



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

FACULTAD DE CIENCIAS

Redes de neuronas y vidrios de Espín

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

M A T E M Á T I C O

P R E S E N T A:

PAVEL IVAN PONCE AGUILERA



DIRECTOR DE TESIS:

DR. PEDRO EDUARDO MIRAMONTES VIDAL

2007



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hoja de Datos del Jurado

1. Datos del alumno

Ponce
Aguilera
Pavel Ivan
56-41-71-15
Universidad Nacional Autónoma de México
Facultad de Ciencias
Matemáticas
099504340

2. Datos del Tutor

Dr.
Pedro Eduardo
Miramontes
Vidal

3. Datos del sinodal 1

Dr.
Germinal
Cocho
Gil

4. Datos del sinodal 2

M. en C.
José Antonio
Neme
Castillo

5. Datos del sinodal 3

Dr.
Eric Fabián
Hernández
Martínez

6. Datos del sinodal 4

Dr.
José de Jesús
Galaviz
Casas

7. Datos del trabajo escrito

Redes de neuronas y vidrios de Espín
98 p
2007

Dedicatorias:

A mi Padre y a mi Madre:

Gracias a ellos a su amor y a su apoyo en mi vida he podido hacer todas las cosas que he hecho.

A mi Hermana y a mi Hermano, que los quiero y respeto.

A mis Abuelos.

A mis Tíos, por su paciencia y grandísima ayuda.

A mis Primos

A Tere mi amor, con quien he empezado a compartir mi vida.

A mis Amigos de la Preparatoria.

A mis amigos de la Facultad.

Agradecimientos:

A Dios por permitirme estar vivo y haciendo lo que me gusta.

A mis Maestros y Compañeros.

A mi Facultad de Ciencias.

A mi muy querida Universidad.

A Todos, los que de alguna manera me han ayudado a estar aquí.

Índice general

1. Introducción	3
2. Conceptos básicos de las neuronas	6
2.1. Neuronas biológicas	6
2.2. Neuronas matemáticas	8
2.2.1. Modelación matemática de la neurona	8
2.2.2. Entrenamiento del perceptrón	11
2.2.3. Limitaciones del perceptrón	17
2.3. Redes de neuronas	19
3. Modelo de Hopfield	28
3.1. El modelo de Hopfield	28
3.2. Teoría del potencial	32
3.3. La función de energía	33
3.4. Clasificación de patrones	35
3.5. Recuperación de patrones	38
3.6. Ejemplo de recuperación de patrones	40
4. Mecánica estadística	44
4.1. Principios generales de la mecánica estadística	44
4.2. El sistema magnético de Ising de espín	48
4.3. La aproximación de campo medio	48
4.4. El modelo de Ising con interacciones de largo alcance débiles	53
5. Vidrios de espín	56
5.1. El modelo de vidrios de espín	56
5.2. El concepto de frustración	57
5.3. Promedio de las celdas	59

5.4.	La interrupción de la ergodicidad	60
5.5.	Los posibles escenarios	62
5.6.	La secuencia continua de la transición de fase	64
5.7.	El parámetro de orden	66
5.8.	Ultrametricidad	68
6.	Redes de neuronas y vidrios de espín	73
6.1.	Preámbulo	73
6.1.1.	Modelos de redes de neuronas	73
6.1.2.	Modelo generalizado de Hopfield	75
6.1.3.	La relación de los modelos de magnetos aleatorios	76
6.2.	El modelo generalizado de Hopfield	77
6.2.1.	Teoría de aproximación de campo medio	77
6.2.2.	Los estados de Mattis	79
6.2.3.	Soluciones simétricas	82
6.3.	Metaestabilidad en el modelo generalizado de Hopfield	85
6.3.1.	La matriz de estabilidad de las soluciones simétricas	85
6.3.2.	Estabilidad cerca de T_c y $T = 0$	86
6.3.3.	La estabilidad dinámica	88
7.	Conclusiones	89

Índice de figuras

2.1.	Figura de una neurona biológica.	7
2.2.	Modelo matemático de una neurona.	11
2.3.	Espacio de dos dimensiones con dos clases representadas, las cuales son linealmente separables.	12
2.4.	Espacio de dos dimensiones con dos clases representadas, las cuales no son linealmente separables.	13
2.5.	Espacio de dos dimensiones dividido en dos clases de patrones, la clase de letras A y la clase de letras B.	14
2.6.	Espacio de dos dimensiones con las dos clases representadas, las cuales no son linealmente separables.	18
2.7.	Figura del perceptrón multicapa.	20
3.1.	Red de neuronas de Hopfield.	29
3.2.	La función de energía de una red de Hopfield puede representarse como una gráfica tridimensional.	34
3.3.	Conjunto de patrones que ha aprendido el modelo de Hopfield, figura tomada del libro [2].	41
3.4.	Se pone como entrada al modelo de Hopfield un patrón corrupto y la secuencia muestra como la red itera sucesivamente a través de los estados, hasta que ésta recobra el resultado estable, figura tomada del libro [2].	43
4.1.	La energía libre del modelo ferromagnético de Ising: (a) en la región de la temperatura superior $T > T_c$, (b) en la región de temperatura inferior $T < T_c$	52
5.1.	La frustración en el sistema de los tres espines.	58

5.2. La estructura cualitativa de la superficies de energía libre en diferentes temperaturas.	65
5.3. La función de distribución de probabilidad $P(q)$	71
5.4. El árbol jerárquico de los estados de los vidrios de espín.	72

Capítulo 1

Introducción

En el presente trabajo de tesis, lo que se hizo fue tomar dos modelos matemáticos y trabajar con ellos para encontrar similitudes que a primera vista no son tan obvias. El primer modelo es el de Hopfield, que se refiere a una red de neuronas totalmente interconectadas, en este modelo el comportamiento de todas y cada una de las neuronas afecta el comportamiento de cada una de las otras neuronas. El segundo modelo es el de los vidrios de espín, que se refiere a una estructura física en la cual muchas partículas de algún material metálico que pueda ser afectado magnéticamente inmerso en otro material que no tenga campo magnético o que su campo magnético sea tan insignificante que no altere el comportamiento magnético de las partículas metálicas, entonces se analiza la relación que existe entre las partículas, ya que el campo magnético de todas afecta a una partícula que ya tiene una carga magnética y esta puede cambiar o no su carga magnética por la afectación que recibe de las demás partículas. En el presente trabajo de tesis se analiza la similitud que el modelo de los vidrios de espín tiene y cómo es que se puede llegar a comportar como el modelo de Hopfield y tener todas las características de dicho modelo.

