταση, μπορούν να βρεθούν και οι εκθέτες των συναρτήσεων συσχέτισης οι οποίες δίνονται από τις εκφράσεις

$$\langle s_i s_j \rangle \sim |x_i - x_j|^{-1/4} \langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \sim |x_i - x_j|^{-1}$$
 (14)

επομένως $\Delta_{\epsilon} = 1/8$ και $\Delta_{\sigma} = 1/2$.

1.2 Η ομάδα ανακανονικοποίησης (Renormalization Group)

Στο κεφάλαιο αυτό θα γίνει μία περιληπτική αναφορά στις πιο σύγχρονες μεθόδους προσέγγισης των κρίσιμων φαινομένων, οι οποίες ομαδοποιούνται υπό τον όρο *ομάδα ανακανονι*κοποίησης. Οι συγκεκριμένες μέθοδοι έχουν τις ρίζες τους στην σωματιδιακή φυσική του '60 και στη κβαντική ηλεκτροδυναμική, όπου εφαρμόστηκαν συστηματικά προκειμένου να απαλειφθούν οι απειρισμοί που προέβλεπε η θεωρία στα πλάτη σκέδασης. Αργότερα όμως, με τη συνεισφορά των Wilson και Kadanof [22], το ίδιο μαθηματικό πλαίσιο αξιοποιήθηκε γενικότερα σε συστήματα πολλών βαθμών ελευθερίας, πέρα των κβαντικών πεδίων. Στην περίπτωση μάλιστα της στατιστικής μηχανικής αποτέλεσε το βασικό θεωρητικό εργαλείο για την περιγραφή των φαινομένων αλλαγής φάσης.

Η κεντρική ιδέα στην οποία βασίζεται η ανακανονικοποίηση είναι ότι οι νόμοι που ικανοποιεί ένα σύστημα εξαρτώνται από την κλίμακα στην οποία το μελετάμε. Ένα ρευστό για παράδειγμα, μακροσκοπικά περιγράφεται πλήρως από τις εξισώσεις Navier-Stokes, σε τάξη όμως μερικών Angstrom απαιτείται η χρήση της ηλεκτρομαγνητικής και της κβαντικής θεωρίας. Κατά την ανακανονικοποίηση, η μετάβαση από τη μια περιγραφή στην άλλη τελείται με συνεχή τρόπο, εφαρμόζονται επαναληπτικά μικρές μεγεθύνσεις στη κλίμακα που εξετάζεται το σύστημα. Σε κάθε επανάληψή, η δυναμική μεταβάλλεται, προσεγγίζοντας σταδιακά αυτή της μακροσκοπικής περιγραφής. Μελετώντας τη φύση αυτών των μεταβολών μπορούν να εξαχθούν σημαντικές ιδιότητες της συμπεριφοράς του συστήματος.

Η αλλαγές στη κλίμακα που περιγράψαμε, στη πράξη συμβαίνουν έμμεσα μέσω της διαδικασίας της *αδροποίησης* (coarse-graining). Κατά την αδροποίηση απαλείφονται σταδιακά οι βαθμοί ελευθερίας που σχετίζονται με διακυμάνσεις του συστήματος σε μικροσκοπικό επίπεδο, προκειμένου να ενσωματωθεί η δυναμική τους στις αλληλεπιδράσεις που εκτελούνται σε ανώτερες κλίμακες. Η διαδικασία αυτή μπορεί να υλοποιηθεί με πολλούς διαφορετικούς τρόπους. Στην περίπτωση για παράδειγμα των κβαντικών πεδίων, εφαρμόζεται συνήθως στον χώρο των ορμών ελαττώνοντας την μέγιστη τιμή Λ (cut-off) που μπορούν να πάρουν οι κυματαριθμοί στο αντίστοιχο ανάπτυγμα Fourier:

$$\Lambda \to \Lambda' = \Lambda/b \tag{15}$$

Στα πλεγματικά μοντέλα από την άλλη, ο φορμαλισμός είναι απλούστερος στον χώρο των καταστάσεων (configuration space), όπου κανείς μπορεί να αφαιρέσει άμεσα βαθμούς ελευθερίας εφαρμόζοντας κατάλληλους μετασχηματισμούς.

Στις επόμενες ενότητες θα αναπτυχθούν οι παραπάνω ιδέες για την περίπτωση του μοντέλου Ising με την χρήση μετασχηματισμών block-spin, ακολουθώντας την λογική της αντίστοιχης ενότητας στο βιβλίο Scaling and Renormalization in Statistical Physics [5] Με την εφαρμογή της ανακανονικοποίησης θα εξαχθούν οι σχέσεις που πρέπει να ικανοποιούν οι κρίσιμοι εκθέτες καθώς και η συμπεριφορά του συστήματος όταν αυτό είναι πεπερασμένο.

1.2.1 Μετασχηματισμοί block-spin

Ας υποθέσουμε ότι διαθέτουμε ένα σύστημα Ising διαστάσεων $L \times L$, το οποίο βρίσκεται σε θερμοκρασία T και μαγνητικό πεδίο H. Η αδροποίηση του μπορεί να υλοποιηθεί με την χρήση κατάλληλων μετασχηματισμών οι οποίοι θα απεικονίζουν τους αρχικούς βαθμούς ελευθερίας $\{s\}$ σε νέους $\{s'\}$. Προκειμένου ωστόσο μια απεικόνιση να μπορεί να θεωρηθεί ισοδύναμη με αλλαγή στην κλίμακα που εξετάζουμε το σύστημα, θα πρέπει αφενός να ελαττώνονται σε

κάθε βήμα οι βαθμοί ελευθερίας, αφετέρου να παραμένει αναλλοίωτη η μακροσκοπική του συμπεριφορά. Οι δύο αυτές ιδιότητες μπορούν να ικανοποιηθούν από πλήθος διαφορετικών μετασχηματισμών. Στην παρούσα εργασία θα χρησιμοποιηθούν οι πιο απλοί από αυτούς: οι μετασχηματισμοί block-spin [5].

Σε ένα μετασχηματισμό block-spin, το αρχιχό πλέγμα $L \times L$ χωρίζεται σε blocks διαστάσεων $b \times b$, χάθε ένα εχ των οποίων παίρνει τη τιμή $s' = \pm 1$, ανάλογα με το ποιος προσανατολισμός πλειοψηφεί στο εσωτεριχό του. Τα blocks θα αποτελέσουν τους αναχανονιχοποημένους βαθμούς ελευθερίας με τους οποίους θα περιγραφεί το σύστημα. Με τον παραπάνω τρόπο οι βαθμοί ελευθερίας του συστήματος ελαιτώνονται χατά έναν παράγοντα b^2 , ενώ ταυτόχρονα εξαλείφεται οποιαδήποτε διαχύμανση τελείται σε αποστάσεις μιχρότερες του ba (όπου a η σταθερά του πλέγματος).

Μαθηματικά, μπορούμε να περιγράψουμε την παραπάνω διαδικασία με την χρήση κατάλληλων προβολικών τελεστών, η λειτουργία των οποίων είναι να κρατούν τους προσανατολισμούς των $\{s'\}$ οι οποίοι ακολουθούν την αρχή της πλειοψηφίας, ενώ ταυτόχρονα να φιλτράρουν όλους τους υπόλοιπους. Για κάθε υποπλέγμα επομένως, ορίζεται ο πίνακας:

$$T(s'; s_1, ..., s_{b^2}) = \begin{cases} 1 & \epsilon \alpha \nu & s' \sum_i s_i > 0 \\ 0 & \alpha \lambda \lambda \iota \omega \varsigma \end{cases}$$
(16)

όπου στη γλώσσα της ομάδας αναχανονιχοποίησης ονομάζεται πυρήνας. Η αναμενόμενη τιμή του γινομένου των πυρήνων σε όλο το πλέγμα, είναι ανάλογη του στατιστιχού βάρους που αντιστοιχεί σε μια χατάσταση των αναχανονιχοποιημένων βαθμών ελευθερίας. Κατά συνέπεια, μπορούμε να ορίσουμε την ανηγμένη χαμιλτονιανή \mathcal{H}' που θα περιγράφει την δυναμιχή τους, σύμφωνα με την έχφραση:

$$e^{-\mathcal{H}'(s')} = \operatorname{Tr}_{s} \prod_{\text{blocks}} T(s'; s_i) e^{-\mathcal{H}(s)}$$
(17)

όπου χάριν απλότητας η αντίστροφη θερμοχρασία $\beta = 1/k_BT$ έχει απορροφηθεί στις παραμέτρους σύζευξης. Χρησιμοποιώντας την ιδιότητα $\sum_{s'} T(s',s) = 1$ αποδειχνύεται ότι:

$$\operatorname{Tr}_{s'} e^{-\mathcal{H}'(s')} = \operatorname{Tr}_{s} e^{-\mathcal{H}(s)}$$
(18)

Η τελευταία σχέση υποδηλώνει ότι η συνάρτηση επιμερισμού πριν και μετά την ανακανονικοποίηση εξακολουθεί να είναι η ίδια. Όσες φορές επομένως και να αδροποιηθεί το σύστημα, η μακροσκοπική φυσική παραμένει αναλλοίωτη.

Η βασική παρατήρηση που πρέπει να γίνει σε αυτό το σημείο είναι ότι οι δύο περιγραφές του συστήματος είναι παρεμφερείς, με την μόνη διαφορά να έγκειται στην δυναμική που ακολουθείται σε κάθε περίπτωση. Στην αρχική, τα spin αλληλεπιδρούσαν μόνο με τους πρώτους γείτονες και το εξωτερικό πεδίο, με σταθερές σύζευξης $K_1 = \beta J$ και $K_2 = \beta H$ αντίστοιχα. Μετά την ανακανονικοποίηση ωστόσο, αφενός οι τιμές τους θα αλλάξουν, αφετέρου θα εμφανιστούν νέες αλληλεπιδράσεις οι οποίες θα συνοδεύονται από παραμέτρους σύζευξης K_3, K_4, \dots

Εφαρμόζοντάς επομένως επαναληπτικά τους block-spin μετασχηματισμούς αλλάζουμε την κλίμακα που μελετάμε το σύστημα, αδροποιώντας τους βαθμούς ελευθερίας:

$$s \to s' \to s'' \to s''' \to \dots \tag{19}$$

ή ισοδύναμα μεταβάλλουμε τις παραμέτρους σύζευξης της χαμιλτονιανής:

$$\{K\} \to \{K'\} \to \{K''\} \to \{K'''\} \to \dots$$
(20)

Όλη η διαδικασία της ανακανονικοποίησης κατά συνέπεια, μπορεί να ιδωθεί ως μια ροή στον αφηρημένο χώρο των παραμέτρων, κάθε σημείο του οποίου δίνεται από το διάνυσμα $\{K\} = (K_1, K_2, ...)$ και αντιστοιχεί σε μια συγκεκριμένη δυναμική των βαθμών ελευθερίας.

Στον χώρο των παραμέτρων εν γένει θα υπάρχουν σημεία οι παράμετροι των οποίων δεν θα μεταβάλλονται από την ανακανονικοποίηση. Τα σημεία αυτά ονομάζονται στάσιμα και αποτελούν τις αφετηρίες και τις απολήξεις οποιασδήποτε ροής. Αν η ροή συγκλίνει από όλες τις διευθύνσεις σε ένα στάσιμο σημείο τότε αυτό καλείται ευσταθές, αντιθέτως, αν διαθέτει έστω και μία που δεν συμβαίνει αυτό ασταθές. Στα ασταθή σημεία το μήκος συσχέτισης οφείλει να είναι άπειρο:

$$\xi = \infty \tag{21}$$

και επομένως περιγράφουν τη μακροσκοπική συμπεριφορά των κρίσιμων συστημάτων.

Με την παραπάνω παρατήρηση εισάγεται η έννοια της παγκοσμιότητας (universality). Σύμφωνα με την παγκοσμιότητα, συστήματα που σε μικροσκοπικό επίπεδο χαρακτηρίζονται από εντελώς διαφορετική δυναμική (δηλαδή διαφορετικά K), παρουσιάζουν ομοιότητες στις κρίσιμη συμπεριφορά τους. Το κριτήριο για να συμβαίνει αυτό είναι τα δύο συστήματα να ελέγχονται από το ίδιο ασταθές σημείο. Στις επόμενες ενότητες θα μελετήσουμε τις συνέπειες ύπαρξης τέτοιων σημείων και από την μελέτη μάλιστα της ροής στην εγγύς περιοχή τους θα προκύψει όλη την πληροφορία για την κρίσιμη συμπεριφορά.

1.2.2 Στάσιμα σημεία

Από τα συμπεράσματα της ενότητας 1.2.1, μπορούμε να περιγράψουμε την ομάδα ανακανονικοποίησης με τη χρήση μιας διαφορίσιμης απεικόνισης:

$$\{K'\} = \mathcal{R}\{K\} \tag{22}$$

Εάν η απεικόνιση $\mathcal R$ περιέχει ένα στάσιμο σημείο $\{K^*\}$, τότε ισχύει:

$$\{K^*\} = \mathcal{R}\{K^*\} \tag{23}$$

Παρόλο που ο μετασχηματισμός \mathcal{R} εν γένει εξαρτάται ασθενώς από την μέθοδο αδροποίησης και τον παράγοντα αλλαγής κλίμακας b, η θέση του $\{K^*\}$ είναι ανεξάρτητη. Ένα στάσιμο σημείο, περιγράφει συστήματα τα οποία είναι αναλλοίωτα κάτω από μετασχηματισμούς κλίμακας και επομένως η ύπαρξή τους προηγείται της διαδικασίας που επιλέξαμε για να τα εντοπίσουμε.

Προχειμένου να μελετηθεί η ροή γύρω από ένα στάσιμο σημείο μπορούμε να γραμμικοποιήσουμε την απεικόνιση (22) αναπτύσσοντας την κατά Taylor στο σημείο {K*}:

$$K_a = K_a^* + \sum_b T_{ab}(K_b - K_b^*) + \dots$$
(24)

όπου $T_{ab} = \partial K'_a / \partial K_b |_{K=K^*}$. Από τα ιδιοδιανύσματα $\{\phi^i\}$ και τις ιδιοτιμές του πίνακα **T**, τα οποία δίνονται από την εξίσωση:

$$\sum_{a} \phi_a^i T_{ab} = \lambda^i \phi_b^i \tag{25}$$

μπορούν να εντοπιστούν οι διευθύνσεις στις οποίες η ροή απομαχρύνεται ή συγκλίνει στο στάσιμο σημείο.

Για αυτό το σχοπό, βολεύει να περιγράψουμε το σύστημα μέσω των παραμέτρων βάθμισης $\{u\}$, οι οποίες αποτελούν γραμμικό συνδυασμό των αποχλίσεων $K_a - K_a^*$ και ορίζονται ως:

$$u_i \equiv \sum_b \phi_a^i (K_a - K_a^*) \tag{26}$$

Το πλεονέκτημα των παραμέτρων αυτών είναι ότι μετασχηματίζονται πολλαπλασιαστικά κάτω από την ανακανονικοποίηση:

$$u'_{i} = \sum_{ab} \phi^{i}_{a} T_{ab} (K_{b} - K^{*}_{b}) = \sum_{b} \lambda^{i} \phi^{i}_{b} (K_{b} - K^{*}_{b}) = \lambda^{i} u_{i}$$
(27)

Επιπλέον, λόγω της ιδιότητας $\mathcal{R}(b)\mathcal{R}(b') = \mathcal{R}(bb')$ συνεπάγεται ότι οι ιδιοτιμές μεταβάλλονται πολλαπλασιαστικά κάτω από την ανακανονικοποίηση $\lambda(b)\lambda(b') = \lambda(bb')$, συνεπώς μπορούμε να θέσουμε $\lambda^i(b) = b^{y_i}$. Ανάλογα την τιμή των εκθετών y_i , μπορούν να διακριθούν οι εξής περιπτώσεις:

- Αν $y_i > 0$, η παράμετρος βάθμησης u_i καλείται συναφής (relevant): επαναλαμβανόμενες ανακανονικοποιήσεις την απομακρύνουν από το στάσιμο σημείο.
- Αν $y_i < 0$, η u_i καλείται μη συναφής (irrelevant): αν ξεκινήσουμε αρκούντως κοντά στο στάσιμο σημείο, κατά τις επαναλήψεις, η τιμή της τείνει στο μηδέν.
- Αν y_i = 0, η u_i καλείται οριακή (marginal). Σε αυτή την περίπτωση, απαιτείται η χρήση όρων ανώτερης τάξης στο ανάπτυγμα (24) για να προσδιοριστεί αν η u_i πλησιάζει ή απομακρύνεται από το στάσιμο σημείο.

Όπως θα δούμε στην ενότητα 1.2.4, οι εκθέτες y_i συνδέονται άμεσα με τους κρίσιμους εκθέτες που συναντώνται σε μία αλλαγή φάσης δεύτερης τάξης.

Η παραπάνω κατηγοριοποίηση αναδεικνύει το μηχανισμό με τον οποίο τα ασταθή σημεία ελέγχουν την μακροσκοπική συμπεριφορά των κρίσιμων συστημάτων. Ας υποθέσουμε ότι ο χώρος των παραμέτρων περιγράφεται επαρκώς από n διαστάσεις και περιέχει ένα στάσιμο σημείο το οποίο διαθέτει m συναφείς ιδιοτιμές. Τότε, θα υπάρχουν n - m μη συναφείς που ορίζουν μία υπερεπιφάνεια διάστασης n - m, η οποία ονομάζεται κρίσιμη. Όλα τα σημεία της κρίσιμης επιφάνειας έλκονται από το ασταθές σημείο και συνεπώς αντιστοιχούν σε συστήματα τα οποία έχουν διαφορετική μικροσκοπική δυναμική αλλά ίδια μακροσκοπική συμπεριφορά. Τα κρίσιμα μοντέλα τα οποία ελέγχονται από το ίδιο στάσιμο σημείο συνιστούν μία τάξη παγκοσμιότητας.