Para comprender esta tesis no es necesario tener conocimientos previos de los modelos de Hopfield ni de vidrios de espín, puesto que se desarrollan algunos temas introductorios e ilustrativos de ambos modelos, para una mejor comprensión del presente trabajo, se empieza el trabajo introduciendo al lector en el tema de las neuronas tanto biológicas como matemáticas, ya que se desarrolla un modelo de neurona llamado perceptrón que es puramente ilustrativo para sumergir al lector en la materia, de una manera muy fácil

y didáctica. Una vez que el lector se ha familiarizado con el tema entonces presento uno de los modelos centrales de esta tesis que es el modelo de Hopfield.

Análogamente desarrollo los temas básicos de la mecánica estadística que son necesarios para comprender el modelo de los vidrios de espín con el enfoque que le doy en esta tesis, y ya que el lector está familiarizado con estos temas, entonces presento el otro modelo central de esta tesis, que es el modelo de los vidrios de espín.

Habiendo sentado las bases para esta tesis entonces se elige un modelo matemático de entre muchos modelos que existen para los vidrios de espín y se analiza, hasta que llegamos a que su comportamiento es como el comportamiento del modelo matemático de Hopfield.

Esta tesis está estructurada en siete capítulos, de la siguiente manera:

El primero de estos capítulos le corresponde a esta introducción.

En el segundo capítulo se establecen las bases para poder hablar sobre los modelos de neuronas, dando una breve semblanza de lo que es una neurona biológica y se presenta un modelo matemático de una neurona, cómo funciona, cómo se entrena, cómo trabaja y sus limitaciones, para finalizar este capítulo se presenta un modelo de redes de neuronas.

En el tercer capítulo se expone el modelo de Hopfield, con todas sus características, que son las que lo hacen un modelo tan interesante así como, la importancia que tiene la función de energía para este modelo, la clasificación y recuperación de patrones.

En el cuarto capítulo, al igual que en el segundo capítulo, se dan las bases para poder tratar, en este caso, los temas de la mecánica estadística, como son el sistema magnético de Ising de espín y se ve la aproximación de campo medio.

En el quinto capítulo se muestra el modelo de los vidrios de espín y sus características como son la frustración, la ergodicidad, el parámetro de orden y la ultrametricidad. Hasta aquí hemos expuesto y analizado los temas

necesarios para nuestro siguiente capítulo.

En el sexto capítulo se analiza un modelo de los vidrios de espín. Al ir analizándolo se llega a que este modelo tiene el mismo comportamiento que el de Hopfield.

En el séptimo capítulo están las conclusiones a las que hemos llegado con este trabajo.

Capítulo 2

Conceptos básicos de las neuronas

2.1. Neuronas biológicas

Las neuronas biológicas son las células básicas de un órgano muy importante del sistema nervioso que es el cerebro, el cual sirve, entre otras cosas, para clasificar la información que a los seres vivos nos llega por medio de nuestros sentidos como son la vista, el olfato, el gusto, el tacto y el oído.

El objetivo de estudiar el comportamiento de estas células desde un punto de vista matemático o con un modelo matemático de las neuronas biológicas es su gran capacidad para clasificar la información y que desde un punto de vista computacional utilizando el modelo matemático se puede hacer un programa para una computadora, para que ésta simule que es una neurona y entonces con este programa poder clasificar la información de la forma como el cerebro lo hace, y de ahí se tiene la intención de que si de alguna manera se puede hacer artificialmente algo que el cerebro hace, entonces en un momento dado poder decir que se puede llegar a tener inteligencia artificial.

El cerebro humano está compuesto por diez mil millones (10^{10}) de neuronas, cada una de estas neuronas está conectada con otras diez mil (10^4) neuronas [2].

Las neuronas biológicas, están formadas de cuatro elementos principales

que son sinápsis, axón, dendritas y soma. Las sinápsis son uniones especializadas mediante las cuales las células del sistema nervioso (neuronas) envían señales de unas a otras, son la unión entre la dendrita y el axón. Las dendritas que son prolongaciones protoplásmicas ramificadas, bastante cortas, de la célula nerviosa. Son terminales de las neuronas; y están implicadas en la recepción de los estímulos, pues sirven como receptores de impulsos nerviosos provenientes desde un axón perteneciente a otra neurona. El soma es el cuerpo de una neurona, el cual contiene el núcleo y los nucléolos de la neurona. Y el axón es una prolongación filiforme de la célula nerviosa, a través de la cual viaja el impulso nervioso de forma unidireccional, y que establece contacto con otra célula mediante ramificaciones terminales. El soma es el cuerpo de las neuronas y unido al soma se encuentran las dendritas, que es por donde entra la información a la neurona. Estas dendritas son filamentos muy finos y se ramifican en una forma similar que las ramas de los árboles, otro tipo de nervio es el axón que es eléctricamente activo al igual que las dendritas y este sirve como un canal de salida de la información de la neurona, las dendritas están conectadas a los axones de otras neuronas, la sinápsis es el conector entre las dendritas y los axones a través de la cual pasa la señal, las sinápsis controlan la cantidad de señal eléctrica que pasa del axón a las dendritas. Para nuestro estudio nos centraremos en estos cuatro componentes de la neurona, primero las dendritas que son las entradas de la información, segundo el soma que es donde se efectúa la clasificación, tercero el axón que es la salida del procesamiento de la neurona, cuarto la sinápsis que es la que conecta al axón con las dendritas y modifica la intensidad de la señal que pasa a través de las dendritas. En la figura 2.1 ilustramos una neurona biológica.