1.2.3 Η βάθμιση της ελεύθερης ενέργειας

Προχειμένου ένα σύστημα να εχδηλώσει την χρίσιμη συμπεριφορά του, αρχεί να ρυθμίσουμε κατάλληλα τις συζεύξεις K_a , έτσι ώστε να "πέσουν"πάνω στην χρίσιμη επιφάνεια. Αυτό μπορεί να γίνει ελέγχοντας *n* μαχροσχοπιχές παραμέτρους, όσες χαι οι συναφείς ιδιοτιμές (όπως η θερμοχρασία, η πίεση χ.λ.π.) από τις οποίες εξαρτώνται άμεσα οι συζεύξεις. Στην περίπτωση του μοντέλου Ising υπάρχουν δύο τέτοιες παράμετροι: η θερμοχρασία *T* χαι το μαγνητικό πεδίο H και επομένως, το στάσιμο σημείο περιέχει δυο συναφείς παραμέτρους βάθμισης. Όταν $T = T_c = 2.269...$ και $H = H_c = 0$ οι συζεύξεις K_1 και K_2 παίρνουν τις κατάλληλες τιμές ώστε να ανήκουν στην κρίσιμη επιφάνεια.



Σχήμα 2: Η ροή ανακανονικοποίησης στο Ising

Ας υποθέσουμε τώρα ότι το σύστημα βρίσκεται πολύ κοντά στο κρίσιμο σημείο του αλλά όχι πάνω σε αυτό. Για απλότητα θέτουμε $t = T - T_c$ και $h = H - H_c = H$, επομένως ισχύει $t \ll 1$ και $h \ll 1$. Η δυναμική του μοντέλου περιγράφεται από δύο συναφείς παραμέτρους βάθμισης $u_t = u_t(t,h)$ και $u_h = u_h(t,h)$ στις οποίες κυριαρχεί η εξάρτηση από την θερμοκρασία και το μαγνητικό πεδίο αντίστοιχα. Ταυτόχρονα από τη στιγμή που το κρίσιμο σημείο απέχει πεπερασμένη απόσταση από το στάσιμο υπάρχουν και m - 2 μη συναφείς παράμετροι u_3, u_4, \ldots, u_m , οι οποίες όμως θα "σβήσουν"μετά από πεπερασμένο αριθμό αδροποιήσεων. Λόγω αναλυτικότητας της ανακανονικοποίησης, μπορούμε να αναπτύξουμε κατά Taylor τις συναφείς παραμέτρους στο σημείο t = h = 0 (στο οποίο και μηδενίζονται), συνεπώς:

$$u_t = t/t_0 + \mathcal{O}(t^2, h^2)$$

$$u_2 \equiv u_h = h/h_0 + \mathcal{O}(th)$$
(28)

όπου οι παράμετροι t_0 και h_0 εξαρτώνται από το μοντέλο προς μελέτη.

Σε αυτό το σημείο είμαστε σε θέση να μελετήσουμε τις συνέπειες της ύπαρξης στάσιμου σημείου για την ελεύθερη ενέργεια $f = -L^{-d} \ln Z$ και κατ' επέκταση για όλες τις υπόλοιπες θερμοδυναμικές ποσότητες. Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 1.2.1, η ανακανονικοποίηση αφήνει αναλλοίωτη τη συνάρτηση επιμερισμού και ελαττώνει τους βαθμούς ελευθερίας κατά ένα παράγοντα b^d (d η διάσταση του χώρου), επομένως ισχύει:

$$f(\{K\}) = g(\{K\}) + b^{-d}f(\{K'\})$$
(29)

Η συνάρτηση g είναι μία αναλυτική συνάρτηση που αντιπροσωπεύει την συνεισφορά στην ελεύθερη ενέργεια των βαθμών ελευθερίας που αδοποιήθηκαν. Η f επομένως μετασχηματίζεται ανομοιογενώς κάτω από την ανακανονικοποίηση. Ωστόσο, κοντά στο κρίσιμο σημείο μας ενδιαφέρει μόνο το αποκλίνον τμήμα της, για το οποίο ισχύει:

$$f_s(\{K\}) = b^{-d} f_s(\{K'\}) \tag{30}$$

Από τη στιγμή που βρισκόμαστε κοντά στο κρίσιμο σημείο, μπορούμε να περιγράψουμε το σύστημα χρησιμοποιώντας τις δύο συναφείς παραμέτρους βάθμισης αντί των συζεύξεων {K}, και επομένως:

$$f(u_t, u_h) = b^{-d} f_s(b^{y_t} u_t, b^{y_h} u_h) = b^{-nd} f_s(b^{ny_t} u_t, b^{y_h} u_h)$$
(31)

όπου έχουμε αδροποιήσει το σύστημα n φορές. Οι u_t και u_h ωστόσο, μεγαλώνουν κατά την ανακανονικοποίηση συνεπώς, το n δεν μπορεί να πάρει οσοδήποτε μεγάλη τιμή καθώς δεν θα ισχύει η γραμμική προσέγγιση της έκφρασης (24). Επιλέγουμε επομένως να σταματήσουμε τις αδροποιήσεις όταν $b^{ny_t} = u_{t0}$ όπου το u_{t0} είναι κατάλληλη σταθερά η οποία μας εξασφαλίζει την ισχύ της γραμμικής προσέγγισης. Λύνοντας την εξίσωση αυτή ως προς n βρίσκουμε:

$$f(u_t, u_h) = |u_t/u_{t0}|^{d/y_t} f_s(u_{t0}, u_h|u_t/u_{t0}|^{-y_h/y_t})$$
(32)

Από τη στιγμή που το αριστερό μέλος της σχέσης (32) δεν εξαρτάται από το u_{t0} , δεν εξαρτάται και το δεξί. Αντικαθιστώντας τώρα τις σχέσεις (28) καταλήγουμε στο ότι:

$$f(t,h) = |t/t_0|^{d/y_t} \Phi(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{-y_h/y_t}})$$
(33)

Ακολουθώντας αντίστοιχη συλλογιστική, μπορούμε να περιγράψουμε την συμπεριφορά του μήκους συσχέτισης κάτω από την ανακανονικοποίηση. Δεδομένου ότι όλα τα μήκη του συστήματος ελαττώνονται κατά έναν παράγοντα b, χρησιμοποιώντας τις συναφείς παραμέτρους μπορούμε να γράψουμε:

$$\xi(u_t, u_h, ...) = |t/t_0|^{1/y_t} \Xi(\frac{h/h_0}{|t/t_0|^{-y_h/y_t}})$$
(34)

Στην επόμενη ενότητα, αξιοποιώντας τις σχέσεις (33) και (34) θα δείξουμε ότι οι κρίσιμοι εκθέτες του συστήματος συνδέονται με απλές σχέσεις με τις συναφείς ιδιοτιμές y_i του στάσιμου σημείου.

1.2.4 Κρίσιμοι Εκθέτες

Οι χρίσιμοι εχθέτες του συστήματος συνδέονται με απλές σχέσεις με τις συναφείς ιδιοτιμές y_i του στάσιμου σημείου. Για να προχύψει αυτή η σύνδεση αρχεί να παραγωγίσουμε χατάλληλα το αποχλίνον μέρος της ελεύθερης ενέργειας. Συγχεχριμένα, αξιοποιώντας τις σχέσεις (33) χαι (34) ισχύει:

• Για την θερμοχωρητικότητα $C = \partial^2 f / \partial t^2 |_{h=0} \sim |t|^{d/y_t-2}$, επομένως:

$$\alpha = 2 - \frac{d}{y_t} \tag{35}$$

• Για την αυθόρμητη μαγνήτιση, όταν t<0 και h=0ισχύει $M=\partial f/\partial h|_{h=0}\sim |t|^{(d-y_h)/y_t}$, επομένως:

$$\beta = \frac{d - y_h}{y_t} \tag{36}$$

• Για την μαγνητική επιδεκτικότητα $\chi = \partial^2 f / \partial h^2 |_{h=0} \sim |t|^{(d-2y_h)/y_t}$, επομένως:

$$\gamma = \frac{2y_h - d}{y_t} \tag{37}$$

• Για t = 0 η μαγνήτιση αποκρίνεται στο εξωτερικό πεδίο σύμφωνα με τον νόμο δύναμης $M = \partial f / \partial h |_{t=0} \sim |h|^{1/\delta}$. Η σύνδεση του δ με τις ιδιοτιμές είναι:

$$M = \frac{\partial f}{\partial h} = |t|^{(d-y_h)/y_t} \Phi'\left(\frac{h}{t^{y_h/y_t}}\right)$$
(38)

Η μέση μαγνήτιση M πρέπει να είναι πεπερασμένη για κάθε τιμή του t. Για να ικανοποιηθεί αυτή η απαίτηση πρέπει να ισχύει $\Phi'(x) \sim x^{d/y_h - 1}$ καθώς $x \to \infty$. Έτσι, στο όριο $t \to 0$, ισχύει ότι: $M \sim |h|^{d/y_h - 1}$, άρα:

$$\delta = \frac{\lambda_h}{d - \lambda_h} \tag{39}$$

• Τέλος για το μήχος συσχέτισης ισχύει ότι $\xi(t) \sim |t|^{\nu}$. Συνεπώς από την σχέση (34) προχύπτει:

$$\nu = \frac{1}{y_t} \tag{40}$$

Από τις παραπάνω εκφράσεις είναι δυνατόν να απαλειφθούν οι ιδιοτιμές y_i και να καταλήξουμε σε ταυτότητες που συνδέουν τους κρίσιμους εκθέτες:

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

$$\alpha + \beta(1 + \delta) = 2$$

$$\alpha + d\nu = 2$$
(41)

Παρόλο που οι παραπάνω σχέσεις αποδείχθηκαν για την περίπτωση της τάξης παγκοσμιότητας του μοντέλου Ising ισχύουν για κάθε τάξη η οποία περιέχει δυο συναφείς ιδιοτιμές: μια θερμική και μία που σχετίζεται με το εξωτερικό πεδίο που σπάει την συμμετρία. Στην ενότητα 1.2.4 θα χρησιμοποιήσουμε τις παρακάτω ταυτότητες προκειμένου να υπολογίσουμε με την χρήση προσομοιώσεων Monte Carlo όλους του κρίσιμους εκθέτες του μοντέλου Ising.

1.2.5 Βάθμιση πεπερασμένου μεγέθους

Τα θερμοδυναμικά συστήματα που συναντάμε στη φύση όσο και οι αντίστοιχες προσομοιώσεις Monte Carlo (στις οποίες θα αναφερθούμε στην ενότητα 2) περιγράφονται σε μικροσκοπικό επίπεδο από πεπερασμένο πλήθος βαθμών ελευθερίας. Σε αντίθεση επομένως με την περίπτωση του άπειρου συστήματος, τα αθροίσματα της μορφής (51) είναι φραγμένα. Το χαρακτηριστικό αυτό καθιστά δυσκολότερη την μελέτη των κρίσιμων φαινομένων καθώς πλέον οι θερμοδυναμικές ποσότητες δίνονται από αναλυτικές συναρτήσεις και οι απειρισμοί που συναντήσαμε στο κεφάλαιο 1.2.4 παύουν να υπάρχουν. Η περιγραφή των αλλαγών φάσης σε αυτή τη περίπτωση γίνεται από την Θεωρία Βάθμισης Πεπερασμένου Μεγέθους (Finite-Size Scaling) [4].

Η θεωρία της πεπερασμένη βάθμισης έχει ως αφετηρία τις μεθόδους που αναφέρθηκαν στην ενότητα 1.2, δηλαδή την ανακανονικοποίηση. Η βασική ωστόσο γενίκευση που απαιτείται να γίνει σε σχέση με πριν, είναι να αντιμετωπιστούν οι διαστάσεις του συστήματος ως επιπλέον μακροσκοπικές παράμετροι, οι τιμές των οποίων θα καθορίζουν την συμπεριφορά του και θα μεταβάλλονται κατά την ανακανονικοποίηση.

Στη περίπτωση ενός συστήματος $N = L^d$ spin (όπου L το μήχος του συστήματος μετρημένο σε μονάδες πλεγματικής σταθεράς), κάτω από μία αλλαγή κλίμακας, ισχύει:

$$L \to L' = b^{-1}L \tag{42}$$

και:

$$L^{-1} \to L'^{-1} = bL^{-1} \tag{43}$$

Το αντίστροφο μήκος επομένως μπορεί να αντιμετωπιστεί ως μια ακόμα relevant παράμετρος, στην οποία αντιστοιχεί η θετική ιδιοτιμή $y_L = 1$. Όταν ισχύει $L^{-1} \neq 0$, το σημείο S που βρίσκεται το σύστημα στον χώρο των παραμέτρων, απέχει πεπερασμένη απόσταση από την κρίσιμη επιφάνεια, ακόμα και όταν οι υπόλοιπες παράμετροι έχουν πάρει τις κατάλληλες τιμές τους. Κατά συνέπεια, μια αλλαγή φάσης εκδηλώνεται μόνο όταν t = h = 0 και επιπρόσθετα $L^{-1} = 0$.

Βάση της τελευταίας παρατήρησης, το αποκλίνον μέρος της ελεύθερης ενέργειας ικανοποιεί τη σχέση:

$$f_s(t,h;L^{-1}) = b^{-d} f_s(b^{1/\nu}t,b^{\lambda_h}h;bL^{-1})$$
(44)

η οποία αποτελεί γενίχευση της (31). Όταν το σύστημα βρίσχεται στη περιοχή βάθμισης, δηλαδή h = 0 χαι $|t| \ll 1$, μπορούμε να εφαρμόσουμε χατ΄ επανάληψη την (44) μέχρις ότου να ισχύει $tb^{n/\nu} = O(1)$:

$$f_s(t, L^{-1}) \sim t^{d\nu} f(1, L^{-1} t^{-\nu}) = t^{d\nu} Q_f(L t^{\nu})$$
(45)

Αχολουθώντας την ίδια συλλογιστιχή, οι προηγούμενες εχφράσεις γενιχεύονται για οποιαδήποτε θερμοδυναμιχή ποσότητα P. Συγχεχριμένα, αν χατά την αλλαγή φάσης του άπειρου συστήματος ιχανοποιείται ο νόμος δύναμης $P(t,\infty) \equiv P_{\infty}(t) \sim |t|^{-p}$, τότε για το πεπερασμένο σύστημα ισχύει:

$$P_L(t) \sim t^{-p} Q_P(Lt^{\nu}) \tag{46}$$

ή ισοδύναμα

$$P_L(t) \sim L^{p/\nu} \tilde{Q}_P(tL^{1/\nu}) \tag{47}$$

οπού οι συναρτήσεις $Q_P(x)$ και $Q_P(x)$ ονομάζονται συναρτήσεις βάθμισης.

Όταν το σύστημα είναι πεπερασμένο, για κάθε τιμή του t οι θερμοδυναμικές ποσότητες είναι αναλυτικές συναρτήσεις. Οι απειρισμοί του άπειρου συστήματος, δίνουν την θέση τους σε απλές μεγιστοποιήσεις των θερμοδυναμικών ποσοτήτων. Από την σχέση (46) και απαιτώντας μηδενισμό της πρώτης παραγώγου μπορεί να εντοπιστεί το σημείο που παρουσιάζεται το μέγιστο. Εκτελώντας τις πράξεις αποδεικνύεται ότι το μέγιστο δεν εμφανίζεται για t=0αλλά είναι συνάρτηση του μεγέθους του συστήματος:

$$t_{pcr} \sim L^{-1/\nu} \tag{48}$$

Η παραπάνω θερμοχρασία ονομάζεται ψευδοκρίσιμη (pseudocritical) και όταν το σύστημα βρίσκεται σε αυτή οι συσχετίσεις απλώνονται σε όλους τους βαθμούς ελευθερίας:

$$\xi(t_{pcr}) \simeq L \tag{49}$$



Σχήμα 3: Η μαγνητική επιδεκτικότητα πεπερασμένου συστήματος

Προκειμένου οι συναρτήσεις βάθμισης να μην απειρίζονται για $t \simeq 0$ απαιτείται στο όριο $x \to 0$ να ισχύει $\tilde{Q}_P(x) \to x^{p/\nu}$. Ο παραπάνω περιορισμός μας οδηγεί στους νόμους βάθμισης των διαφόρων θερμοδυναμικών ποσοτήτων. Συγκεκριμένα αναπτύσσοντας κατά Taylor την \tilde{Q}_P γύρω από το σημείο που παρουσιάζεται το μέγιστο, προκύπτει ότι:

$$P_L = AL^{p/\nu} (1 + BL^{-w} + ...) \tag{50}$$

όπου παραλείφθηκαν όροι χαμηλότερης τάξης.

Η τελευταία σχέση υποδηλώνει ότι οι κορυφές των μεγίστων που παρουσιάζουν οι διάφορες ποσότητες εξαρτώνται από το μέγεθος του συστήματος ικανοποιώντας (σε πρώτη τάξη) νόμους δύναμης. Η ιδιότητα αυτή θα αποτελέσει τον βασικό κορμό των μεθόδων που θα ακολουθηθούν προκειμένου να υπολογιστούν οι κρίσιμοι εκθέτες του μοντέλου Ising μέσω προσομοιώσεων Monte Carlo (κεφ. 3).

2 Μέθοδοι Monte Carlo και Μαρκοβιανές Αλυσίδες

Στο κεφάλαιο αυτό, αναπτύσσεται η βασική θεωρία των υπολογιστικών μεθόδων που ακολουθήσαμε προκειμένου να αναπαράγουμε την θερμοδυναμική συμπεριφορά του μοντέλου Ising. Οι μέθοδοι αυτοί συνοψίζονται από τον όρο Προσομοιώσεις Monte Carlo καθώς η αλγοριθμική τους υλοποίηση βασίζεται στην παραγωγή τυπικών καταστάσεων θερμοδυναμικών μοντέλων με τη χρήση ψευδοτυχαίων αριθμών. Στην συγκεκριμένη εργασία, θα χρησιμοποιήσουμε τις καταστάσεις των προσομοιώσεων αφ΄ ενός για να μελετήσουμε τα φαινόμενα αλλαγής φάσης του Ising (κεφ. 3), αφ΄ ετέρου θα αποτελέσουν το σύνολο πάνω στο οποίο θα εκπαιδευτούν τα νευρωνικά δίκτυα RBM.