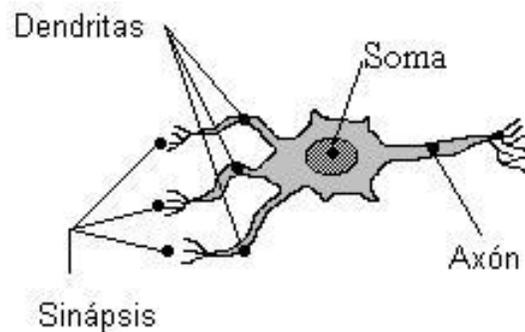


Figura 2.1: Figura de una neurona biológica.

Esta célula es capaz de realizar funciones más complejas que una simple suma con todas las entradas que recibe, pero para nuestro estudio es una buena aproximación el pensar que lo que hace es sólo la suma de todas las entradas y trunca la pasándola por la función del umbral y de esta manera es como pasa de ser un modelo lineal a un modelo no lineal.

Las neuronas tienen muchas entradas las cuales son todas sumadas de alguna manera, si son recibidas suficientes entradas activas entonces la neurona será activada y tendrá una salida activa o disparará una señal eléctrica, y si el número de entradas activas no es el número suficiente, entonces la neurona permanecerá inactiva o no disparará una señal eléctrica.

Como hemos dicho antes el gran interés en las neuronas es que en conjunto, como redes de neuronas clasifican la información muy bien, pero para hacerlo en algún momento de la vida de la neurona hay que entrenarla, para que clasifique la información de manera adecuada, en la neurona biológica la forma de aprender es asignándole prioridades a las entradas o pesos por importancia de las entradas, la entrada más importante tendrá un mayor peso en la clasificación de la neurona, y en particular las sinapsis son las que alteran el valor de las entradas dependiendo de que intensidad de la señal pasa a través de las sinapsis.

2.2. Neuronas matemáticas

2.2.1. Modelación matemática de la neurona

Lo que nosotros buscamos es que el modelo tenga todas las características posibles de la neurona biológica y de la forma en que trabaja.

Podemos simplificar las características generales de la neurona biológica de la siguiente manera:

- La salida de una neurona es siempre activa (1) o inactiva (0).
- La salida depende solamente de las entradas, debe haber un cierto número de entradas activas, para que la salida sea activa.

La eficiencia de la sinápsis como conexión de la señal de entrada dentro del soma puede modelarse teniendo un factor multiplicativo sobre cada una de las entradas de la neurona. Una sinápsis eficiente transmite la mayor parte de la señal, así que le correspondería un mayor peso, mientras que a una sinápsis que no es muy eficiente que transmite poco de la señal le corresponde un peso menor.

Matemáticamente, si hay n entradas, entonces hay n pesos asociados a cada entrada, el modelo de la neurona multiplica a la primera entrada por su peso y la suma a la segunda entrada por su peso y así hasta la n -ésima entrada, esto se puede escribir como sigue, si llamamos a los pesos w_i y a las entradas a_i donde $i \in \{1, 2, \dots, n\}$ y el valor del umbral¹ es ϕ

$$w_1a_1 + w_2a_2 + \dots + w_na_n = \sum_{i=1}^n w_ia_i$$

Esta suma todavía se tiene que comparar con el valor del umbral, si sobrepasa el valor del umbral entonces la salida es activa (1), en caso contrario la salida es inactiva (0), pero a esta comparación la podemos ver de otra manera: si a la suma le restamos el valor del umbral, entonces si el valor de la suma menos el umbral es positivo la salida del modelo será activa (1) y si es negativo entonces la salida del modelo será inactiva (0), quedaría así

$$\sum_{i=1}^n w_ia_i - \phi$$

Ahora Bien si tomamos al valor del umbral como una entrada más y su peso sea -1 , entonces lo tomamos $w_0 = -1$ y $a_0 = \phi$, entonces nos quedaría la siguiente ecuación

¹Es la cantidad mínima de señal que ha de estar presente para ser registrada por un sistema. Por ejemplo, la mínima cantidad de señal recibida para que la salida de la neurona sea activa.

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^n w_i a_i - \phi &= \\
 &= \sum_{i=1}^n w_i a_i + w_0 a_0 \\
 &= \sum_{i=0}^n w_i a_i
 \end{aligned}$$

Si nos fijamos ahora en la comparación siempre es, si la suma es positiva o negativa, independientemente del valor del umbral, entonces podemos evaluar la suma con la función escalón que es

$$f_E(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ 0 & \text{si } x \leq 0 \end{cases}$$

Con esta función nos aseguramos que la salida del modelo sea solamente activa (1) o inactiva (0), entonces la neurona es también solamente activa (1) o inactiva (0), si a la salida del modelo la llamamos y , entonces el modelo nos queda de la siguiente manera.

$$y = f_E \left[\sum_{i=0}^n w_i a_i \right]$$

Este es el modelo de una neurona que suma sus entradas y tiene una salida, pero en comparación con el complejo desarrollo de una neurona biológica, es muy sencillo y esto nos garantiza que es un modelo, fácil de entender y de trabajar con el, y no una copia de una neurona real, y ahora es posible que podamos hacer un programa para una computadora basado en este modelo, de manera que una computadora puede tener el comportamiento de una neurona, que en el fondo es lo que se busca en el computo neuronal. El primer modelo de una neurona artificial del que se tenga registro fue hecho en el año de 1943 por dos científicos estadounidenses de la Universidad de Illinois el psicólogo Warren Sturgis McCulloch y un joven matemático Walter Pitts, y se le conoce como neurona de McCulloch- Pitts [15].

A este sencillo modelo se le suele llamar perceptrón, que consta de una sola neurona, se puede pensar en un modelo similar que conste de más de una

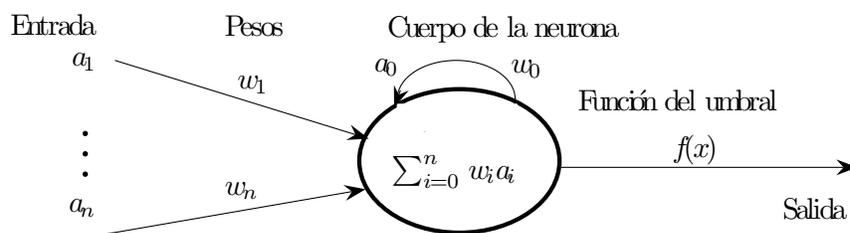


Figura 2.2: Modelo matemático de una neurona.

neurona y estén conectadas, y a ese modelo se le llama *perceptrón* multicapa, y es una red de neuronas, pero las redes de neuronas las analizaremos más adelante.

2.2.2. Entrenamiento del perceptrón

Esta sección es solamente para ilustrar cómo se entrena un modelo de una neurona, hasta aquí ya tenemos el modelo de la neurona, ahora veremos de qué forma aprende la neurona, o en este caso de qué forma podemos entrenar a la neurona. En general cuando se está entrenando algo, el buen comportamiento se refuerza con estímulos y el mal comportamiento es reprimido, esto es para cualquier clase de entrenamiento, no nada más de las neuronas, de hecho lo que intentaremos es trasladar esta idea al entrenamiento de las neuronas. Nosotros debemos de tratar de reforzar el comportamiento del modelo cuando queramos que se repita y descartar las cosas que no queremos o donde lo haga mal.

Para hablar de dos clases de patrones linealmente separables es necesario introducir el concepto de separabilidad lineal. Sean dos clases de patrones A y B en el espacio de dos dimensiones, son linealmente separables si existe un vector tal que parta en dos semiplanos al espacio de dos dimensiones C_1 y C_2 quedando cada clase de patrones en un semiplano diferente, por ejemplo que $A \subset C_1$ y que $B \subset C_2$ ver figura 2.3. En consecuencia dos clases de patrones no son linealmente separables si no existe un vector tal que parta

en dos semiplanos al espacio de dos dimensiones y cada una de las clases quede en un semiplano diferente, o expresado de otra manera las dos clases no son linealmente separables si para todo vector que tracemos en el espacio de dos dimensiones en alguno de los semiplanos contiene elementos de ambas clases ver figura 2.4.

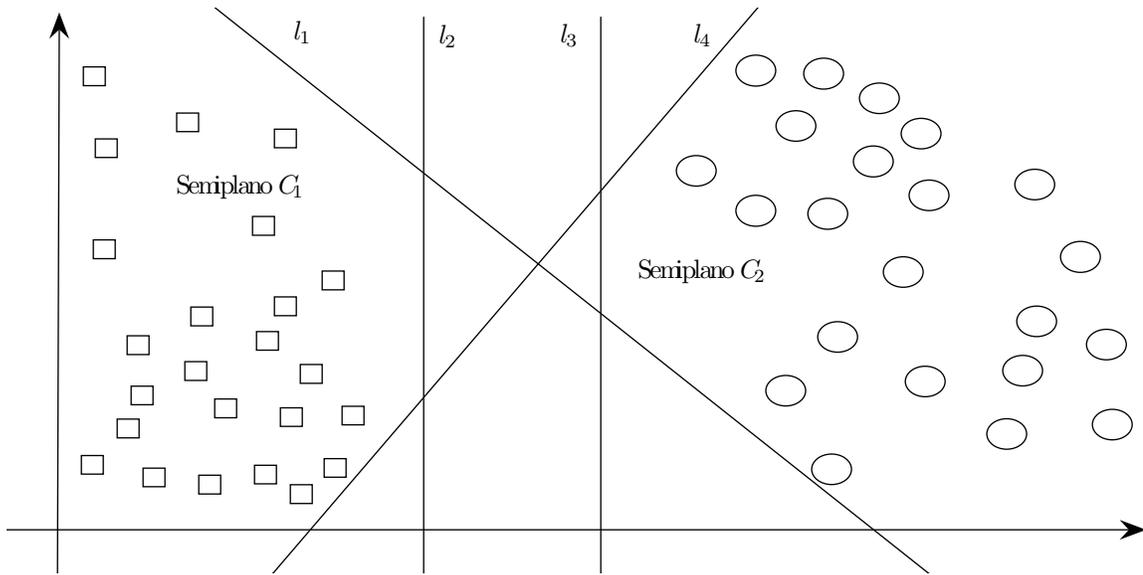


Figura 2.3: Espacio de dos dimensiones con dos clases representadas, las cuales son linealmente separables.

Si le presentamos dos grupos de letras distintas al modelo, un grupo contiene distintos tipos de letra A y el otro grupo contiene distintos tipos de letra B como se ve en la figura 2.5, nosotros queremos que nuestro modelo cuando se le presente un elemento del grupo de las letras A la salida sea 1, y cuando le presentemos un elemento del grupo de las letras B la salida sea 0.

Ahora tenemos que pensar como entrenar a nuestra neurona, una forma sería que la neurona aprendiera sola de sus errores, si la neurona tiene una salida errónea hay que reducir las oportunidades de que esto suceda otra vez y si la salida es acertada entonces no hacer nada, si introducimos un conjunto de datos a la neurona con los pesos de sus entradas escogidos aleatoriamente y que este sea su estado de inicio, en el cual no conoce nada o todavía no