2.1 Η μέθοδος της δειγματοληψίας σημαντικότητας (Importance Sampling)

Ας υποθέσουμε ότι έχουμε στην διάθεση μας ένα σύστημα στατιστικής μηχανικής το οποίο βρίσκεται σε ισορροπία με κάποιο περιβάλλον θερμοκρασίας T. Η πιθανότητα το σύστημα να βρίσκεται σε μια μικροκατάσταση μ είναι ανάλογη του παράγοντά Boltzmann $e^{-\beta E_{\mu}}$. Η αναμενόμενη τιμή οποιασδήποτε θερμοδυναμικής ποσότητας Q μπορεί να υπολογιστεί σύμφωνα με την παρακάτω σχέση:

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-E_{\mu}/kT}}{\sum_{\mu} e^{-E_{\mu}/kT}} = \frac{\sum_{\mu} Q_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}}}{Z}$$
 (51)

όπου Q_{μ} είναι η τι
μή που αντιστοιχεί στην κατάσταση μ .

Παρά την απλότητα στη γραφή τους, ο αχριβής υπολογισμός εκφράσεων της παραπάνω μορφής για τα περισσότερα συστήματά με φυσικό ενδιαφέρον είναι αδύνατος. Αφ΄ ενός, μόνο σε ελάχιστα μοντέλα διατίθεται αναλυτική λύση, (όπως το Ising για το οποίο θα αναφερθούμε σε επόμενη ενότητα), αφ΄ ετέρου επειδή, ο υπολογισμός τους μέσω καθαρής υπολογιστικής δύναμής είναι μη πραγματοποιήσιμος ακόμη και για μικρά συστήματα. Για παράδειγμα, ένα πλέγμα 16 × 16, οι κόμβοι του οποίου μπορούν να πάρουν τις τιμές ±1, διαθέτει $2^{256} \approx 10^{77}$ δυνατές καταστάσεις, η απαρίθμηση των οποίων, ακόμα και για έναν υπερυπολογιστή, θα απαιτούσε χρόνο πολλαπλάσιο της ηλικίας του σύμπαντος.

Το πρόβλημά παραμένει ακόμα και αν περιοριστούμε στην προσέγγιση των παραπάνω αθροισμάτων μέσω τυχαίας δειγματοληψίας μικροκαταστάσεων από τον φασικό χώρο. Ένας απλός υπολογιστής, παραδείγματος χάριν, θα μπορούσε να παράγει και να διαχειριστεί μερικά δισεκατομμύρια καταστάσεις του συστήματος 16 × 16. Ωστόσο αυτές αποτελούν μόνο το 10⁻⁶⁸ του συνολικού φασικού χώρου και οι περισσότερες θα είχαν αμελητέους παράγοντες Boltzmann. Οποιοδήποτε αποτέλεσμα βασισμένο σε αυτή την λογική θα ήταν αναξιόπιστο καθώς οι αναμενόμενες τιμές που θα προέκυπταν θα είχαν τεράστια διακύμανση.

Προκειμένου να ξεπεραστεί το πρόβλημα, αρκεί η επιλογή καταστάσεων να μην γίνεται ομοιόμορφα απ΄ όλο τον φασικό χώρο αλλά να επικεντρώνεται στο υποσύνολο των "σημαντικών" καταστάσεων, στις οποίες αντιστοιχούν μεγάλοι παράγοντες Boltzmann. Η παραπάνω συλλογιστική βρίσκεται πολύ κοντά στον τρόπο με τον οποίο εξελίσσονται τα φυσικά συστήματα, στα οποία δεν πραγματοποιούνται ταυτόχρονα όλες οι δυνατές διατάξεις αλλά κυρίως οι πιθανότερες. Για να επιτευχθεί αυτό, απαιτείται το εξής τέχνασμα: η επιλογή κάθε κατάστασης από τον χώρο των φάσεων θα γίνεται με πιθανότητα ανάλογη του παράγοντα Bolzmann $p_{\mu} = Z^{-1}e^{-\beta E_{\mu}}$. Κατά τα παραπάνω και σύμφωνα με την σχέση (51), ο εκτιμητής της Q γίνεται:

$$Q_M = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}}{\sum_{i=1}^M p_{\mu_i}^{-1} e^{-\beta E_{\mu_i}}} = \frac{\sum_{i=1}^M Q_{\mu_i} Z}{\sum_{i=1}^M Z} = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M Q_{\mu_i}$$
(52)

όπου προφανώς, καθώς M τείνει στο άπειρο, ο εκτιμητής Q_M πλησιάζει την αναμενόμενη τιμή $\langle Q \rangle$.

Το ερώτημα πλέον είναι πως θα αναπαραχθεί η κατανομή Boltzmann χωρίς να απαιτείται ο άμεσος υπολογισμός της συνάρτησης επιμερισμού Ζ. Κατάλληλο μαθηματικό πλαίσιο για το παραπάνω αποτελούν οι στοχαστικές διεργασίες Markov διακριτού χρόνου. Όπως θα δούμε στην επόμενη ενότητα, απαιτώντας να έχουν ορισμένες ιδιότητες, οι παραπάνω διεργασίες μετά από ένα σύντομο αριθμό βημάτων συγκλίνουν και αναπαράγουν πιστά την επιθυμητή κατανομή.

2.2 Στοχαστικές διεργασίες

Ως στοχαστική διεργασία ορίζουμε μια οικογένεια τυχαίων μεταβλητών $(X_t)_{t\in I}$ πάνω σε κάποιο σύνολο I. Για την περίπτωση των διακριτών στοχαστικών διεργασιών που θα μας απασχολήσουν, το σύνολο I αναφέρεται στους φυσικούς αριθμούς \mathbb{N} και ο δείκτης t αντιστοιχεί στις διαδοχικές χρονικές στιγμές στις οποίες εξελίσσεται το σύστημα. Χάριν απλότητας θα θεωρήσουμε ότι οι δυνατές καταστάσεις μ που μπορεί να πάρει το σύστημά μας ανήκουν επίσης σε ένα πεπερασμένο σύνολο.

Σε κάθε στοχαστική διεργασία μπορούμε να ορίσουμε τις συναρτήσεις πιθανότητας *n* σημείων:

$$p_n = p_n(\mu_1, t_1; ...; \mu_n, t_n) \tag{53}$$

οι οποίες αντιστοιχούν στην πιθανότητα η διεργασία να περάσει' από την κατάσταση μ_1 την χρονική στιγμή t_1 , από την κατάσταση μ_2 την χρονική στιγμή t_2 ..., από την κατάσταση μ_n την χρονική στιγμή t_n . Οι p_n είναι θετικά ορισμένες και συμμετρικές ως προς οποιαδήποτε μετάθεση των ζευγών μ_i, t_i . Επιπλέον ικανοποιούν την σχέση πληρότητας:

$$\sum_{\mu_n} p_n(\mu_1, t_1; \dots; \mu_n, t_n) = p_{n-1}(\mu_1, t_1; \dots; \mu_{n-1}, t_{n-1})$$
(54)

η οποία για n = 1 ανάγεται στην σχέση κανονικοποίησης: $\sum_{\mu_1} p_1(\mu_1, t_1) = 1$.

Οι συναρτήσεις κατανομής διαφορετικής τάξης μπορούν να συνδεθούν μεταξύ τους με την χρήση δεσμευμένων πιθανοτήτων. Η δεσμευμένη πιθανότητα $p_{k|l}$ των γεγονότων k+1 έως k+l, δεδομένων των γεγονότων 1 έως k, ικανοποιεί την σχέση:

$$p_{k+l}(\mu_1, t_1; ...; \mu_{k+l}, t_{k+l}) = p_k(\mu_1, t_1; ...; \mu_k, t_k) \times p_{k|l}(\mu_{k+1}, t_{k+1}; ...; \mu_{k+l}, t_{k+l}|\mu_1, t_1; ...; \mu_k, t_k)$$
(55)

Από αυτό γίνεται εμφανές ότι οι στοχαστικές διεργασίες εν γένει μπορούν να περιγράψουν φαινόμενα στα οποία το ιστορικό των καταστάσεων από τις οποίες πέρασε το σύστημα καθορίζουν την μετέπειτα εξέλιξή του. Ωστόσο κάτι τέτοιο είναι περιττό για τα περισσότερα θερμοδυναμικά συστήματα, τα οποία σε επίπεδο μικροκαταστάσεων ικανοποιούν δυναμικές εξισώσεις με τοπικότητα ως προς τον χρόνο. Η ιδιότητα αυτή θα πρέπει να αποτυπώνεται και στην εξέλιξή τους σε μακροσκοπικό επίπεδο. Στοχαστικές διεργασίες που πληρούν αυτά τα χαρακτηριστικά ονομάζονται Μαρκοβιανές και έχουν παίξει σημαντικό ρόλο στην ανάλυση τέτοιων συστημάτων.

2.2.1 Στατικές Μαρκοβιανές Διεργασίες

Η κεντρική ιδιότητα των Μαρκοβιανών διεργασιών είναι η απουσία μνήμης: απαιτείται δηλαδή μόνο η γνώση της κατάστασης μ_n του συστήματος την χρονική στιγμή t_n για να υπολογιστεί η πιθανότητα πραγματοποίησης της κατάσταση μ_{n+1} την στιγμή t_{n+1} . Απλό παράδειγμα Μαρκοβιανής διεργασίας αποτελεί ο τυχαίος περίπατος, κατά τον οποίο ένα υλικό σημείο εκτελεί κάθε χρονική στιγμή βήμα, το μήκος του οποίου έρχεται από μια σταθερή κατανομή πιθανότητας. Σε αντιδιαστολή, παράδειγμα μη Μαρκοβιανής διεργασίας αποτελεί ο αυτοαποκλειόμενος τυχαίος περίπατος κατά τον οποίο το υλικό σημείο εκτορή κατανομή πιθανότητας. Σε αντιδιαστολή, παράδειγμα μη Μαρκοβιανής διεργασίας αποτελεί ο αυτοαποκλειόμενος τυχαίος περίπατος κατά τον οποίο το υλικό σημείο απαγορεύεται να διέλθει δύο φορές από την ίδια θέση. Στην περίπτωση αυτή προφανώς απαιτείται η γνώση όλων τον παρελθοντικών καταστάσεων του συστήματος για την μελλοντική του εξέλιξη.

Το χαρακτηριστικό της απουσίας μνήμης απλοποιεί τις εκφράσεις για τις δεσμευμένες πιθανότητες οποιασδήποτε τάξης, οι οποίες πλέον εξαρτώνται μόνο από την τελική και την αρχική κατάσταση και τις αντίστοιχες χρονικές στιγμές:

$$p_{1|n-1}(\mu_n, t_n | \mu_1, t_1; \dots; \mu_{n-1}, t_{n-1}) = p_{1|1}(\mu_n, t_n | \mu_{n-1}, t_{n-1})$$
(56)

όπου οι χρονικές στιγμές t_i είναι διατεταγμένες και ισαπέχουσες.

Οι παραπάνω εχφράσεις απλοποιούνται περαιτέρω αν θεωρήσουμε ότι η δυναμιχή που ιχανοποιεί η στοχαστιχή διεργασία χαραχτηρίζεται από ομοιογένεια ως προς τον χρόνο. Η ιδιότητα αυτή συναντάται ιδιαίτερα συχνά σε προσομοιώσεις συστημάτων στατιστιχής φυσιχής χαι προχύπτει έμμεσα από την ομοιογένεια στον χρόνο που χαραχτηρίζει την δυναμιχή αυτών των συστημάτων σε επίπεδο μιχροχαταστάσεων. Σε αυτή την περίπτωση η δεσμευμένη πιθανότητα της σχέσης (56) εξαρτάται μόνο από την χρονιχή διάφορα $\Delta t = t_{i+1} - t_i$, επομένως μπορούμε να θέσουμε:

$$\Pi_{\mu\nu} \equiv \Pi(\mu \to \nu) \equiv p_{1|1}(\mu, t + \Delta t | \nu, t) \tag{57}$$

Οι διεργασίες αυτού του είδους ονομάζονται στάσιμες. Η ποσότητα $\Pi(\mu \to \nu)$ ονομάζεται πίνακας μετάβασης ή πιθανότητα μετάβαση και είναι σταθερή καθ΄ όλη την εξέλιξη του συστήματος. Προφανώς, εφόσον η διεργασία δεν τερματίζεται, ισχύει η σχέση κανονικοποίησης:

$$\sum_{\nu} \Pi(\mu \to \nu) = 1 \tag{58}$$

Η γνώση του πίναχα μετάβασης $\Pi(\mu \to \nu)$ σε συνδυασμό με την αρχιχή χατανομή $p(\mu,t) \equiv p_{\mu}(t)$ χάποια αρχιχή χρονιχή στιγμή t, περιγράφουν πλήρως την στατιχή Μαρχοβιανή διεργασία. Συγχεχριμένα, χρησιμοποιώντας επαναληπτιχά την έχφραση (55) σε συνδυασμό με τις σχέση (56) χαι (57), προχύπτει ότι:

$$p(\mu_n, t + n\Delta t) = \sum_{\mu_{n-1}} \dots \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_0} \Pi(\mu_n \to \mu_{n-1}) \dots \Pi(\mu_2 \to \mu_1) \Pi(\mu_1 \to \mu_0) p(\mu_0, t)$$
(59)

ή ισοδύναμα σε μορφή πίνακα:

$$\mathbf{p}(t+n\Delta t) = \mathbf{\Pi}^n \cdot \mathbf{p}(t) \tag{60}$$

Η παραπάνω έκφραση αποτελεί τον βασικό σκελετό για την υλοποίηση μιας προσομοίωσης Monte Carlo. Κατά την μέθοδο αυτή, το σύστημα ξεκινάει από μια αρχική κατάσταση μ_0 . Η κατάσταση αυτή τροποποιείται με τυχαίο τρόπο παράγοντας την μ_1 , από την οποία κατασκευάζεται η επόμενη κ.ο.κ. Η διαδικασία επαναλαμβάνεται πολλές φορές και προκύπτει μία Μαρκοβιανή αλυσίδα καταστάσεων:

$$\mu_0 \to \mu_1 \to \dots \to \mu_n \tag{61}$$

Διαλέγοντας κατάλληλα τον πίνακα μετάβασης και ξεκινώντας από μια τυχαία κατάσταση, δύναται, ύστερα από κάποιον αριθμό βημάτων, οι διαδοχικές καταστάσεις να προέρχονται από την κατανομή Boltzmann. Για να επιτευχθεί αυτό ωστόσο απαιτείται η Μαρκοβιανή διεργασία να ικανοποιεί δύο επιπλέον συνθήκες: την "*εργοδικότητα*" και αυτή του "λεπτομερούς ισοζυγίου".

2.2.2 Εργοδικότητα

Η υπόθεση της *εργοδικότητας* αποτελεί μια από τις κεντρικότερες έννοιες της στατιστικής φυσικής. Δηλώνει ότι οι μέσες τιμές ενός θερμοδυναμικού συστήματος κατά την χρονική εξέλιξή του ταυτίζονται με τις μέσες τιμές της συλλογής των μικροκαταστάσεων. Η υπόθεση αυτή δεν ισχύει για όλα τα φυσικά σύστημα και σχετίζεται άμεσα τόσο με την δυναμική όσο και με την ίδια την δομή του φασικού τους χώρου: συστήματα παραδείγματος χάριν που δεν έχουν συνεκτικούς φασικούς χώρους, δεν την ικανοποιούν καθώς κατά την εξέλιξή τους δεν εξερευνούν όλο τον φασικό χώρο, άλλα μόνο το κομμάτι που δεδομένων των αρχικών συνθηκών, είναι προσβάσιμο.

Στη περίπτωση των προσομοιώσεων Monte Carlo, η συλλογιστική είναι αντίστροφη: οι καταστάσεις στις οποίες αντιστοιχεί μη μηδενική πιθανότητα υλοποίησης θα πρέπει να είναι προσβάσιμες από την Μαρκοβιανή αλυσίδα, ανεξάρτητα από την αφετηρία της, σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων. Στην περίπτωση συστημάτων που ικανοποιούν την στατιστική Boltzmann, λόγω της εκθετικής μορφής του παράγοντα $e^{-\beta E_{\mu}}$, όλες οι μικροκαταστάσεις έχουν μη μηδενική πιθανότητα πραγματοποίησης (εκτός από την περίπτωση της μηδενικής θερμοκρασίας). Επομένως οποιοδήποτε ζεύγος μικροκαταστάσεων θα πρέπει να συνδεθεί σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων.

Η συνθήκη της εργοδικότητας μας επιτρέπει παρόλα αυτά να θέτουμε στοιχεία του πίνακα μετάβασης μηδενικά εάν και εφόσον εξακολουθεί να υπάρχει σύνδεση μεταξύ όλων των ζευγών καταστάσεων. Στην πράξη μάλιστα επιλέγονται αλγόριθμοι όπου η πλειοψηφία των στοιχείων του Π_{μν} είναι μηδενικά.

2.2.3 Λεπτομερές Ισοζύγιο

Η δεύτερη συνθήκη που επιβάλουμε είναι αυτή του λεπτομερούς ισοζυγίου. Η συνθήκη αυτή εξασφαλίζει ότι η Μαρκοβιανή διεργασία φτάνει στην ισορροπία και η κατανομή στην οποία συγκλίνει είναι η επιθυμητή.

Αν θεωρήσουμε ότι ο χρόνος βήματος Δt είναι μικρότερος από οποιαδήποτε χαρακτηριστική χρονική κλίμακα, μπορούμε να εκμεταλλευτούμε την τοπικότητα και ομοιογένεια στον χρόνο που ικανοποιούν οι στατικές Μαρκοβιανές διεργασίες και να τις περιγράψουμε χρησιμοποιώντας διαφορικές εξισώσεις. Συγκεκριμένα, η πιθανότητα $p(\mu, t)$ το σύστημα να βρίσκεται στην κατάσταση μ την χρονική στιγμή t ικανοποιεί την $\Delta \epsilon \sigma πόζουσα$ Εξίσωση (Master Equation):

$$\frac{\partial p_{\mu}}{\partial t} = \sum_{\nu} p_{\mu} W(\mu \to \nu) - \sum_{\nu} p_{\nu} W(\nu \to \mu)$$
(62)

όπου ως $W(\mu \to \nu)$ ορίσαμε την πιθανότητα μετάβασης ανά μονάδα χρόνου από την κατάσταση μ στη ν. Η ερμηνεία της παραπάνω σχέσης είναι ιδιαίτερα απλή: ο πρώτος ορός του δεξιού μέλους περιγράφει την αύξηση της πιθανότητας κατάληψης της μ λόγω μεταβάσεων από όλες τις άλλες καταστάσεις ν (ν \neq μ και ν = μ). Ο δεύτερος περιγράφει την μείωσή της $p(\mu)$ λόγω της ακριβώς αντίστροφης διαδικασίας, δηλαδή της μετάβαση από τη μ προς οποιαδήποτε άλλη κατάσταση.

Όταν το σύστημα φτάσει σε στατική ισορροπία η πιθανότητα κατάληψης κάθε μικροκατάστασης δεν μεταβάλλεται με τον χρόνο. Στην περίπτωση αυτή ισχύει: $\partial p/\partial t = 0$ και επομένως:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} W(\mu \to \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} W(\nu \to \mu)$$
(63)

ή ισοδύναμα για τις πιθανότητες μετάβασης:

$$\sum_{\nu} p_{\mu} \Pi(\mu \to \nu) = \sum_{\nu} p_{\nu} \Pi(\nu \to \mu)$$
(64)

Η συνθήκη αυτή είναι ικανή αλλά όχι αναγκαία προκειμένου μια διεργασία να φτάσει σε στατική ισορροπία. Το πρόβλημα έγκειται στο ότι το σύστημα, καθώς ο χρόνος τείνει στο άπειρο, δύναται να οδηγηθεί σε οριακό κύκλο. Συγκεκριμένα αν στη σχέση (60) απαιτήσουμε $t \to \infty$ και για κάποιο n ισχύει:

$$\mathbf{p}(\infty) = \mathbf{\Pi}^n \cdot \mathbf{p}(\infty) \tag{65}$$

Για $n\neq 1$ το σύστημα εμφανίζει ασυμπτωτικά περιοδική συμπεριφορά και συγκλίνει σε οριακό κύκλο περιόδου n.

Προχειμένου να εξασφαλίσουμε ότι το σύστημα δεν θα εγχλωβιστεί σε οριαχό χύχλο πρέπει να επιβάλουμε μια αυστηρότερη συνθήχη από αυτή της απλής ισορροπίας (64): τη συνθήχη της λεπτομερούς ισοζυγίου:

$$p(\mu)\Pi(\mu \to \nu) = p(\nu)\Pi(\nu \to \mu) \tag{66}$$

Η παραπάνω σχέση εξασφαλίζει ότι η συνολική συχνότητα με την οποία γίνεται η μετάβαση από την κατάσταση μ στην ν είναι ίση με την συχνότητα της ακριβώς αντίστροφης διαδικασίας. Η συμμετρία αυτή απαλλάσσει το σύστημα από τους οριακούς κύκλους, καθώς οι μεταβάσεις μεταξύ των καταστάσεων που ανήκουν σε αυτούς συμβαίνουν με μονόδρομο τρόπο. Άπαξ και αφαιρεθούν οι οριακοί κύκλοι η διεργασία τείνει προς την στατική ισορροπία. Επιπλέον, αναδιατάσσοντας την (66) μας δίνεται η σχέση που πρέπει να πληρούν οι πίνακες μετάβασης προκειμένου η Μαρκοβιανή αλυσίδα να συγκλίνει στην κατανομή Boltzmann:

$$\frac{\Pi(\mu \to \nu)}{\Pi(\nu \to \mu)} = \frac{p_{\nu}}{p_{\mu}} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}$$
(67)

Η συνθήκη του λεπτομερούς ισοζυγίου μας δίνει ελευθερία στην επιλογή των πινάκων μετάβασης καθώς δεν δεσμεύει άμεσα τις ποσότητες $\Pi(\mu \to \nu)$ αλλά μόνο τον λόγο μεταξύ της ευθείας και της αντίστροφης διαδικασίας $\Pi(\mu \to \nu)/\Pi(\nu \to \mu)$. Μια απλή επιλογή που πληροί την (67) είναι η παρακάτω:

$$\Pi(\mu \to \nu) \propto e^{-\frac{1}{2}\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} \tag{68}$$

Η συγκεκριμένη περίπτωση ωστόσο είναι ιδιαίτερα αναποτελεσματική για το χτίσιμο προσομοιώσεων Monte Carlo, καθώς η πιθανότητα το σύστημα να μεταβεί σε νέα κατάσταση είναι αρκετά μικρή και ο αλγόριθμος συγκλίνει αργά.

Στόχος μας πλέον είναι η κατάλληλη επιλογή των πινάκων μετάβασης, προκειμένου η μέθοδος της σημαντικής δειγματοληψίας να γίνει ταχύτερη. Στην επομένη ενότητα θα ασχοληθούμε με το παραπάνω ερώτημα στα πλαίσια του μοντέλου Ising στις δύο διαστάσεις. Εκεί θα αναπτύξουμε έναν από τους πιο διαδεδομένους αλγορίθμους, αυτόν του Metropolis[], ο οποίος έχει αποδειχθεί ιδιαίτερα χρήσιμος σε πολλές περιπτώσεις.

2.2.4 Πιθανότητες επιλογής και αποδοχής

Το βασικό τέχνασμα που ακολουθείται προκειμένου να επιτευχθεί γρήγορη σύγκλιση σε μία προσομοίωση Monte Carlo είναι η παραγοντοποίηση της πιθανότητας μετάβασης $\Pi(\mu \to \nu)$ στην πιθανότητα επιλογής $g(\mu \to \nu)$ και στην πιθανότητα αποδοχής $A(\mu \to \nu)$:

$$\Pi(\mu \to \nu) = g(\mu \to \nu) A(\mu \to \nu) \tag{69}$$

Η $g(\mu \to \nu)$ αντιστοιχεί στην πιθανότητα ο αλγόριθμος να επιλέξει την κατάσταση ν από τον φασικό χώρο (ξεκινώντας από την μ), ενώ η $A(\mu \to \nu)$ αντιστοιχεί στην πιθανότητα η νέα αυτή κατάσταση να γίνει αποδεκτή και να αποτελέσει το επόμενο στοιχείο της αλυσίδας. Κάθε φορά που μια κατάσταση απορρίπτεται το σύστημα παραμένει εκεί όπου ξεκίνησε $(\mu \to \mu)$.

Χαρακτηριστικό κάθε αποτελεσματικού αλγόριθμου είναι η δυνατότητα να αποδέχεται και να μεταβαίνει σε διαφορετικές καταστάσεις όσο το δυνατόν συχνότερα. Εάν παραμένει για πολύ χρόνο σε μια κατάσταση τότε τα αθροίσματά της μορφής (52) θα αργούν να συγκλίνουν στην αναμενόμενη τιμή τους. Αυτό είναι και το βασικό πρόβλημα της σχέσης (68) που αναφέραμε στο τέλος της ενότητας 2.2.3: στις περισσότερες μεταβάσεις η αντίστοιχη πιθανότητα είναι εκθετικά μικρή, οπότε και απορρίπτονται. Στόχος επομένως είναι να συμπεριληφθεί όσο το δυνατόν περισσότερη πληροφορία για τις καταστάσεις μ και ν στην $g(\mu \rightarrow \nu)$ ενώ ταυτόχρονα να μεγιστοποιηθεί η $A(\mu \rightarrow \nu)$ για όσο το δυνατό περισσότερες μεταβάσεις.

Από την άλλη, ένα σύστημα σε θερμική ισορροπία, κατά την χρονική εξέλιξή του, καταλαμβάνει κυρίως μικροκαταστάσεις οι οποίες βρίσκονται σε μία λεπτή ενεργειακή ζώνη στον φασικό χώρο. Ενέργειες εκτός αυτής της περιοχής είτε δεν είναι επαρκώς εκφυλισμένες είτε έχουν μικρούς παράγοντες Boltzmann. Ιδανικά, θα θέλαμε η προσομοίωση να περνάει όσο το δυνατόν περισσότερο χρόνο σε αυτή την περιοχή. Ο πιο απλός τρόπος να το επιτύχουμε αυτό είναι κάθε κατάσταση της αλυσίδας να διαφέρει από την προηγούμενη μόνο ως προς την τιμή ενός βαθμού ελευθερίας. Αλγόριθμοι που ικανοποιούν αυτό το χαρακτηρισμό ονομάζονται τοπικοί.

2.3 Ο αλγόριθμος του Metropolis

Ο πιο διαδεδομένος και καλά μελετημένος αλγόριθμος Monte Carlo είναι αυτός του Metropolis. Περιγράφηκε για πρώτη φορά από τον Nicolas Metropolis το 1953 [16] για την προσομοίωση αερίου σκληρών σφαιρών (hard sphere gas). Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος έχει αποδειχθεί ιδιαίτερά αποτελεσματικός σε πολλές περιπτώσεις θερμοδυναμικών συστημάτων, στην παρούσα εργασία ωστόσο, θα τον αναπτύξουμε στα πλαίσια του βασικού πεδίου εφαρμογής του: τα μοντέλα spin και συγκεκριμένα το Ising.

Ο Metropolis αχολουθεί την συλλογιστική που αναφέραμε στις ενότητες 2.2.2 έως 2.2.4. Είναι τοπικός αλγόριθμος, άρα διαδοχικές καταστάσεις στην αλυσίδα Μαρκόβ διαφέρουν το πολύ στον προσανατολισμό ενός spin (single-spin-flip δυναμική). Η επιλογή κάθε νέας κατάστασης γίνεται ισοπίθανα, συνεπώς σε ένα σύστημα με N spin, η πιθανότητα επιλογής είναι:

$$g(\mu \to \nu) = g(\nu \to \mu) = \frac{1}{N}$$
(70)

εάν οι μ και ν διαφέρουν σε ένα spin, ενώ είναι μηδέν για όλες τις άλλες μεταβάσεις. Η συγκεκριμένη πιθανότητα επιλογής εξασφαλίζει, με τετριμμένο τρόπο, την εργοδικότητα του αλγορίθμου: δυο καταστάσεις διαφέρουν μόνο σε πεπερασμένο πλήθος spin, τα οποία μπορούν να αντιστραφούν στα επόμενα βήματα με μη μηδενική πιθανότητα.

Αντικαθιστώντας την σχέση (70) στην συνθήκη της λεπτομερούς ισοζυγίου προκύπτει:

$$\frac{\Pi(\mu \to \nu)}{\Pi(\nu \to \mu)} = \frac{A(\mu \to \nu)g(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)g(\nu \to \mu)} = \frac{A(\mu \to \nu)}{A(\nu \to \mu)} = e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})}$$
(71)

Η σχέση (71), δεσμεύει μόνο τον λόγο μεταξύ των πιθανοτήτων αποδοχής. Δίνεται επομένως η δυνατότητα να τις πολλαπλασιάσουμε με οποιονδήποτε θετικό αριθμό θέλουμε, προχειμένου να τις αυξήσουμε. Η μόνη προϋπόθεση είναι οι ποσότητες $A(\mu \rightarrow \nu)$ να συνεχίσουν να εκφράζουν πιθανότητα, δηλαδή να παίρνουν τιμές στο διάστημα 0 έως 1.

Στην περίπτωση του Metropolis, ξεκινάει κανείς από την έκφραση (68). Κατόπιν, από τις δυο πιθανότητες $A(\mu \to \nu)$ και $A(\nu \to \mu)$ διαλέγουμε την μεγαλύτερη, η οποία αντιστοιχεί σε $\Delta E \leq 0$, και την κανονικοποιούμε στη μονάδα. Ταυτόχρονο διαιρούμε την αντίστροφη διαδικασία με τον ίδιο παράγοντα κανονικοποίησης. Ως αποτέλεσμα, οι πιθανότητες αποδοχής δίνονται πλέον από την παρακάτω έκφραση:

$$A(\mu \to \nu) = \begin{cases} 1 & εάν E_{\nu} - E_{\mu} \le 0 \\ e^{-\beta(E_{\nu} - E_{\mu})} & αλλιώς \end{cases}$$
(72)

Η παραπάνω επιλογή βελτιώνει σημαντικά τη συχνότητα αποδοχής νέων καταστάσεων. Στο διάγραμμα που ακολουθεί γίνεται σύγκριση του Metropolis με την πιο "φυσική επιλογή "που αναφέρεται στη σχέση (68). Όπως είναι εμφανές ο Metropolis αποδέχεται πιο εύκολα νέες καταστάσεις για κάθε ΔE .



Σχήμα 4: Πιθανότητα αποδοχής στον Metropolis

Συνοψίζοντας, ο αλγόριθμος του Metropolis αποτελείται από τα εξής βήματα:

- 1. Ξεκινάμε με μια κατάσταση του συστήματος όπου οι προσανατολισμοί των spin είναι τυχαίοι (hot start)
- 2. Διαλέγουμε τυχαία ένα spin και του αντιστρέφουμε τον προσανατολισμό
- 3. Εάν με αυτόν τον τρόπο ρίχνουμε την ενέργεια του συστήματος ($\Delta E \leq 0$), αποδεχόμαστε την νέα κατάσταση με πιθανότητα 1.
- 4. Εάν αυξάνουμε την ενέργεια του συστήματος ($\Delta E > 0$) αποδεχόμαστε την νέα κατάσταση με πιθανότητα $\exp(-\beta\Delta E)$ Εάν απορρίψουμε την κατάσταση επαναφέρουμε τον προσανατολισμό του spin στην αρχική του φορά.
- 5. Επαναλαμβάνουμε την διαδικασία από το βήμα 2.

2.3.1 Παραλληλοποίηση

Στην παρούσα εργασία θα χρησιμοποιήσουμε μια ελαφρά τροποποιημένη εκδοχή του Metropolis από την κλασική που αναλύσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Η αλλαγές που θα κάνουμε σχετίζονται με την επιλογή των καταστάσεων, δηλαδή με τον πίνακα $g(\mu \rightarrow \nu)$, και θα έχουν ως στόχο την επιτάχυνση του μέσω παραλληλοποίησης. Η πιθανότητες αποδοχής ωστόσο, οι οποίες αποτελούν και τον πυρήνα του αλγορίθμου, παραμένουν οι ίδιες και εξακολουθούν να δίνονται από την (72).

Προχειμένου να παραλληλοποιήσουμε τον αλγόριθμο πρέπει να τον χωρίσουμε σε τμήματα, τα οποία είναι εντελώς ανεξάρτητα μεταξύ τους. Σημαντική βοήθεια σε αυτό αποτελεί το γεγονός ότι το μοντέλο Ising περιέχει αλληλεπιδράσεις μόνο πρώτων γειτόνων (sort range interactions). Ο υπολογισμός επομένως την ενεργειαχής διαφοράς ΔE μεταξύ της υποψηφίας νέας κατάστασης και της προηγούμενης (βήμα 2), εξαρτάται αποκλειστικά από τον προσανατολισμό των πρώτων γειτόνων του spin που επιλέξαμε να αντιστρέψουμε. Συγκεκριμένα εάν επιλέξουμε το spin k ισχύει ότι:

$$\Delta E = -2\sigma_k \sum_{n.n.ofk} \sigma_i^{(k)} \tag{73}$$

Κατά συνέπεια, για να υπολογίσουμε το ΔE δεν χρειάζεται να ασχοληθούμε με ολόκληρο το πλέγμα παρά μόνο με την περιοχή του σ_k .

Η παραπάνω σχέση πέραν από ότι περιορίζει δραστικά τον αριθμό των πράξεων που πρέπει να εκτελέσει ο υπολογιστής, σκιαγραφεί και τον τρόπο που θα παραλληλοποιήσουμε τον αλγόριθμο. Συγκεκριμένα, δυο διαδοχικά βήματα του Metropolis είναι δύο ανεξάρτητα πειράματα τύχης εάν και μόνο αν τα spin που θα επιλεγούν από την $g(\mu \rightarrow \nu)$ δεν είναι μεταξύ τους πρώτοι γείτονες. Εάν η επιλογή γίνεται τυχαία, η πιθανότητα να συμβεί αυτό είναι $z/N \neq 0$, όπου N το πλήθος των σπιν και z το πλήθος των πρώτων γειτόνων (στην περίπτωση d = 2 για καρτεσιανό πλέγμα z = 4). Όταν μάλιστα εκτελούνται k επαναλήψεις, η πιθανότητα να συμβεί αυτό ακολουθεί την διωνυμική κατανομή και για $k \rightarrow \infty$ τείνει στη βεβαιότητα. Για να ξεπεραστεί αυτό το πρόβλημα θα πρέπει αναγκαστικά η επιλογή των σπιν να γίνει με ντετερμινιστικό τρόπο.

Ένας αποτελεσματικός τρόπος για να γίνουν τα παραπάνω, χωρίς ταυτόχρονα να παραβιαστεί η εργοδικότητα, είναι η μέθοδος της αποσύνθεσης σκακιέρας (checkboard decomposition) [13]. Χωρίζουμε το πλέγμα σε λευκά και μαύρα τετράγωνα, έτσι ώστε κάθε λευκό να έχει πρώτους γείτονες μαύρα και ανάποδα. Ο αλγόριθμος αρχικά σαρώνει τα λευκά τετράγωνα και τα αντιστρέφει ένα-ένα χρησιμοποιώντας το κριτήριο (72) και τη σχέση (73) για τις ενεργειακές διαφορές. Από την στιγμή που προσπερνιούνται τα μαύρα, οι μεταβάσεις που πραγματοποιούν τα λευκά είναι στοχαστικά ανεξάρτητες, συνεπώς μπορούν να εκτελούνται ταυτόχρονα και να παραλληλοποιηθούν. Κατόπιν, η διαδικασία επαναλαμβάνεται με τον ίδιο τρόπο για τα μαύρα. Κάθε επανάληψη της διαδικασίας ονομάζεται βήμα Monte Carlo (MCS) και αντιστοιχεί σε μία πλήρη σάρωση του πλέγματος. Με αυτό τον τρόπο, αν ένας επεξεργαστής διαθέτει *n* ανεξάρτητους πυρήνες μπορεί να εκτελεί τις πράξεις για κάθε κόμβο ίδιου χρώματος ταυτόχρονα σε ξεχωριστό πυρήνα και ο αλγόριθμος να επιταχυνθεί αντίστοιχα *n* φορές.