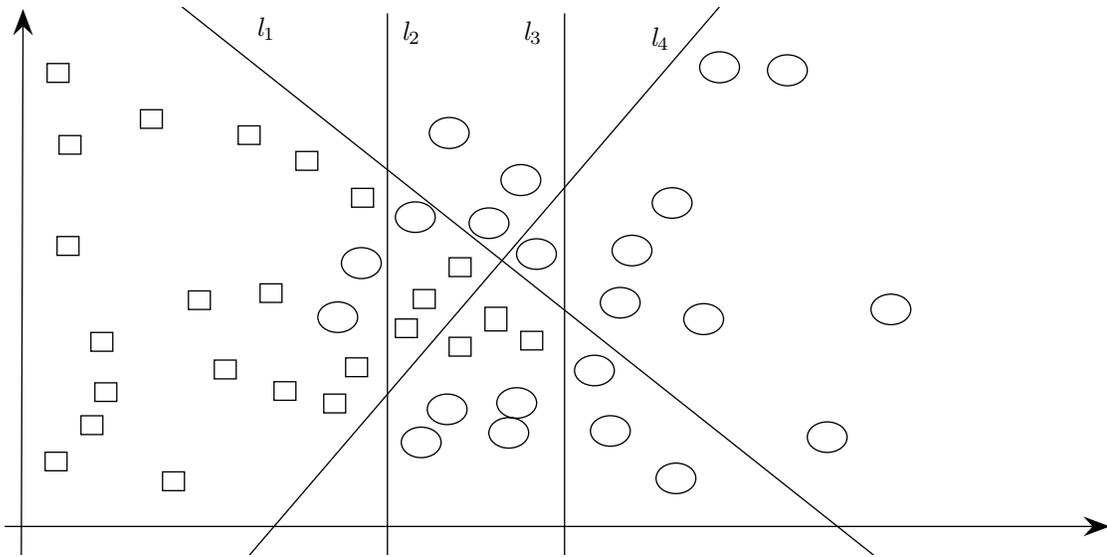


Figura 2.4: Espacio de dos dimensiones con dos clases representadas, las cuales no son linealmente separables.

había sido entrenada, le podemos presentar un elemento del conjunto de las letras A, la neurona hará la suma de las entradas con los pesos aleatorios y lo comparará con el umbral, si la suma sobrepasa el umbral entonces la salida será 1 si no sobrepasa la suma el umbral entonces la salida será 0, la probabilidad de que la salida de la neurona sea 1 es 50% y la probabilidad de que la salida de la neurona sea 0 es también 50% al principio, por que los pesos fueron escogidos aleatoriamente.

Las entradas de la neurona solamente tienen una oportunidad de que habiendo escogido los pesos aleatoriamente la salida sea 1 que es en la primera, si suponemos que en esta vez la suma sobrepasó el umbral entonces la salida es 1, siguiendo con la idea de cómo entrenar a la neurona entonces no tenemos que hacer nada puesto que la salida es la que esperábamos la neurona ha sido exitosa, pero si la salida ha sido 0 y la letra que le enseñamos era una A, entonces lo que tendremos que hacer es incrementar la suma ponderada² para que la próxima vez sobrepase el umbral y así se produzca la salida correcta 1, podemos hacer lo anterior incrementando el valor de los pesos de las

²A la suma del estilo de las entradas multiplicadas por su peso, se les suele llamar sumas ponderadas

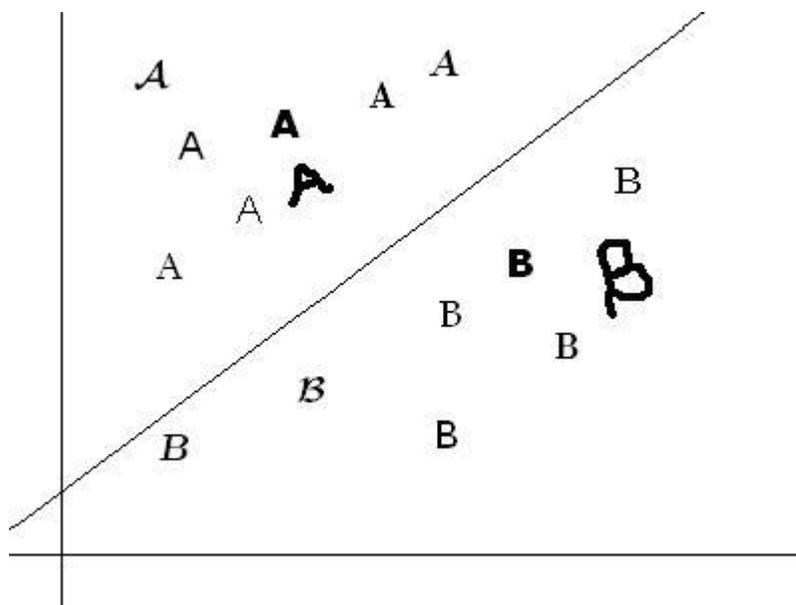


Figura 2.5: Espacio de dos dimensiones dividido en dos clases de patrones, la clase de letras A y la clase de letras B.

entradas activas que son los que en realidad influyeron y si la salida ya había sido correcta entonces podemos reforzar el entrenamiento incrementando los pesos de las entradas activas.

Para cuando presentemos una B, queremos que la salida de la neurona sea 0, lo que significa que la suma ponderada de las entradas de la letra B tiene que ser menor que el umbral, y entonces cada que presentemos una B lo que queremos es decrementar los pesos de las entradas activas para reforzar el que la suma ponderada de las entradas sea menor que el valor del umbral, y así la salida de la neurona sea 0.

Lo cual significa que para que la neurona aprenda, queremos incrementar el valor de los pesos de las entradas activas cuando queramos una salida 1 y queremos decrementar los pesos de las entradas activas cuando queremos que la salida sea 0, podemos conseguir lo anterior, si sumamos el valor de las entradas a los pesos cuando queramos que la salida sea 1 y restando los valores de entradas a los pesos cuando queramos que la salida sea 0, lo anterior define nuestra regla de entrenamiento o aprendizaje. Es importante notar

que solamente se afectan los pesos de las entradas activas (1), que son los que contribuyen a que la suma ponderada sobrepase o no el umbral, con esas entradas, es sensible a que las entradas que están inactivas no contribuyan en la suma ponderada por que son 0, y entonces el cambio en los pesos no afecta en la suma ponderada para estas entradas en particular, entonces no hay por que cambiar los pesos a las entradas que son inactivas (0).

La regla de aprendizaje anterior se llama el aprendizaje de Hebb [8], y se basa en reforzar solamente las conexiones activas, y podemos hacer esto por que conocemos el objetivo para una entrada en particular cual es la salida que le corresponde activa o inactiva, entonces el entrenamiento es guiado conociendo el objetivo al que queremos llegar, esto es conocido como aprendizaje o entrenamiento supervisado.

Hemos desarrollado estas ideas desde el punto de vista del modelo, y ha derivado en una regla de aprendizaje que no es diferente que la postulada para sistemas biológicos [2], este es el método dominante usado todavía en estos tiempos en los modelos de aprendizaje.

El algoritmo de aprendizaje del perceptrón lo podemos escribir de la siguiente forma:

1. Poner valores iniciales a los pesos y el umbral, definir $w_i(t)$, ($0 \leq i \leq n$), esto es el peso i en el tiempo t y θ es el valor del umbral correspondiente a la salida de la neurona, haciendo $w_0 = -\theta$ y a_0 siempre es 1. Poniendo los $w_i(0)$ pequeños valores aleatorios y así iniciamos todos los pesos y el umbral.
2. Presentar las entradas y la salida deseada.
Presentar las entradas $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ y la salida deseada $d(t)$.

3. Calcular la salida

$$y(t) = f_E \left[\sum_{i=0}^n w_i(t) a_i(t) \right]$$

4. Modificar los pesos

$$\text{Si es correcta la salida} \quad w_i(t+1) = w_i(t)$$

Si la salida es 0 y debería ser 1 $w_i(t + 1) = w_i(t) + a_i(t)$

Si la salida es 1 y debería ser 0 $w_i(t + 1) = w_i(t) - a_i(t)$

Debemos notar que los pesos no son modificados si la salida es correcta y los pesos que no contribuyeron a la suma ponderada no son modificados, puesto que se les está sumando o restando algo que debió de ser 0.

Este es el algoritmo básico de aprendizaje del perceptrón, aunque existen algunas modificaciones al algoritmo, la primera es poner un factor multiplicativo menor que 1 dentro del punto número 4, esto tiene el efecto de bajar lentamente el cambio de los pesos, y hace que el modelo dé pequeños cambios en busca de la solución, esta alteración del algoritmo cambia el paso de modificación de pesos y queda de la siguiente manera.

4. Modificación de los pesos (versión modificada)

Si es correcta la salida $w_i(t + 1) = w_i(t)$

Si la salida es 0 y debería ser 1 $w_i(t + 1) = w_i(t) + \eta a_i(t)$

Si la salida es 1 y debería ser 0 $w_i(t + 1) = w_i(t) - \eta a_i(t)$

Donde $0 \leq \eta \leq 1$, un término positivo que controla el tamaño de la modificación al peso.

Otra modificación al algoritmo del perceptrón es la propuesta por Widrow y Hoff [21], esta modificación está basada en la diferencia entre el valor de la salida deseada y el valor de la salida, cuando la diferencia es grande la modificación de los pesos es grande y cuando la salida deseada y la salida están cercanas, la modificación de los pesos debe ser pequeña, a la diferencia de la salida deseada con la salida le llaman el error, ahora el ajuste de los pesos es llevado a cabo por el error, esto significa que en el proceso de aprendizaje, ya no se utiliza la función escalón para que nos de la salida 1 o 0. El término error lo denotaremos como Δ y lo podemos escribir así:

$$\Delta = d(t) - y(t)$$

Donde $d(t)$ es la salida deseada del perceptrón y $y(t)$ es la salida del perceptrón, observemos que si la salida deseada es 1 y la salida es 0 entonces

$\Delta = +1$ y entonces los pesos son incrementados, e inversamente, si la salida deseada es 0 y la salida es 1 entonces $\Delta = -1$ y entonces los pesos serán decrementados, y por último notemos que si el perceptrón tiene la misma salida deseada que la salida entonces los pesos no sufren ningún cambio, debido a que $d(t) - y(t) = 0$.

El algoritmo es el mismo excepto por el paso 4.

4. Modificación de los pesos (versión Widrow-Hoff o Regla Delta)

$$\Delta = d(t) - y(t)$$

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \eta \Delta a_i(t)$$

$$d(t) = \begin{cases} +1 & \text{si la entrada es una A} \\ 0 & \text{si la entrada es una B} \end{cases}$$

Donde $0 \leq \eta \leq 1$, es un factor multiplicativo positivo que controla el tamaño de la adaptación, *i.e.* que tan grande o que tan pequeño va a ser la modificación del peso.

2.2.3. Limitaciones del perceptrón

Un ejemplo de las limitaciones del perceptrón, que es muy simple y sencillo, es encontrar una línea divisoria en el espacio de los patrones, el ejemplo es el operador lógico OR-exclusivo, este operador lógico es binario, y el operador lógico sólo admite los valores verdadero (1) o falso (0), y la respuesta del operador lógico sólo son los valores verdadera (1) o falsa (0), como se puede ver en el cuadro 2.1.

p	q	OR
0	0	0
0	1	1
1	0	1
1	1	0

Cuadro 2.1: Operador Lógico OR-exclusivo

De lo anterior podemos dar un modelo de un perceptrón, para tratar de clasificar la información, primero las entradas sólo serían dos, una que correspondería a la letra proposicional p y la otra la que corresponde a q , y como vimos las entradas solamente van a ser del tipo 1 (verdadero) o 0 (falso), y la salida también solo será 1 o 0, entonces podemos pensar al vector de entrada como un vector en \mathbb{R}^2 , en el espacio de dos dimensiones, entonces:

$$\{ \mathbf{X}_1 = (0, 0), \quad \mathbf{X}_2 = (0, 1), \quad \mathbf{X}_3 = (1, 0), \quad \mathbf{X}_4 = (1, 1) \}$$