Η παραπάνω μέθοδος μπορεί να γενικευτεί για οποιοδήποτε πλέγμα στις δυο διαστάσεις, οσοδήποτε σύνθετο και αν είναι. Σύμφωνα με το θεώρημά των τεσσάρων χρωμάτων (four color theorem) [2] αρκούν τέσσερα χρώματα για να χρωματίσουμε ένα δισδιάστατο πλέγμα χωρίς δυο γειτονικοί κόμβοι να έχουν το ίδιο. Ο αλγόριθμος επομένως μπορεί να σπάσει σε τέσσερις φάσεις, σε κάθε μία εκ των οποίων σαρώνονται κόμβοι ίδιου χρώματος.

Αχόμα και σε αυτή τη γενική περίπτωση, ο αλγόριθμος εξαχολουθεί και σέβεται την αρχή της εργοδικότητας, αφού σε μία πλήρη σάρωση όλου του πλέγματος (και τα τέσσερα χρώματα), η πιθανότητα να αντιστραφούν μόνο τα spin που διαφέρουν δύο καταστάσεις (μ και ν) είναι μη μηδενική. Επιπλέον, διατηρεί όλα τα βασικά χαρακτηριστικά του κλασικού Metropolis, καθώς οι πιθανότητες αποδοχής δίνονται από τις ίδιες εκφράσεις.

2.3.2 Διανυσματικοποίηση του Metropolis (Vectorization)

Πολλές μοντέρνες γλώσσες προγραμματισμού έχουν την ικανότητα να γενικεύουν τις πράξεις μεταξύ βαθμωτών ποσοτήτων σε ολόκληρα σύνολα τιμών. Στην γλώσσα της επιστήμης υπολογιστών, το παραπάνω χαρακτηριστικό αναφέρεται ως διανυσματικός προγραμματισμός και επιτρέπει πράξεις μεταξύ διανυσμάτων, πινάκων και πολυδιάστατων τανυστών χωρίς την χρήση for loop. Στην περίπτωση μάλιστα της γλώσσας Python και της προέκτασης NumPy, που χρησιμοποιήσαμε για την υλοποίηση του αλγορίθμου, οι πράξεις μεταξύ διανυσμάτων

είναι σημαντικά ταχύτερες. Συνεπώς, ένα κομμάτι κώδικα της μορφής

$$c = a + b$$

εκτελείται σε πολύ λιγότερο χρόνο από το αντίστοιχο

for i in range(n):

$$c[i] = a[i] + b[i]$$

παρόλο που μαθηματικά είναι εντελώς ισοδύναμα. Προκειμένου επομένως να επιταχύνουμε τον αλγόριθμο χρειαζόμαστε μια διανυσματικοποιημένη εκδοχή του, όπου κάθε βήμα Monte Carlo θα εκτελείται μέσω πράξεων με κατάλληλους τυχαίους πίνακες.

Η διαδικασία της διανυσματικοποίησης που χρησιμοποιήσαμε στην παρούσα εργασία βασίζεται στην λογική της αποσύνθεσης σκακιέρας (checkboard decomposition). Συγκεκριμένα κατασκευάζουμε τους τυχαίους πίνακες **A** και **M** οι οποίοι μπορούν να αντιστρέψουν κάποια από τα λευκά και κάποια από τα μαύρα τετράγωνα αντίστοιχα. Οι πίνακες δρουν σε μια κατάσταση μ πολλαπλασιάζοντας στοιχείο προς στοιχείο τα spin. Οφείλουν επομένως να έχουν τις ίδιες διαστάσεις με το πλέγμα $L \times L$ και τα στοιχεία τους να είναι είτε +1 για τα σπιν που δεν αντιστρέφουν, είτε -1 για τα spin που αντιστρέφουν. Κάθε νέα κατάσταση στην αλυσίδα Monte Carlo μ' θα δίνεται από την σχέση:

$$\mu' = \mathbf{A} * (\mathbf{M} * \mu) \tag{74}$$

όπου ο αστερίσκος "*" συμβολίζει τον πολλαπλασιασμό πινάκων στοιχείο προς στοιχείο.

Για να επιλέξουμε τα στοιχεία των τυχαίων πινάχων που θα έχουν την τιμή -1 αχολουθούμε την έχφραση (72) για την πιθανότητα αποδοχής του Metropolis. Αρχικά κατασκευάζουμε τον πίνακα

$$E_{ij} = -\sigma_{ij}(\sigma_{i+1,j} + \sigma_{i-1,j} + \sigma_{i,j+1} + \sigma_{i,j-1})$$
(75)

τα στοιχεία του οποίου αντιστοιχούν στην ενέργεια κάθε κόμβου του πλέγματος. Χρησιμοποιώντας πράξεις μεταξύ πινάκων μπορούμε να τον υπολογίσουμε με την χρήση ενός πίνακα D της μορφής:

$$D_{ij} = \delta_{i+1,j} + \delta_{i-1,j} \tag{76}$$

τα στοιχεία του οποίου είναι όλα μηδέν εκτός από αυτά που βρίσκονται πλευρικά της κύριας διαγωνίου που είναι μονάδες. Συνεπώς, ο πίνακας Ε δίνεται από την έκφραση:

$$\mathbf{E} = -\mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{D} \tag{77}$$

όπου υπονοείται ο συνήθης πολλαπλασιασμός μεταξύ πινάχων. Έπειτα, κατασχευάζουμε ένα πίναχα R, τα στοιχεία του οποίου είναι τυχαίοι αριθμοί ομογενώς κατανεμημένοι στο διάστημα (0,1). Χρησιμοποιώντας τους δύο αυτούς πίναχες προχύπτει ο A σύμφωνα με την σχέση:

$$A_{ij} = \text{sgn}(e^{-E_{ij}/T} - R_{ij}) \tag{78}$$

και κατόπιν θέτοντας τα στοιχεία που αντιστοιχούν σε μαύρα τετράγωνα ίσα με την μονάδα. Τέλος, για να κατασκευάσουμε τον **M** πρώτα δρούμε με τον **A** στην κατάσταση μ, υπολογίζουμε εκ νέου τον πίνακα **E** και χρησιμοποιούμε την σχέση (78) θέτοντας ωστόσο τώρα την τιμή 1 για τα στοιχεία του πίνακα που δρουν στα λευκά τετράγωνα. Με αυτόν τον τρόπο προκύπτει η νέα κατάσταση μ' .

Όλες επομένως οι μεταβάσεις στην αλυσίδα Monte Carlo υλοποιούνται μέσω διαδοχικών εφαρμογών πινάκων την παραπάνω μορφής.

$$\mu_0 \xrightarrow{*A_0,*M_0} \mu_1 \xrightarrow{*A_1,*M_1} \mu_2 \xrightarrow{*A_2,*M_2} \dots$$
(79)

Με τον παραπάνω τρόπο, καταφέραμε να επιταχύνουμε τον αλγόριθμο κατά περίπου 60 φορές.

3 Μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του μοντέλου Ising

Στην ενότητα αυτή θα αξιοποιήσουμε τις τεχνικές που αναπτύχθηκαν στο κεφάλαιο 1.2 με βασικό στόχο τον υπολογισμό των κρίσιμων εκθετών, καθώς και της κρίσιμης θερμοκρασίας του άπειρου συστήματος για την περίπτωση του δισδιάστατου μοντέλου Ising. Αφετηρία για τα παραπάνω αποτελεί η σχέση (50) που αποδείξαμε με την χρήση μεθόδων πεπερασμένης βάθμισης. Για τον σκοπό αυτό κατασκευάσαμε πλήθος καταστάσεων στην κρίσιμη περιοχή χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο του Metropolis.

Η βασική δυσκολία σε αυτού του είδους τις μετρήσεις έρχεται από το γεγονός ότι η διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς είναι περιορισμένη. Συνεπώς, κατά την εκτέλεση του προγράμματος, αναγκαστικά περιοριζόμαστε σε πεπερασμένα πλέγματα όπως επίσης και σε πεπερασμένο πλήθος επαναλήψεων στην εκτέλεση του αλγόριθμου. Τα συστηματικά σφάλματα που προκύπτουν από τον πρώτο περιορισμό αναπτύχθηκαν στην ενότητα 1.2.5, όπου με την χρήση μεθόδων της ομάδας ανακανονικοποίησης, αποδείξαμε πως διάφορες θερμοδυναμικές ποσότητες στην κρίσιμη περιοχή εξαρτώνται από το μήκος του συστήματος μέσω νόμων δύναμης που προκύπτουν από τους κρίσιμους εκθέτες της τάξης παγκοσμιότητας που ανήκει το σύστημα. Στις παραγράφους που ακολουθούν θα εστιάσουμε στην δεύτερη πηγή συστηματικών σφαλμάτων, δηλαδή στον πεπερασμένο αριθμών επαναλήψεων της εκτέλεσης του αλγορίθμου.

3.1 Κρίσιμη Καθυστέρηση

Έστω ότι διαθέτουμε \mathcal{N} διαδοχιχές μετρήσεις A_{μ} , με $\mu = 1, ..., \mathcal{N}$ μιας θερμοδυναμιχής ποσότητας A. Η αναμενόμενη τιμή του τετραγώνου του στατιστιχού της σφάλματος δίνεται από την σχέση:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \left\langle \frac{1}{\mathcal{N}} \left[\sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} (A_\mu - \langle A \rangle) \right]^2 \right\rangle \tag{80}$$

αναπτύσσοντας το τετράγωνο και χρησιμοποιώντας την αναλλοιότητα σε χρονικές μεταθέσεις της αλυσίδας Markov $\langle A_{\mu}A_{\nu}\rangle = \langle A_0A_{\nu-\mu}\rangle$, προκύπτει ότι:

$$\langle (\delta A)^2 \rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) [1 + 2\tau_A]$$
(81)

όπου τ_A ονομάζεται χρόνος αυτοσυσχέτισης και υπολογίζεται μέσω της σχέσης:

$$\tau_A = \sum_{\mu=1}^{\mathcal{N}} (1 - \frac{\mu}{\mathcal{N}}) \frac{\langle A_0 A_\mu \rangle - \langle A \rangle^2}{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$
(82)

Αν ο χρόνος αυτοσυσχέτισης είναι μικρός, τα στατιστικά σφάλματα μπορούν να υπολογιστούν αγνοώντας τον όρο που προκύπτει από την αυτοσυσχέτιση. Ωστόσο, όταν ένα σύστημα βρίσκεται κοντά στο κρίσιμο σημείο του ο Metropolis - όπως επίσης και οποιοσδήποτε άλλος τοπικός αλγόριθμος - αναπτύσσει μεγάλους χρόνους αυτοσυσχέτισης μεταξύ των διαδοχικών καταστάσεων που παράγονται στην αλυσίδα Markov. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται κρίσιμη καθυστέρηση (critical slowing down). Για να γίνει κατανοητό το παραπάνω πρόβλημα πρέπει να ανατρέξουμε στο γεγονός ότι το σύστημα πάνω στο κρίσιμο σημείο παρουσιάζει συμμετρία βάθμισης και οι διατάξεις των spin εμφανίζουν περιοχές όμοιου προσανατολισμού (clusters) σε όλες τις κλίμακες. Ως αποτέλεσμα, η πιθανότητα ένα spin να βρίσκεται στο σύνορο ενός cluster - και όχι στο εσωτερικό του - είναι ανάλογη του λόγου επιφάνειας-συνόρου του μεγαλύτερου cluster. Επιπλέον, λόγω της (72), τα spin αυτά έχουν μικρή πιθανότητα να αλλάξουν προσανατολισμό, με αποτέλεσμα οι διαδοχικές καταστάσεις που κατασκευάζει ο αλγόριθμος να παρουσιάζουν ισχυρή συσχέτιση.

Ο χρόνος αυτοσυσχέτισης στο
 κρίσιμο σημείο ενός συστήματος εξαρτάται από το μήχος το
υLμέσω νόμου δύναμης:

$$\tau_A \sim L^z \tag{83}$$

Ο εκθέτης z ονομάζεται δυναμικός κρίσιμος εκθέτης και εξαρτάται αφ΄ ενός από τη θερμοδυναμική ποσότητα προς μελέτη, αφ΄ ετέρου από τον ίδιο τον αλγόριθμο που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση, συνεπώς δεν συνδέεται με την τάξη παγκοσμιότητας του συστήματος. Στην περίπτωση του Metropolis η τιμή του έχει υπολογιστεί με την χρήση αναπτύγματος υψηλής θερμοκρασίας [18] ως z = 2.125(10).

Λαμβάνοντας υπόψιν το παραπάνω φαινόμενο υπολογίσαμε τους χρόνους αυτοσυσχέτησης χρησιμοποιώντας την σχέση (82) για τα πλέγματα μήχους: L = 32, 48, 64, 80, 96, 112 τα οποία και θα χρησιμοποιήσουμε. Για κάθε πλέγμα επαναλάβαμε την ίδια διαδικασία για πλήθος θερμοκρασιών κοντά στην ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία κάθε πλέγματος και επιλέξαμε ως χρόνο αυτοσυσχέτισης την μέγιστη τιμή που λάβαμε. Για τον υπολογισμό, κατασκευάσαμε 10^6 διαδοχικές καταστάσεις και υπολογίσαμε την μέση μαγνήτιση $M = \sum s_i$. Συνεπώς προέκυψε ο παρακάτω πίνακας:



Πίνακας 1: Υπολογισμός δυναμικού εκθέτη z

Κατόπιν, κατασκευάσαμε το αντίστοιχο διάγραμμα και χρησιμοποιώντας μέθοδο ελαχίστων τετραγώνων υπολογίσαμε τον κρίσιμο δυναμικό εκθέτη του Metropolis, για την περίπτωση του δισδιάστατου Ising.

$$z = 2.09(19)$$

Η παραπάνω τιμή βρίσκεται πολύ κοντά σε αυτή της βιβλιογραφίας που παραθέσαμε. Με αυτόν τον υπολογισμό, επιπλέον, επιβεβαιώσαμε ότι η τροποποίηση του Metropolis που χρησιμοποιούμε σε αυτή την εργασία δεν επηρεάζει τον πυρήνα του αλγορίθμου.

Γνωρίζοντας τον χρόνο αυτοσυσχέτισης για κάθε πλέγμα, μπορούμε να δημιουργούμε ασυσχέτιστες καταστάσεις απλώς περιμένοντας πλήθος επαναλήψεων $\Delta t > \tau_A$ μεταξύ των διαδοχικών καταστάσεων που συλλέγουμε.

3.2 Παραγωγή δεδομένων και ανάλυση κρίσιμης συμπεριφοράς

Στην ενότητα αυτή θα παραθέσουμε τα αποτελέσματα από την μελέτη της κρίσιμης συμπεριφοράς του Ising, χρησιμοποιώντας την τροποποίηση του Metropolis που αναφέραμε στην ενότητα 2.3.2. Για του υπολογισμούς αυτούς, αρχικά εκτελέσαμε δοκιμαστικά το πρόγραμμα σε μεγάλα εύρη θερμοκρασιών και εντοπίσαμε την κρίσιμη περιοχή σε κάθε πλέγμα.

Προχειμένου να υπολογίσουμε με αχρίβεια τους εχθέτες και την χρίσιμη θερμοχρασία ενώ ταυτόχρονα να διατηρήσουμε το υπολογιστικό κόστος σε λογικά πλαίσια, επαναλάβαμε την εκτέλεση μόνο στο εύρος θερμοχρασιών $[T_{min}, T_{max}]$ που αναφέρονται στον παρακάτω πίνακα, με βήμα $\Delta T = 0.001$. Οι περιοχές αυτές βρίσκονται πέριξ των κορυφών που εντοπίσαμε. Αναλυτικά τα δεδομένα από τις εκτελέσεις φαίνονται στον παρακάτω πίνακα.

| L | T_{min} | T_{max} | Επαναλήψεις | Δt | t_{therm} |
|-----|-----------|-----------|-------------|------------|-------------|
| 16 | 1.800 | 4.000 | 2^{17} | 2^4 | 2^{6} |
| 32 | 2.000 | 3.400 | 2^{17} | 2^{6} | 2^{7} |
| 48 | 2.250 | 2.340 | 2^{17} | 2^{8} | 2^{8} |
| 64 | 2.260 | 2.330 | 2^{18} | 2^{8} | 2^{9} |
| 80 | 2.270 | 2.310 | 2^{18} | 2^{9} | 2^{10} |
| 96 | 2.270 | 2.310 | 2^{18} | 2^{10} | 2^{11} |
| 112 | 2.270 | 2.300 | 2^{18} | 2^{10} | 2^{12} |

Πίνακας 2: Χαρακτηριστικά εκτέλεσης προσομοίωσης

Η τελευταία στήλη αναφέρεται στον χρόνο θερμοποίησης του συστήματος t_{therm}, δηλαδή τις απαιτούμενες επαναλήψεις ώστε οι καταστάσεις της αλυσίδας Markov να αποσυσχετιστούν πλήρως από την αρχική κατάσταση στην οποία ο προσανατολισμός των spin διαλέγεται τυχαία (hot start).

3.2.1 Η κρίσιμη θερμοκρασία του άπειρου συστήματος και ο εκθέτης ν

Για τον υπολογισμό της κρίσιμης θερμοκρασίας χρησιμοποιήσαμε την σχέση (48), την οποία αποδείξαμε στο κεφάλαιο 1.2.5 μέσω μεθόδων ομάδας ανακανονικοποίησης. Στο παρακάτω πίνακα φαίνονται οι τιμές της ψευδοκρίσιμης θερμοκρασίας στις οποίες εντοπίστηκε το μέγιστο στην μαγνητική επιδεκτικότητα.