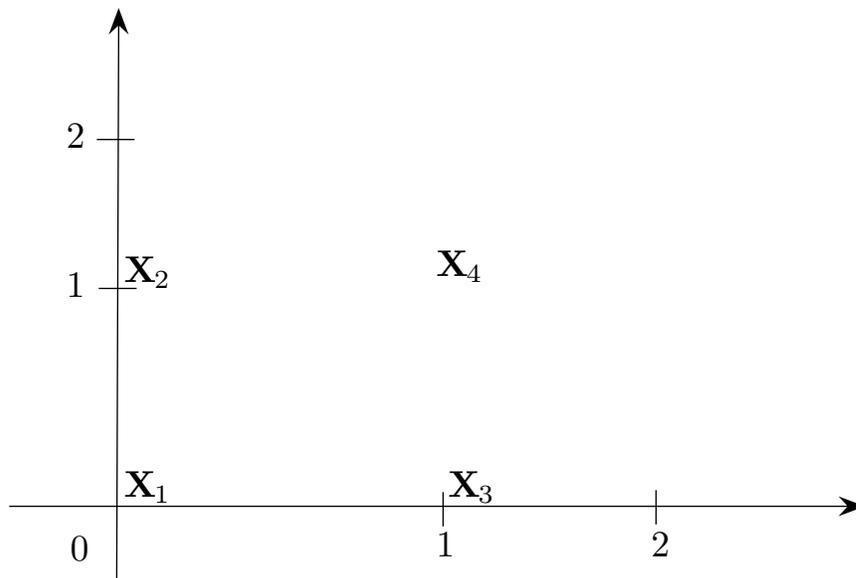


Figura 2.6: Espacio de dos dimensiones con las dos clases representadas, las cuales no son linealmente separables.

El perceptrón tendría que encontrar un vector en \mathbb{R}^2 que parta el espacio en dos clases, la clase de las entradas en las que queremos que la salida sea 1 que en este caso serían $C_1 = \{\mathbf{X}_2, \mathbf{X}_3\}$, y la otra clase sería las entradas en las que queremos que la salida sea 0 que son $C_2 = \{\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_4\}$, pero el perceptrón nunca va a encontrar el vector de pesos adecuado, por que la solución a este

problema no existe, lo que es lo mismo, no existe una recta (vector), que en el espacio de dos dimensiones separe a C_1 y C_2 , por lo tanto el perceptrón no puede clasificar correctamente el problema anterior, pero esto no contradice de ninguna manera la demostración de que el perceptrón aprende en un número finito de pasos, por que la demostración se basa fuertemente en que el vector que quiere encontrar el modelo existe, y en este ejemplo no existe el vector que queremos encontrar, el problema del OR-exclusivo lo plantean Marvin Lee Minsky y Seymour Papert en su libro *Perceptrons* del año 1969.

De cierta manera se puede pensar que el encontrar solución a este problema es como se da paso a las redes de neuronas o al perceptrón multicapa, con el cual si existe solución al problema del OR-exclusivo [2].

En esta sección, se ha visto todo lo que necesitamos del perceptrón, que en sí es el modelo matemático de la neurona, primero se ha planteado en una forma general, después se ha definido formalmente, se ha visto también el algoritmo de aprendizaje del perceptrón, y también se han visto sus limitaciones, hasta aquí dejaremos el análisis del perceptrón, lo que sigue es ver el perceptrón multicapa o redes de neuronas.

2.3. Redes de neuronas

Las redes de neuronas podemos estudiarlas como un conjunto de neuronas interconectadas entre sí, la salida de unas neuronas es la entrada de otras neuronas, de esta forma básica es como se diseñan las redes de neuronas.

Existen varios tipos de redes de neuronas, uno puede ser el perceptrón multicapa, que para facilitar la comprensión del modelo pensaremos que tiene tres capas de neuronas, una capa de entrada, una de salida, y una entre las dos que se le llama capa oculta, la cual no está conectada directamente con la entrada o la salida de la red de neuronas, cada capa de neurona tiene un determinado número de neuronas, las neuronas son perceptrones como los de la sección 2.2.1 en la página 8. Observe la figura 2.7.

Otro tipo de redes de neuronas son las de Hopfield, las cuales analizaremos mas adelante, y existen otras más que no trataremos en nuestro estudio.

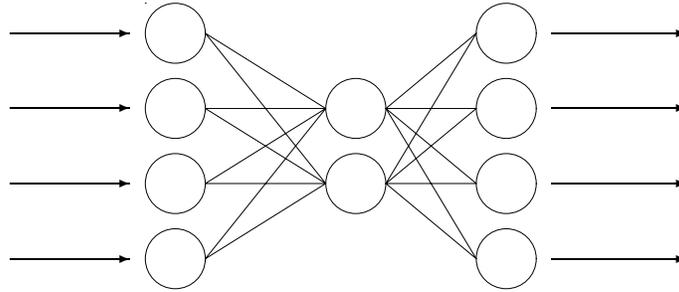


Figura 2.7: Figura del perceptrón multicapa.

En esta sección veremos las modificaciones necesarias que se tienen que hacer al perceptrón para resolver problemas más complejos.

El problema a resolver es el limitante de sólo poder clasificar linealmente, *i.e.* que las clases de los patrones sean linealmente separables, una posibilidad es utilizar más de un perceptrón, que cada perceptrón identifique una pequeña parte de la entrada que sea linealmente separable, y las salidas de estos se combinen en otro perceptrón, el cual producirá una salida final, indicando a qué clase pertenece la entrada.

Si vemos que este arreglo de perceptrones en capas no es capaz de aprender de igual forma que la neurona, cada neurona en la estructura todavía hace la suma ponderada de las entradas, tiene su umbral y su salida es 1 o 0, para el perceptrón de la primera capa, las entradas provienen de la entrada de la red, mientras que las entradas de la segunda capa, vienen de las salidas de la primera capa, lo que significa que los perceptrones en la segunda capa no saben cuáles de las entradas eran 1 o eran 0, siendo que el aprendizaje refuerza las conexiones entre entradas activas y unidades activas, es imposible reforzar la parte correcta de la red, siendo que las entradas de la red están enmascaradas por las salidas de los perceptrones de la capa oculta, los dos estados de la neurona activa o inactiva, no nos proporcionan la información necesaria para saber qué tan cerca o qué tan lejos estamos de la salida

correcta, para así saber en qué escala se tienen que ajustar los pesos y entonces no se puede hacer un ajuste razonable a los pesos. En otras palabras la función del umbral (sección 2.2.1) quita información necesaria para saber si la red está aprendiendo exitosamente, esto es, que la red no es capaz de decidir qué pesos son los que tiene que reforzar y qué pesos no, y entonces es incapaz de hacer los cambios que le aseguren un mejor funcionamiento la siguiente vez.