Πίνακας 3: Υπολογισμός της κρίσιμης θερμοκρασίας T_c και κρίσιμου εκθέτη ν

Προσαρμόζοντάς την συνάρτηση $f(x) = A + Bx^D$ υπολογίσαμε τον κρίσιμο εκθέτη και την κρίσιμη θερμοκρασία του άπειρου συστήματος. Συγκεκριμένα βρήκαμε:



3.2.2 Οι κρίσιμοι εκθέτες γ, α και β

Για το υπολογισμό των κρίσιμων εκθετών θα βασιστούμε στην σχέση (50). Η έκφραση αυτή εξειδικεύεται για τις παρατηρήσιμες ποσότητες που μας ενδιαφέρουν - μαγνητική επιδεκτικότητα και ειδική θερμοχωρητικότητα - ως εξής:

$$\chi_L \sim L^{\gamma/\nu} (1 + BL^{-w_\chi} + \dots) \tag{84}$$

Στο παραχάτω διάγραμμα φαίνονται οι τιμές της μέγιστης μαγνητιχής επιδεχτιχότητας για τα διάφορα πλέγματα.



Πίνακας 4: Υπολογισμός εκθέτη γ/ν

Κρατώντας μόνο όρους ανώτερης τάξης ως προς L στη σχέση (84), προσαρμόζουμε τη συνάρτηση συνάρτηση $f(x) = Ax^B$ βρίσκουμε ότι: $\gamma/\nu = 1.75(4)$. Χρησιμοποιώντας την τιμή του εκθέτη ν που βρήκαμε στην προηγούμενη ενότητα και κάνοντας διάδοση σφαλμάτων υπολογίζουμε ότι:

$$\gamma = 1.78(4)$$

Τέλος, στον παρακάτω πίνακα συγκρίνονται οι τιμές που υπολογίσαμε από τις προσομοιώσεις Monte Carlo με τις θεωρητικές τιμές της αναλυτικής λύσης του Onsager. Οι τιμές και τα σφάλματα των εκθέτων α και β προέκυψαν επιλύοντας τις σχέσεις (41) και με διάδοση σφαλμάτων αντίστοιχα.

| | T_{crit} | u | γ | α | eta |
|-------------|------------|----------|----------|----------|---------|
| Onsager | 2.2691 | 1 | 1.75 | 0 | 0.125 |
| Monte Carlo | 2.268(3) | 1.05(17) | 1.78(4) | 0.1(3) | 0.06(6) |

Πίναχας 5: Σύγχριση υπολογισμών με θεωρητικές τιμές

4 Μηχανές Boltzmann

Τις τελευταίες δεκαετίες, η μηχανική μάθηση έχει αναδειχθεί ως ένα από τα ισχυρότερα εργαλεία για την μελέτη και την επεξεργασία δεδομένων σε διάφορους επιστημονικούς τομείς. Η τεράστια διαθεσιμότητα σε δεδομένα καθώς και η βελτίωση της υπολογιστικής ισχύος, επέτρεψαν στις "μηχανές" να υπερβούν ακόμα και τον άνθρωπο στην επίλυση σύνθετων προβλημάτων όπως η αναγνώριση φωνής και οπτικών μοτίβων, η επίλυση ηλεκτρονικών παιχνιδιών κ.ο.κ. Παρά όμως την γενική τους επιτυχία σε πρακτικό επίπεδο, ελάχιστα πράγματα είναι γνωστά ως προς το γιατί και πότε αυτές οι τεχνικές είναι επιτυχημένες.

Το θεωρητικό κενό εντοπίζεται κυρίως στο βασικό εργαλείο την μηχανικής μάθησης: τα νευρωνικά δίκτυα. Τα νευρωνικά δίκτυα είναι συστήματα πολλών βαθμών ελευθερίας, οι οποίοι επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω καναλιών στα οποία ρέει πληροφορία. Χαρακτηρίζονται νευρωνικά καθώς, όπως και ένα βιολογικός εγκέφαλος, έχουν την ικανότητα να εκπαιδεύονται, δηλαδή να προσαρμόζουν τη διάδοση της πληροφορίας στο εσωτερικό τους, προκειμένου να επιλύουν προβλήματα. Ανάλογα τη διαδικασία εκπαίδευσης που ακολουθείται διακρίνονται δύο βασικές κατηγορίες: τα εποπτευόμενα δίκτυα, και τα μη εποπτευόμενα. Στα πρώτα, ο εκπαιδευτής παρέχει επιπλέον πληροφορία στη μηχανή κατηγοριοποιώντας τα δεδομένα μάθησης, ενώ στα δεύτερα η πληροφορία παρέχεται σε καθαρή μορφή. Στην παρούσα εργασία, θα ασχοληθούμε με την δεύτερη περίπτωση και θα μελετήσουμε μια από τις απλούστερες κατηγορίες νευρωνικών δικτύων: τις Περιορισμένες Μηχανές Boltzmann (PBM).

Τα RBMs είναι στοχαστικά νευρωνικά δίκτυα τα οποία μπορούν να εκπαιδευτούν προκειμένου να αναπαράγουν σύνθετες κατανομές πιθανότητας. Περιγράφηκαν για πρώτη φορά στα μέσα της δεκαετίας του '80 από τον P. Smolensky [20], ωστόσο η διαδεδομένη χρήση τους ξεκίνησε από τα μέσα του '00, όταν ο G. Hinton ανακάλυψε ταχύτατους αλγόριθμους για την εκπαίδευσή τους [10]. Στο παρελθόν, έχουν χρησιμοποιηθεί αφ΄ ενός ως δομικά στοιχεία βαθέων νευρωνικών δικτύων (Deep Neural Networks), αφ΄ ετέρου αυτόνομα σε προβλήματα απαλοιφής θορύβου, διαστατικής ελάττωσης [11], κατηγοριοποίησης [14] κ.α. Τα τελευταία χρόνια ωστόσο έχουν εφαρμοστεί ακόμα και σε φυσικά συστήματα για την ανίχνευση εξωτικών σωματιδίων [3], τη μελέτη αλλαγής φάσης υγρού-αερίου [19] καθώς και την ανίχνευση συσχετίσεων σε ισχυρά αλληλεπιδρώντα συστήματα πολλών σωματιδίων [6].

Οι νευρώνες των συγκεκριμένων δικτύων είναι δυϊκοί βαθμοί ελευθερίας και επικοινωνούν μεταξύ τους μέσω αλληλεπιδράσεων ενεργειακού τύπου. Η δομή αυτή τα κατέστησε ιδιαίτερα αποτελεσματικά για την μελέτη θερμοδυναμικών συστημάτων όπως το μοντέλου Ising οπού με επιτυχία κατάφεραν να αναγνωρίσουν και να αναπαράγουν τις διαφορετικές φάσεις του συστήματος [21]. Στο πλαίσιο μάλιστα αυτής της παρατήρησης έχει προταθεί [8] [9] [12] [1] η ύπαρξη μια θεμελιώδους σύνδεσης μεταξύ της συμπεριφοράς των νευρωνικών δικτύων και των μεθόδων ανακανονικοποίησης που αναλύσαμε στο κεφάλαιο 1.2. Η σύνδεση αυτή έγκειται στο ότι τα νευρωνικά δίκτυα, όπως παρομοίως συμβαίνει κατά την ροή ανακανονικοποίησης, αναγνωρίζουν τους συναφείς βαθμούς ελευθερίας ενώ ταυτόχρονα ολοκληρώνουν τους μη συναφείς, παρέχοντας μια πιο αδρή περιγραφή του συστήματος.

Στις ενότητες που θα ακολουθήσουν, επιχειρούμε να μελετήσουμε ακριβώς αυτή τη σύνδεση. Αρχικά εκπαιδεύσαμε RBMs σε καταστάσεις δισδιάστατου μοντέλου Ising που έχουν προκύψει από προσομοιώσεις Monte Carlo στην κρίσιμη περιοχή και κατόπιν εξετάζουμε τα χαρακτηριστικά της κατανομής που ανακατασκευάζει το νευρωνικό δίκτυο. Βασικό εργαλείο για αυτό τον σκοπό θα αποτελέσει η Ροή RBM [7], δηλαδή οι διαδοχικές ανακατασκευές των καταστάσεων, την οποία και θα αναλύσουμε στην ενότητα 4.3, μελετώντας διάφορες μη τετριμμένες θερμοδυναμικές ποσότητες, όπως η κατανομή της μαγνήτισης και οι εκθέτες των συναρτήσεων συσχέτισης.

4.1 Η δομή των Περιορισμένων Μηχανών Boltzmann

Τα RBMs αποτελούνται από νευρώνες οι οποίοι οργανώνονται σε δύο ξεχωριστά επίπεδα: το ορατό $v = \{v_1, \ldots v_m\}$ και το κρυφό $h = \{h_1, \ldots h_n\}$. Το ορατό επίπεδο είναι υπεύθυνο για την ανάγνωση του σήματος εισόδου, ενώ στο κρυφό αποθηκεύονται οι λανθάνουσες συσχετίσεις. Ο χαρακτηρισμός "περιορισμένες" βασίζεται στο ότι δεν υπάρχει επικοινωνία μεταξύ νευρώνων του ιδίου επίπεδου και κατ΄ επέκταση η μεταφορά της πληροφορίας τελείται από το ένα επίπεδο στο άλλο αλλά όχι οριζόντια. Ως εκ τούτου μπορούν να περιγραφούν με την χρήση του παρακάτω διμερή γράφου:



Σχήμα 5: Η δομή των RBM

Το πλήθος των νευρώνων του ορατού είναι ίσο με τα pixel των εικόνων που διαβάζουν, δηλαδή τα spin: $m = L^2$, ενώ του κρυφού n προσαρμόζεται από τον προγραμματιστή.

Η ροή της πληροφορίας πραγματοποιείται έμμεσα μέσω ενεργειαχού τύπου αλληλεπιδράσεων μεταξύ των νευρώνων διαφορετιχών επιπέδων. Συγχεχριμένα, για οποιαδήποτε διάταξη των (v, h) ορίζεται η συνάρτηση ενέργειας:

$$E(v,h) = -\sum_{i=1}^{N_v} \sum_{a=1}^{N_h} v_i w_{ia} h_a - \sum_{i=1}^{N_v} v_i b_i - \sum_{i=a}^{N_h} h_a c_a$$
(85)

Τα w_{ia} ονομάζονται βάρη (weights) και περιγράφουν τις συνάψεις' κάθε ορατού νευρώνα με κάθε κρυφό, ενώ τα b_i και c_a ονομάζονται προτιμήσεις (bias) και μπορούν να ιδωθούν ως συζεύξεις με ένα εξωτερικό τοπικό δυναμικό. Μέσω της σχέσης (85) ορίζεται η πιθανότητα υλοποίησης οποιασδήποτε μικροκατάστασης των (v, h), η οποία ακολουθεί την κατανομή Boltzmann - Gibbs:

$$p(v,h) = \frac{e^{-E(v,h)}}{\mathcal{Z}_{RBM}}$$
(86)

όπου, κατ΄ αναλογία με την στατιστική μηχανική, ορίζεται η συνάρτηση επιμερισμού:

$$\mathcal{Z}_{RBM} = \sum_{\{v,h\}} e^{-E(v,h)} \tag{87}$$

Επιπλέον μπορούμε να ορίσουμε τις οριαχές (marginal) πιθανότητες για τους ορατούς και τους κρυφούς νευρώνες ως εξής:

$$p(v) = \sum_{h} p(v, h) \tag{88}$$

$$p(h) = \sum_{v} p(v, h) \tag{89}$$

Όπως και στα γενικότερα συστήματα στατιστικής μηχανικής, έτσι και στην περίπτωση των RBM, το βασικό εμπόδιο για την αναλυτική περιγραφή τους έγκειται στην δυσκολία υπολογισμού της συνάρτησης επιμερισμού. Για αντίστοιχους λόγους με αυτούς που αναφέρθηκαν στην ενότητα 2.1, η μελέτη τους μπορεί να γίνει κυρίως υπολογιστικά με τη χρήση μεθόδων δειγματοληψίας σημαντικότητας. Στα συγκεκριμένα συστήματα, οι μέθοδοι αυτοί γίνονται αρκετά απλοί λόγω της ιδιαίτερης γεωμετρίας τους: οι νευρώνες του ίδιου επιπέδου δεν επικοινωνούν, άρα δεδομένης μιας κατάστασης του ορατού επιπέδου, οι κρυφοί νευρώνες είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους και αντίστροφα. Κατά συνέπεια, οι δεσμευμένες πιθανότητες παραγοντοποιούνται ως εξής:

$$p(v|h) = \prod_{i=1}^{m} p(v_i|h) \quad \text{xat} \quad p(h|v) = \prod_{a=1}^{n} p(h_a|v) \tag{90}$$

Για τις δεσμευμένες πιθανότητες, χρησιμοποιώντας το γεγονός ότι $p(v_i|h) = p(v_i,h)/p(h)$ και $p(h_a|v) = p(h_a,v)/p(v)$, αποδεικνύεται εύκολα ότι:

$$p(v_i = 1|h) = \sigma(\sum_{\alpha=1}^{N_h} w_{i\alpha}h_\alpha + b_i)$$
(91)

$$p(h_a = 1|v) = \sigma(\sum_{\alpha=1}^{N_h} v_i w_{i\alpha} + c_a)$$
(92)

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σιγμοειδή συνάρτηση:

$$\sigma(x) = \frac{e^x}{1 + e^x} \tag{93}$$

Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω, η κατασκευή καταστάσεων του RBM, μπορεί να πραγματοποιηθεί σε δύο ανεξάρτητα βήματα: οι καταστάσεις του ορατού επιπέδου παράγονται μέσω της p(v|h), ενώ οι καταστάσεις του κρυφού μέσω της p(h|v). Η διαδικασία αυτή ονομάζεται δειγματοληψία block Gibbs και θα χρησιμοποιηθεί εκτενώς τόσο στην διαδικασία της εκπαίδευσης όσο και στα πλαίσια της εφαρμογής τους στην ροή RBM.

4.2 Μη εποπτευόμενη μάθηση

Μια από τις βασικότερες χρήσεις των νευρωνικών δικτύων εντοπίζεται στο πεδίο της μη εποπτευόμενης μάθησης. Κατά τη μη εποπτευόμενη μάθηση, τα νευρωνικά δίκτυα μαθαίνουν τα σημαντικά χαρακτηριστικά μιας άγνωστης κατανομής q(v), βασισμένα αποκλειστικά σε μία συλλογή καταστάσεων της $S = \{v^{(1)}, v^{(2)}, \ldots\}$, τα στοιχεία της οποίας είναι μεταξύ τους ανεξάρτητα. Τα RBM έχουν αναδειχθεί ως ισχυρότατα εργαλεία σε αυτή την κατεύθυνση

καθώς, όπως έχει αποδειχθεί, οποιαδήποτε κατανομή πάνω στο σύνολο $\{-1,1\}^m$ μπορεί να αναπαραχθεί οσοδήποτε καλά χρησιμοποιώντας m ορατούς και n = k+1 κρυφούς νευρώνες, όπου k είναι το πλήθος των στοιχείων του συνόλου που έχουν μη μηδενική πιθανότητα υλοποίησης.

Τα RBM αναπαράγουν την άγνωστη κατανομή μέσω της οριακής (marginal) πιθανότητας των ορατών νευρώνων:

$$p_{\theta}(v) = \sum_{\{h\}} p(v,h) = \sum_{\{h\}} \frac{e^{-E(v,h)}}{\mathcal{Z}_{RBM}}$$
(94)

Αν θεωρήσουμε δεδομένη την δομή του δικτύου, η παραπάνω ποσότητα, εξαρτάται αποκλειστικά από τις παραμέτρους $\boldsymbol{\theta} = (w, b, c)$ που ορίζουν την οικογένεια συναρτήσεων ενέργειας (85). Σκοπός της εκπαίδευσης είναι να προσαρμοστούν οι παραπάνω παράμετροι προκειμένου η κατανομή των ορατών νευρώνων p(v) να μπορεί να αναπαράγει με τον βέλτιστο τρόπο την q(v). Ένας τρόπος για να γίνει αυτό βασίζεται στη μεγιστοποίηση της συνάρτησης πιθανοφάνειας

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|S) = \prod_{v \in S} p_{\boldsymbol{\theta}}(v) \tag{95}$$

ή ισοδύναμα του λογαρίθμου της

$$\ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|S) = \sum_{v \in S} \ln p_{\boldsymbol{\theta}}(v) \tag{96}$$

Στην πράξη ωστόσο επιλέγονται αλγόριθμοι που ακολουθούν μια ισοδύναμη διαδικασία: την ελαχιστοποίηση της απόστασης των δύο κατανομών q(v) και $p_{\theta}(v)$.

Η εγγύτητα δύο κατανομών μπορεί να οριστεί χρησιμοποιώντας την απόκλιση Kullback-Leibler (KL), η οποία δίνεται μέσω της σχετικής εντροπίας $H(q,p) = -\sum_{\{v\}} q(v) \ln p(v)$ σύμφωνα με τη σχέση:

$$KL(q||p_{\theta}) = H(q, p_{\theta}) - H(q, q) = -\sum_{\{v\}} q(v) \ln \frac{p_{\theta}(v)}{q(v)}$$
(97)

Η ποσότητα αυτή περιγράφει την απώλεια πληροφορίας κατά την προσέγγιση μίας κατανομής από μία δεύτερη και λειτουργεί ως (μη συμμετρικό) μέτρο, αφού είναι πάντα θετική και μηδενίζεται όταν q(v) = p(v). Από τη στιγμή που η εξάρτησή της από τις παραμέτρους θ έρχεται αποκλειστικά από τον όρο H(q,p), η ελαχιστοποίηση της απόστασης ισοδυναμεί με την ελαχιστοποίηση αυτού του όρου. Αν μάλιστα τον εκτιμήσουμε χρησιμοποιώντας τα στοιχεία της συλλογής S ισχύει:

$$\mathbb{E}\left[H(q, p_{\theta})\right] = -\sum_{v \in S} \ln p_{\theta}(v) = -\ln \mathcal{L}(\boldsymbol{\theta}|S)$$
(98)

Αν η συλλογή επομένως έχει αρκετά μεγάλο πλήθος στοιχείων, τότε η ελαχιστοποίηση της απόκλισης KL ισοδυναμεί με την μεγιστοποίηση της συνάρτησης πιθανοφάνειας.

Στόχος επομένως της διαδικασίας μάθησης είναι η εύρεση των τιμών των παραμέτρων που ελαχιστοποιούν την απόκλιση KL. Σε όλες τις περιπτώσεις εφαρμογής των RBM, κάτι τέτοιο είναι εν γένει αδύνατο να πραγματοποιηθεί αναλυτικά, συνεπώς απαιτούνται αριθμητικές προσεγγίσεις. Στην ενότητα που ακολουθεί θα αναφερθούμε στην κατασκευή αλγορίθμων που επιλύουν το παραπάνω πρόβλημα, και θα εστιάσουμε σε έναν από τους ταχύτερους: τη μέθοδο της αντιφατικής απόκλισης (Constrastive Divergence).

4.2.1 Η μέθοδος της απότομης κατάβασης

Οι περισσότεροι αλγόριθμοι που εφαρμόζονται στη μη εποπτευόμενη μάθηση νευρωνικών διχτύων έχουν στον πυρήνα τους την μέθοδο της απότομης κατάβασης (steepest descent). Κατά την παραπάνω διαδικασία ξεκινάμε με κάποιες τυχαίες παραμέτρους $\theta^{(0)}$ και εκτελούμε μικρά βήματα στον χώρο των παραμέτρων, κάθε φορά στην διεύθυνση που είναι πιο απότομη η ελάττωση της $KL_{(q}||p_{\theta})$. Ο κανόνας αναβάθμισης των παραμέτρων έχει επομένως την μορφή:

$$\boldsymbol{\theta}^{(t+1)} = \boldsymbol{\theta}^{(t)} - \epsilon \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}} KL(q||p_{\boldsymbol{\theta}})$$
(99)

Η παράμετρος ϵ ονομάζεται συχνότητα μάθησης (learning rate). ανήχει στο σύνολο \mathbb{R}^+ και συνήθως παίρνει τιμές της τάξης 10^{-1} με 10^{-4} .

Για να εφαρμοστεί η παραπάνω σχέση πρέπει να υπολογιστούν οι παράγωγοι της απόκλισης KL. Χρησιμοποιώντας τις σχέσεις της προηγούμενης παραγράφου έχουμε ότι:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} KL(q||p_{\theta}) = -\frac{\partial}{\partial \theta} \ln \mathcal{L}(\theta|S)
= -\frac{\partial}{\partial \theta} \sum_{v \in S} \left(\ln \sum_{h} e^{E(v,h)} - \ln \mathcal{Z} \right)
= \sum_{v \in S} \left(\sum_{h} p(h|v) \frac{\partial E(v,h)}{\partial \theta} - \sum_{v,h} p(v,h) \frac{\partial E(v,h)}{\partial \theta} \right)$$
(100)

όπου στη μετάβαση από την δεύτερη στη τρίτη γραμμή χρησιμοποιήσαμε την σχέση (94). Δεδομένου τώρα ότι τα στοιχεία της συλλογής S έρχονται από την κατανομή q(v) μπορούμε να γράψουμε:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} KL(q||p_{\theta}) \propto \mathbb{E}_{p(h|v)q(v)} \left[\frac{\partial E(v,h)}{\partial \theta} \right] - \mathbb{E}_{p(v,h)} \left[\frac{\partial E(v,h)}{\partial \theta} \right]$$
(101)

Οι δύο μέσες τιμές που εμφανίζονται στην παραπάνω σχέση διαφέρουν ως προς την κατανομή των (v, h). Η πρώτη ονομάζεται κατανομή των δεδομένων (data distribution), ενώ η δεύτερη κατανομή του μοντέλου (model distribution). Σε κάθε επανάληψη του αλγορίθμου μάθησης οι παράμετροι w_{ia} , b_i και c_a αναβαθμίζονται έτσι ώστε η διαφορά των δύο μέσων τιμών να ελαττώνεται. Χρησιμοποιώντας τώρα τη σχέση (101) και εφαρμόζοντάς την στη (99) ισχύει συγκεκριμένα:

$$w_{ia} \to w_{ia} - \epsilon \langle v_i h_a \rangle_{data} + \langle v_i h_a \rangle_{model}$$

$$b_i \to b_i - \epsilon \langle v_i \rangle_{data} + \langle v_i \rangle_{model}$$

$$c_a \to c_a - \epsilon \langle h_a \rangle_{data} + \langle h_a \rangle_{model}$$
(102)

Μετά από κάθε πλήρη ανάγνωση των δεδομένων της S και κατόπιν αναβάθμιση των παραμέτρων λέμε ότι έχει περάσει μια *εποχή* μάθησης.

Η βασική δυσκολία στην υλοποίηση του παραπάνω αλγορίθμου εντοπίζεται στο υπολογισμό των μέσων τιμών ως προς την κατανομή του μοντέλου. Συγκεκριμένα, σε κάθε βήμα του αλγορίθμου, απαιτείται η εφαρμογή της δειγματοληψίας σημαντικότητας προκειμένου να προκύψουν καταστάσεις του μοντέλου με πιθανότητα p(v, h). Για να γίνει αυτό κατασκευάζουμε μια μαρκοβιανή αλυσίδα, η οποία έχει ως αφετηρία τις καταστάσεις της συλλογής S και (όπως αναφέραμε και στην προηγούμενη ενότητα) χρησιμοποιεί ως πίνακες μετάβασης τις δεσμευμένες πιθανότητες p(v|h) και p(h|v). Ακολουθώντας τη λογική του κεφαλαίου 2.2.1 η αλυσίδα έχει την μορφή:

$$\{v^{(0)}\} \xrightarrow{p(h|v)} \{h^{(0)}\} \xrightarrow{p(v|h)} \{v^{(1)}\} \xrightarrow{p(h|v)} \dots \{v^{(n)}\} \xrightarrow{p(h|v)} \{h^{(n)}\}$$
(103)

και αν $n \gg 1$ οι καταστάσεις $\{v^{(n)}, h^{(n)}\}$ έρχονται από την κατανομή του μοντέλου p(v, h).

Η παραπάνω διαδικασία ωστόσο είναι ιδιαίτερα ακριβή υπολογιστικά, καθώς απαιτούνται αφ΄ ενός πολλαπλά βήματα Monte Carlo προκειμένου η αντίστοιχη μαρκοβιανή αλυσίδα να φτάνει κάθε φορά στην ισορροπία, αφ΄ ετέρου πολλές επαναλήψεις προκειμένου να εκπαιδευτεί το RBM. Για να προχωρήσουμε περαιτέρω απαιτείται να γίνουν προσεγγίσεις οι οποίες, τουλάχιστον στο επίπεδο της μάθησης, δεν θα επηρεάζουν σημαντικά τα αποτελέσματα. Μια τέτοια προσέγγιση είναι η μέθοδος της αντιφατικής απόκλισης (contrastive divergence), την οποία και θα αναπτύξουμε στη συνέχεια.

4.2.2 Η μέθοδος της αντιφατικής απόκλισης

Η μέθοδος της αντιφατικής απόκλισης αναπτύχθηκε στις αρχές του '00 από τον Hinton [10], στα πλαίσια της προσπάθειας να επιταχυνθούν οι αλγόριθμοι μάθησης των RBM. Η κεντρική ιδέα της συγκεκριμένης μεθόδου βασίζεται στο ότι η δεύτερη μέση τιμή της σχέσης (101) μπορεί να προσεγγιστεί ικανοποιητικά αν χρησιμοποιήσουμε τις καταστάσεις $\{v^{(k)}, h^{(k)}\}$ οι οποίες έχουν προκύψει μετά από μικρό αριθμό k βημάτων Monte Carlo και έρχονται από την κατανομή:

$$p^{(k)}(v,h) = p(h|v) \sum_{v_{k-1},h_{k-1}} \cdots \sum_{v_0,h_0} p(v|h_k) p(h_k|v_k) \dots p(v_1|h_0) p(h_0|v_0) q(v_0)$$
(104)

Επομένως μπορούμε να τερματίσουμε την αλυσίδα Markov πριν επέλθει ισορροπία χωρίς να επηρεάζουμε αισθητά τη διαδικασία μάθησης. Με αυτόν τον τρόπο μπορούμε εύκολα να προσεγγίσουμε τις παραγώγους της απόκλισης KL χρησιμοποιώντας την έκφραση:

$$\frac{\partial}{\partial \theta} KL(q||p_{\theta}) \simeq CD_{k}(\theta|S) = \mathbb{E}_{p(h|v)q(v)} \left[\frac{\partial E(v,h)}{\partial \theta}\right] - \mathbb{E}_{p^{(k)}(v,h)} \left[\frac{\partial E(v,h)}{\partial \theta}\right]$$
(105)

Όταν $k \to \infty$ προφανώς η κατανομή $p^{(k)}$ τείνει στην κατανομή του μοντέλου και η τελευταία σχέση γίνεται ίδια με την (101).

Στην παρούσα εργασία η μέθοδος της αντιφατικής απόκλισης θα εφαρμοστεί για την απλούστερη περίπτωση όπου k = 1, η οποία όπως έχει αποδειχθεί εμπειρικά είναι επαρκής στις περισσότερες περιπτώσεις εφαρμογής των RBM. Ξεκινώντας επομένως από κάθε μια εκ των καταστάσεων $\{v^{(0)}\}$ της συλλογής S χρησιμοποιώντας τις p(h|v) και p(v|h) κατασκευάζουμε τις συλλογές $\{h^{(0)}\}$, $\{v^{(1)}\}$ και $\{h^{(1)}\}$. Οι μέσες τιμές της σχέσης (102) δίνονται από τις παρακάτω εκφράσεις:

$$\langle v_i h_a \rangle_{\text{data}} = \frac{1}{N_S} \sum_S v_i^{(0)} h_a^{(0)} \qquad \langle v_i h_a \rangle_{\text{model}} = \frac{1}{N_S} \sum_S v_i^{(1)} h_a^{(1)}$$

$$\langle v_i \rangle_{\text{data}} = \frac{1}{N_S} \sum_S v_i^{(0)} \qquad \langle v_i \rangle_{\text{model}} = \frac{1}{N_S} \sum_S v_i^{(1)} \qquad (106)$$

$$\langle h_a \rangle_{\text{data}} = \frac{1}{N_S} \sum_S h_a^{(0)} \qquad \langle h_a \rangle_{\text{model}} = \frac{1}{N_S} \sum_S h_a^{(1)}$$

4.3 Η Ροή RBM

Κατά το πέρας της διαδικασίας μάθησης, η κατανομή πιθανότητας q(v) πάνω στην οποία εκπαιδεύτηκε το νευρωνικό δίκτυο, διαφέρει ελαφρώς από την κατανομή $p_{\theta}(v)$ την οποία αναπαράγει. Αυτό συμβαίνει για δύο λόγους: αφ΄ ενός η απόκλιση KL δεν γίνεται πρακτικά ποτέ μηδενική λόγω του πεπερασμένου πλήθους εποχών, αφ΄ ετέρου το σύνολο S έχει προκύψει μέσω δειγματοληψίας από την q(v), συνεπώς περιέχει μόνο ένα μέρος της συνολικής πληροφορίας. Ωστόσο, αν το πλήθος των εποχών είναι μεγάλο και το σύνολο S περιέχει αρκούντως πολλές καταστάσεις, η απόσταση των δύο κατανομών μπορεί να θεωρηθεί μικρή.

Η διαπίστωση αυτή μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε ένα εκπαιδευμένο δίκτυο RBM για να δημιουργήσουμε μία απεικόνιση στον χώρο των κατανομών πιθανοτήτων. Η απεικόνιση αυτή θα δέχεται ως είσοδο δεδομένα από μία κατανομή $p_i(v)$. Χρησιμοποιώντας τις πιθανότητες μετάβασης p(h|v) και p(v|h) το RBM θα ανακατασκευάζει την συλλογή και κατ' επέκταση η έξοδος θα προκύπτει από μια κατανομή $p_{i+1}(v)$. Σχηματικά μπορούμε να γράψουμε:

$$p_i(v) \xrightarrow{RBM} p_{i+1}(v)$$
 (107)

Εφόσον το RBM έχει εκπαιδευτεί ελαχιστοποιώντας την απόκλιση KL, η παραπάνω απεικόνιση, τουλάχιστον σε κάποια περιοχή του χώρου των κατανομών, οφείλει να έχει συνεχή χαρακτηριστικά. Συνεπώς ορίζεται η ροή RBM [7] η λογική της οποίας φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα:



Σχήμα 6: Η ροή RBM

Στις ενότητες που θα ακολουθήσουν βασικός μας στόχος είναι η μελέτη της παραπάνω ροής. Συγκεκριμένα, επιχειρούμε να απαντήσουμε στο ερώτημα αν η παραπάνω απεικόνιση έχει κάποιο στάσιμο σημείο:

$$p_{\infty}(v) \xrightarrow{RBM} p_{\infty}(v)$$
 (108)

καθώς επίσης το κατά πόσο αυτό το σταθερό σημείο (αν υπάρχει) εξαρτάται από τα χαρακτηριστικά της εκπαίδευσης και την κατανομή $p_0(v)$ η οποία αποτελεί την αφετηρία της ροής.

5 Εφαρμογή των μηχανών Boltzmann στο μοντέλο Ising

Για την μελέτη της ροής RBM επιλέξαμε να εκπαιδεύσουμε δίκτυα πάνω σε καταστάσεις οι οποίες έχουν προκύψει από τη δυναμική του δισδιάστατου μοντέλου Ising (1). Ο πρώτος λόγος για αυτή την επιλογή έχει να κάνει με το ότι το Ising περιγράφεται από δυϊκούς βαθμούς ελευθερίας. Οι καταστάσεις του αποτελούν κατάλληλη είσοδο για το συγκεκριμένο νευρωνικό, ενώ ταυτόχρονα μπορούμε να παρακολουθούμε την εξέλιξη διαφόρων θερμοδυναμικών ποσοτήτων κατά την διάρκεια της ροής. Στην παρούσα εργασία θα περιοριστούμε στη μελέτη της κατανομής της μαγνήτισης

$$p(m) = \sum_{\{v\}} \delta(m - \frac{1}{N} \sum_{i} v_i) p(v)$$
(109)

των συναρτήσεων συσχέτισης (8) και τη θερμοκρασία της συλλογής Τ. Για την τελευταία θα χρησιμοποιηθεί ανεξάρτητο νευρωνικό δίκτυο τα χαρακτηριστικά του οποίου θα αναλυθούν στη συνέχεια

Ο δεύτερος λόγος -και λιγότερο προφανής- έγκειται στο γεγονός ότι το Ising στις δύο διαστάσεις παρουσιάζει κρίσιμο σημείο αλλαγής φάσης. Όπως αναλύθηκε στην ενότητα 1.2.2, το σημείο αυτό συνδέεται με το στάσιμο σημείο της ομάδας ανακανονικοποίησης και οι διατάξεις που προκύπτουν στην εγγύς περιοχή εμφανίζουν δομές (clusters) σε όλες τις κλίμακες. Οι διατάξεις αυτές υποθέτουμε ότι συγκρατούνται ευκολότερα από την "μνήμη" του νευρωνικού σε αντίθεση με καταστάσεις υψηλής ή χαμηλής θερμοκρασίας όπου κυριαρχεί ο θόρυβος ή η απουσία δομών αντίστοιχα. Οι επαναλαμβανόμενες ανακατασκευές του σήματος θα πρέπει να ευνοούν καταστάσεις όμοιες με αυτών της κρίσιμης περιοχής. Συνεπώς προκύπτει το ζήτημα αν το στάσιμο σημείο τη ανακανονικοποίησης συνδέεται με κάποιο τρόπο με αυτό της ροής RBM και υπό ποιες συνθήκες.

5.1 Εκπαίδευση των RBM

Για την μελέτη των παραπάνω ερωτημάτων εκπαιδεύσαμε δίκτυα RBM σε καταστάσεις του δισδιάστατου Ising. Επιλέξαμε οι διαστάσεις του συστήματος να είναι 10×10 , άρα $N_v = 100$, καθώς μεγαλύτερες τιμές θα αύξαναν σημαντικά την πολυπλοκότητα του δικτύου και κατ΄ επέκταση τον υπολογιστικό χρόνο της εκπαίδευσης. Η παραπάνω επιλογή ωστόσο έχει ως κόστος το γεγονός ότι στο σύστημα θα παίζουν σημαντικό ρόλο τα φαινόμενα πεπερασμένου μεγέθους.

Το σύνολο εκπαίδευσης κατασκευάστηκε χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο του Metropolis σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Οι θερμοκρασίες αυτές βρίσκονται ομοιόμορφα κατανεμημένες σε ένα παράθυρο $[T_{min}, T_{max}]$, με βήμα $\Delta T = T_{i+1} - T_i = 0.01$, το οποίο περιέχει την κρίσιμη περιοχή. Όσο μεγαλύτερο είναι το εύρος του παραθύρου, τόσο μεγαλύτερο και το πλήθος θερμών και ψυχρών καταστάσεων και κατ' επέκταση δυσκολότερο το έργο του νευρωνικού να αναγνωρίσει τις καταστάσεις με σύνθετες δομές. Συνεπώς, η κατανομή από την οποία προήλθαν τα δεδομένα εκπαίδευσης δίνεται από την έκφραση:

$$q(v) = \frac{1}{N_T} \sum_{i=1}^{N_T} \frac{e^{-\beta_i \mathcal{H}(v)}}{\mathcal{Z}(T_i)}$$
(110)

όπου N_T είναι το πλήθος των διαφορετικών θερμοκρασιών, $\beta_i = T_i^{-1}$ και η χαμιλτονιανή \mathcal{H} δίνεται από τη σχέση (1). Τέλος, οι συναρτήσεις επιμερισμού $\mathcal{Z}(T_i)$ δίνονται από εκφράσεις της μορφής (3), υπολογισμένες στις αντίστοιχες θερμοκρασίες T_i . Στο διάγραμμα 7 φαίνεται



Σχήμα 7: Η κατανομή μαγνήτισης των δεδομένων εκπαίδευσης

για την q(v) το προφίλ της κατανομής μαγνήτισης (γκρι γραμμή) σε σύγκριση με αυτή της κρίσιμης θερμοκρασίας (κόκκινη γραμμή).

Τα RBM που χρησιμοποιήσαμε εκπαιδεύτηκαν σε τρία διαφορετικά παράθυρα θερμοκρασιών, ενώ ταυτόχρονα χρησιμοποιήσαμε τρεις διαφορετικές αρχιτεκτονικές δηλαδή πλήθη κρυφών νευρώνων N_h . Σε όλες τις εκπαιδεύσεις επιλέξαμε συχνότητα μάθησης $\epsilon = 0.01$, πλήθος εποχών 50,000 και 1000 καταστάσεις ανά θερμοκρασία. Οι παραπάνω τιμές επιλέχθηκαν καθώς μετά από πολλές δοκιμές παρατηρήθηκε ότι προσέφεραν τα πιο καθαρά αποτελέσματα. Προέκυψαν επομένως εννέα διαφορετικά δίκτυα τα χαρακτηριστικά των οποίων φαίνονται στον παρακάτω πίνακα:

| | N_h | T_{min} | T_{max} | KL |
|-----------|-------|-----------|-----------|------|
| Μοντέλο 1 | 25 | 1.0 | 6.0 | 0.25 |
| Μοντέλο 2 | 25 | 1.5 | 4.0 | 0.27 |
| Μοντέλο 3 | 25 | 2.0 | 3.0 | 0.21 |
| Μοντέλο 4 | 49 | 1.0 | 6.0 | 0.26 |
| Μοντέλο 5 | 49 | 1.5 | 4.0 | 0.23 |
| Μοντέλο 6 | 49 | 2.0 | 3.0 | 0.19 |
| Μοντέλο 7 | 81 | 1.0 | 6.0 | 0.23 |
| Μοντέλο 8 | 81 | 1.5 | 4.0 | 0.23 |
| Μοντέλο 9 | 81 | 2.0 | 3.0 | 0.15 |

Πίνακας 6: Χαρακτηριστικά εκπαίδευσης μοντέλων

Βασική δυσκολία που συναντήσαμε σε αυτό το σημείο εντοπίστηκε στην απουσία κάποιου κριτηρίου για την ποιότητα της εκπαίδευσης. Όπως αναλύθηκε στην ενότητα 4.2 ο απευθείας υπολογισμός της απόκλισης KL είναι πρακτικά αδύνατος λόγω του τεράστιου φασικού χώρου που καταλαμβάνουν οι καταστάσεις. Προκειμένου να ξεπεράσουμε την παραπάνω δυσκολία υπολογίσαμε την απόκλιση KL μεταξύ της κατανομής της μαγνήτισης των δεδομένων εκπαίδευσης και των ανακατασκευασμένων καταστάσεων για ένα από τα μοντέλα:

$$KL(q(m)||p_{\theta}(m)) = -\sum_{m} q(m) \ln \frac{p_{\theta}(m)}{q(m)}$$
(111)

όπου οι κατανομές p(m) και q(m) δίνονται από εκφράσεις αντίστοιχες της (109). Στην τελευταία στήλη του παραπάνω πίνακα φαίνονται οι τιμές που πήρε η παραπάνω ποσότητα κατά το πέρας της τελευταίας εποχής, ενώ στο παρακάτω διάγραμμα φαίνεται η εξέλιξή της για ένα από τα μοντέλα κατά την διάρκεια της εκπαίδευσης:



Σχήμα 8: Η εξέλιξη της απόκλισης ΚL των κατανομών της μαγνήτισης

5.2 Η μέτρηση της θερμοχρασίας

Μια βασιχή ποσότητα η οποία θέλουμε να υπολογίσουμε για την συλλογή των καταστάσεων που προχύπτουν από την ροή RBM είναι η θερμοχρασία. Σε αντίθεση με τις υπόλοιπες ποσότητες που θα μας απασχολήσουν, ο υπολογισμό της δεν είναι καθόλου τετριμμένος. Ο βασιχός λόγος έγχειται στο γεγονός ότι οι καταστάσεις που προχύπτουν από το στάσιμο σημείο της ροής RBM δεν οφείλουν να ικανοποιούν την στατιστιχή Boltzmann. Αχόμα όμως χι αν αυτό ήταν αληθές, ο υπολογισμός της θερμοχρασίας θα προϋπέθετε την αχριβή γνώση της συνάρτησης επιμερισμού, το οποίο είναι αδύνατο για τους λόγους που αναφέραμε στο προηγούμενο χεφάλαιο.

Για να ξεπεράσουμε την παραπάνω δυσκολία κατασκευάσαμε ένα εποπτευόμενο νευρωνικό δίκτυο το οποίο και καλούμε "θερμόμετρο". Δουλειά του συγκεκριμένου δικτύου είναι να εκτιμά για κάθε κατάσταση ξεχωριστά την θερμοκρασία από την οποία θα είχε προκύψει εάν η δυναμική που το περιγράφει είναι αυτή του δισδιάστατου Ising. Η εκτίμηση της θερμοκρασίας της συλλογής θα αντιστοιχεί στο μέγιστο της κατανομής των προβλέψεων που θα πάρουμε.

Η μέθοδος αυτή ωστόσο φέρει το εξής πρόβλημα: η θερμοκρασία είναι μια ποσότητα που περιγράφει την συλλογή και όχι κάθε μια κατάσταση ξεχωριστά. Μια κατάσταση, φερ΄ ειπείν, που όλα τα spin έχουν τον ίδιο προσανατολισμό θα μπορούσε να έχει προκύψει από ένα σύστημα χαμηλής θερμοκρασίας με μεγάλη πιθανότητα ή από ένα σύστημα υψηλής θερμοκρασίας με μικρότερη πιθανότητα. Υποθέτουμε ωστόσο ότι στο όριο των πολλών καταστάσεων το μέγιστο των προβλέψεων θα βρίσκεται πολύ κοντά στη πραγματική τιμή της θερμοκρασίας της συλλογής.

5.3 Η δομή και η εκπαίδευση του θερμομέτρου

Το θερμόμετρο αποτελείται από τρία επίπεδα: τους νευρώνες εισόδου, τους χρυφούς και τους νευρώνες εξόδου. Οι νευρώνες εισόδου διαβάζουν κάθε κατάσταση, συνεπώς είναι σε πλήθος ίσοι με τον αριθμό των spin του Ising: $N_h = L^2 = 100$. Κάθε νευρώνας εξόδου αντιστοιχεί σε μια δυνατή πρόβλεψη της θερμοκρασίας $T = 1.0, 1.1, \ldots 6.0$, συνεπώς $N_{out} = 51$. Το κάθε επίπεδο συνδέεται με το αμέσως επόμενο όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα:



Σχήμα 9: Η δομή του νευρωνικού για την εκτίμηση της θερμοκρασίας

Όπως και στην περίπτωση των απλών RBM, το παραπάνω δίκτυο περιγράφεται από τα βάρη (weights) w και τις προτιμήσεις (bias) c και d της εισόδου, του κρυφού επιπέδου και της εξόδου αντίστοιχα. Το πλήθος των κρυφών νευρώνων που επιλέξαμε είναι $N_h = 400$. Κάθε επίπεδο συνδέεται με το επόμενο μέσω της σιγμοειδούς συνάρτησης:

$$p(h_i = 1) = \sigma(\sum_{j=1}^{N_v} w_{ij}v_j + c_i)$$
(112)

ενώ αντίστοιχα:

$$p(t_i = 1) = \sigma(\sum_{j=1}^{N_h} \tilde{w}_{ij} v_j + d_i)$$
(113)

όπου t_i οι νευρώνες της εξόδου που αντιστοιχούν στις διαφορετικές προβλέψεις. Τέλος προκειμένου η έξοδος να έχει χαρακτηριστικά κατανομής πιθανότητας χρησιμοποιούμε στους νευρώνες εξόδου την συνάρτηση softmax:

$$s(t)_{i} = \frac{e^{t_{i}}}{\sum_{j=1}^{N_{out}} e^{t_{j}}}$$
(114)

Για την εχπαίδευση του θερμομέτρου κατασχευάσαμε μέσω του αλγορίθμου του Metropolis 2000 καταστάσεις για κάθε μία από της θερμοχρασίες $T = 1.0, 1.1, \ldots 6.0$. Οι καταστάσεις κατηγοριοποιήθηκαν σύμφωνα με τη θερμοχρασία στην οποία παράχθηκαν. Για την εχπαίδευση χρησιμοποιήσαμε την μέθοδο της απότομης κατάβασης ενώ για συνάρτηση κόστους χρησιμοποιήθηκε και εδώ η απόχλιση KL. Το δίκτυο εκπαιδεύτηκε για 70.000 εποχές με συχνότητα εκπαίδευσης $\epsilon = 0.01$. Η αξιοπιστία του συγκεκριμένου νευρωνικού επαληθεύτηκε πάνω σε ανεξάρτητες καταστάσεις οι οποίες κατασκευάστηκαν επίσης με τον Metropolis.

5.4 Μελέτη του σταθερού σημείου της ροής RBM

5.4.1 Η κατανομή της μαγνήτισης

Στα παραχάτω διαγράμματα φαίνεται η κατανομή της μαγνήτισης (109) η οποία προέχυψε μετά από 2000 ανακατασχευές στη ροή RBM (γκρι γραμμές). Στα ίδια διαγράμματα παραθέτουμε και την κατανομή για δεδομένα Monte Carlo πάνω στην κρίσιμη θερμοκρασία του άπειρου συστήματος $T_{cr} \simeq 2.269$. Οι κατανομές είναι κανονικοποιημένες στη μονάδα



Σχήμα 10: Κατανομή της μαγνήτισης των μοντέλων 1, 2 και 3



Σχήμα 11: Κατανομή της μαγνήτισης των μοντέλων 4, 5 και 6



Σχήμα 12: Κατανομή της μαγνήτισης των μοντέλων 7, 8 και 9

5.4.2 Η πρόβλεψη της θερμοχρασίας

Στα παραχάτω διαγράμματα παραθέτουμε την χατανομή των προβλέψεων των θερμοχρασιών από το θερμόμετρο. Η χάθετη χόχχινη γραμμή αναφέρεται στην χρίσιμη θερμοχρασία του άπειρου συστήματος.



Σχήμα 13: Πρόβλεψη της θερμο
χρασίας για τα μοντέλα 1,2και 3



Σχήμα 14: Πρόβλεψη της θερμο
χρασίας για τα μοντέλα 4, 5 και 6



Σχήμα 15: Πρόβλεψη της θερμο
χρασίας για τα μοντέλα 7, 8 και 9

5.5 Σχολιασμός των αποτελεσμάτων

Από τα δεδομένα που παραθέσαμε στις δύο προηγούμενες υποενότητες προχύπτουν σοβαρές ενδείξεις ότι η ροή RBM συγκλίνει στην κρίσιμη περιοχή. Οι τελικές καταστάσεις προσεγγίζουν την συμπεριφορά του Ising, όταν αυτό βρίσκεται στη κρίσιμη θερμοκρασία του άπειρου συστήματος. Στο σημείο αυτό να τονίσουμε ότι για το σύστημα με διαστάσεις 10 × 10 το οποίο μελετάμε, η θερμοκρασία αυτή βρίσκεται βαθιά στην οργανωμένη φάση του καθώς η ψευδοκρίσιμη θερμοκρασία είναι αρκετά μεγαλύτερη. Ως εκ τούτου παρατηρούνται οι δυο συμμετρικοί λοβοί στην κατανομή της μαγνήτισης ακόμα και για τα δεδομένα που προέκυψαν από προσομοιώσεις Monte Carlo στην $T_{cr} \simeq 2.269$.

Η σύγκλιση στην κρίσιμη περιοχή δεν είναι μια τετριμμένη. Αυτό επιβεβαιώνεται από το γεγονός ότι η κατανομή εκπαίδευσης, η οποία φαίνεται στο διάγραμμα 7, με τις κατανομές που προέκυψαν μετά τη ροή διαφέρουν δραματικά. Η ροή RBM συνεπώς δεν συγκλίνει στην κατανομή με την οποία εκπαιδεύτηκε.

Η σύγκλιση στη κρίσιμη θερμοκρασία βελτιώνεται καθώς μεγαλώνουμε την πολυπλοκότητα του νευρωνικού δικτύου αυξάνοντας το πλήθος των κρυφών νευρώνων. Τα μοντέλα με μικρούς αριθμούς N_h, παρόλο που τα μέγιστα των κατανομών που παράγουν εντοπίζονται πολύ κοντά σε αυτά του κρίσιμου, λόγω της μικρής χωρητικότητας που διαθέτουν αδυνατούν να περιγράψουν επαρκώς τις ουρές των κατανομών. Η παραπάνω συμπεριφορά είναι τυπική των νευρωνικών δικτύων.

Επιπλέον, όσο περιορίζουμε το παράθυρο των θερμοκρασιών $[T_{min}, T_{max}]$, η συμπεριφορά αυτή βελτιώνεται περαιτέρω. Μάλιστα, στο μοντέλο 9 το οποίο έχει το μεγαλύτερο πλήθος κρυφών νευρώνων και έχει εκπαιδευτεί στην στενότερη περιοχή θερμοκρασιών υπάρχει απόλυτη ταύτιση της κατανομής της μαγνήτισης με την κρίσιμη. Θεωρούμε ότι ο λόγος για τον οποίο συμβαίνει αυτό προκύπτει από το ότι στα μεγαλύτερα παράθυρα θερμοκρασιών εμπεριέχεται πολύ μεγαλύτερο πλήθος καταστάσεων είτε χαμηλής εντροπίας (κρύες) είτε υψηλού θορύβου (θερμές). Στις καταστάσεις αυτές απουσιάζουν δομές (clusters) και η εκπαίδευση τελείται δυσκολότερα.

Όλα τα παραπάνω είναι λιγότερο ορατά με τη χρήση του θερμομέτρου, τα αποτελέσματα του οποίου δηλώνουν ότι όλα τα μοντέλα είναι ισοδύναμα και παράγουν καταστάσεις ακριβώς πάνω στη T_{cr} . Οι λόγοι για αυτό προφανώς συνδέονται άμεσα με τις αδυναμίες της "θερμομέτρησης" που αναλύσαμε στο τέλος της ενότητας 5.2. Συνεπώς θεωρούμε την κατανομή της μαγνήτισης καταλληλότερη για την μελέτη τέτοιων προβλημάτων.

Αναφορές

- [1] Ken-Ichi Aoki and Tamao Kobayashi. "Restricted Boltzmann machines for the long range Ising models". In: *Modern Physics Letters B* 30.34 (2016), p. 1650401.
- [2] Kenneth I Appel and Wolfgang Haken. *Every planar map is four colorable*. Vol. 98. American Mathematical Soc., 1989.
- [3] Pierre Baldi, Peter Sadowski, and Daniel Whiteson. "Searching for exotic particles in high-energy physics with deep learning". In: *Nature communications* 5.1 (2014), pp. 1–9.
- [4] MN Barber. Finite Size Scaling, Bd. 8 aus Phase Transitions and Critical Phenomena. ed. Domb C. and Green MS. 1983.
- [5] John Cardy. Scaling and renormalization in statistical physics. Vol. 5. Cambridge university press, 1996.
- [6] Giuseppe Carleo and Matthias Troyer. "Solving the quantum many-body problem with artificial neural networks". In: *Science* 355.6325 (2017), pp. 602–606.
- [7] Shotaro Shiba Funai and Dimitrios Giataganas. "Thermodynamics and feature extraction by machine learning". In: *Physical Review Research* 2.3 (2020), p. 033415.
- [8] Dimitrios Giataganas, Ching-Yu Huang, and Feng-Li Lin. "Neural Network flows of low q-state Potts and clock Models". In: arXiv preprint arXiv:2102.05219 (2021).
- [9] Andrew Hallam et al. "Compact neural networks based on the multiscale entanglement renormalization ansatz". In: *arXiv preprint arXiv:1711.03357* (2017).
- [10] Geoffrey E Hinton. "Training products of experts by minimizing contrastive divergence". In: *Neural computation* 14.8 (2002), pp. 1771–1800.
- [11] Geoffrey E Hinton and Ruslan R Salakhutdinov. "Reducing the dimensionality of data with neural networks". In: *science* 313.5786 (2006), pp. 504–507.
- [12] Maciej Koch-Janusz and Zohar Ringel. "Mutual information, neural networks and the renormalization group". In: *Nature Physics* 14.6 (2018), pp. 578–582.
- [13] David Landau and Kurt Binder. A guide to Monte Carlo simulations in statistical physics. Cambridge university press, 2021.
- [14] Hugo Larochelle and Yoshua Bengio. "Classification using discriminative restricted Boltzmann machines". In: Proceedings of the 25th international conference on Machine learning. 2008, pp. 536–543.
- [15] Wilhelm Lenz. "Beitrěge zum verstšndnis der magnetischen eigenschaften in festen kěrpern". In: *Physikalische Z* 21 (1920), pp. 613–615.
- [16] Nicholas Metropolis et al. "Equation of state calculations by fast computing machines". In: The journal of chemical physics 21.6 (1953), pp. 1087–1092.
- [17] Lars Onsager. "Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition". In: *Physical Review* 65.3-4 (1944), p. 117.
- [18] Zoltán Rácz and Malcolm F. Collins. "Linear and nonlinear critical slowing down in the kinetic Ising model: High-temperature series". In: *Phys. Rev. B* 13 (7 1976), pp. 3074–3080.
- [19] Samuel S Schoenholz et al. "A structural approach to relaxation in glassy liquids". In: Nature Physics 12.5 (2016), pp. 469–471.

- [20] Paul Smolensky. "Chapter 6: information processing in dynamical systems: foundations of harmony theory". In: *Parallel distributed processing: explorations in the microstructure of cognition* 1 ().
- [21] Lei Wang. "Discovering phase transitions with unsupervised learning". In: *Physical Review B* 94.19 (2016), p. 195105.
- [22] Kenneth G Wilson. "Renormalization group and critical phenomena. I. Renormalization group and the Kadanoff scaling picture". In: *Physical review B* 4.9 (1971), p. 3174.