La solución es no perder información de qué pesos se deben o no de reforzar, y como anteriormente se mencionó en la función escalón es donde se pierde la información, porque al aplicarle la función a la suma ponderada, esta solamente nos dice 1 o 0 y no nos dice que tan cerca o qué tan lejos está de alcanzar el valor del umbral. Entonces sí cambiamos la función escalón, por otra función que no sea lineal, que cambie poco a poco a activa o inactiva, que la función tenga en medio una región en donde cambie de activa a inactiva con una suave inclinación, a diferencia de la función escalón en donde el cambio es prácticamente en un punto y con esta nueva función buscamos un intervalo de puntos donde se lleve el cambio de activa a inactiva, para así poder determinar qué tan lejos o cerca estamos de lo que queremos, y así seremos capaces de determinar cuándo se deben reforzar o no los pesos relevantes, esto significa que la red tiene la capacidad de aprender como es requerido, la función puede ser una función sigmoide.

El valor de las salidas será casi 1, si la suma ponderada excede el valor del umbral por muy poco, o el valor de la suma ponderada excede pero es muy próximo al valor del umbral, y pasa lo inverso para cuando la salida es casi 0 es que el valor del umbral no fué excedido por muy poco, o que el valor de la suma ponderada no excedió el valor del umbral pero son muy próximos ambos valores, aunque en el caso en que coincidan, el valor de la suma ponderada y el valor del umbral, la salida de la neurona tendrá un valor en algún punto entre los dos extremos, por ejemplo si las salidas son 1 y 0, la salida puede ser $\frac{1}{2}$, el cual se encuentra entre 0 y 1, esto significa que la salida de la neurona puede ser relacionada con las entradas de la misma, de una forma más informativa.

Notemos que hemos alterado nuestro modelo para tratar de resolver una dificultad, viendo que la dificultad era la función escalón, ya que hacia que tuviéramos un umbral duro, que sólo fueran 1 o 0 que enmascara las entradas

de las salida, y entonces cambiamos el modelo para que este pueda ser resuelto, los cambios hechos en el modelo mantienen la esencia del modelo anterior, cada neurona calcula su suma ponderada y su umbral también, aunque las entradas ahora ya no son tan simples como antes 1 y 0, ahora las entradas se encuentran en un rango, aunque la función del umbral que estamos usando aproxima a la función de escalón en muchas formas, en la que más se asemeja es en los extremos del rango de la función sigmoide, en donde toma los valores 1 y 0, que son los valores de la función escalón, la solución que hemos adoptado para nuestro problema es muy apegada, al modelo biológico y estaría mal decir que las redes neuronales reales trabajan de esta manera, nosotros estamos en busca de una construcción de un modelo interesante de neuronas, y no una pequeña versión del cerebro real.

El nuevo modelo tiene tres capas, una de entrada, una de salida, y una intermedia, la cual no está conectada directamente con la salida o las entradas de la red de neuronas, y es llamada la capa oculta. Cada unidad en la capa oculta y en la capa de salida es un perceptrón, con la diferencia de que la función del umbral es una función sigmoide y no la función escalón como antes, las unidades de la capa oculta sirven para distribuir los valores que ellas reciben hacia la siguiente capa y no se lleva a cabo como tal la suma ponderada ni la función del umbral, por que hemos modificado el perceptrón de una sola capa, cambiando la función escalón por la función sigmoide, y al agregarle la capa oculta, tenemos que modificar la regla de aprendizaje también, ahora tenemos una red capaz de reconocer cosas más complicadas.

La nueva regla de aprendizaje para el nuevo modelo del perceptrón multicapa se llama la regla delta generalizada o la regla de retropropagación, la operación de la red es similar a la operación del perceptrón de una sola capa, en el cual mostramos un patrón y calcula su respuesta, la comparación de la salida con la salida esperada es capaz de darnos la información necesaria para alterar los pesos y así conseguir una mejor respuesta la siguiente vez, la regla provee el método para ajustar los pesos en la red, y como hemos visto anteriormente la regla de aprendizaje del perceptrón no sirve para un perceptrón multicapa, aunque el uso de la función sigmoide significa que es posible obtener la suficiente información de las salidas para las unidades en las capas cercanas, entonces estas unidades van a tener su ajuste en los pesos y así la red tendrá un mejor desempeño la siguiente vez.

La regla de aprendizaje es un poco más compleja que la regla anterior, aunque podremos entenderla mejor si analizamos como se comporta la red cuando se le muestra un patrón de entrada si esta red no está entrenada, esta producirá una salida aleatoria, tenemos que definir una función de error para que represente la diferencia entre la salida ocurrida y la salida correcta que deseamos que la red produzca, como tenemos que conocer la salida correcta, entonces a este tipo de aprendizaje se le conoce como *aprendizaje supervisado*. Para que aprenda exitosamente queremos hacer que las salidas se aproximen a la deseada, para continuar reduciendo el valor de la función de error, esto es alcanzado al reducir los pesos en las conexiones entre las unidades, y la función delta generalizada hace esto calculando el valor de la función de error para una entrada en particular, y la función de retropropagación toma el error de una capa para la capa anterior, cada unidad de la red tiene su ajuste de pesos entonces se reduce el valor de la función de error, para las unidades de la capa de salida su salida y la salida deseada son conocidas entonces el ajuste de los pesos es relativamente simple. Pero para las unidades en la capa intermedia el ajuste de los pesos no es tan obvio, las unidades que están en la capa intermedia que están conectadas con las unidades de la capa de salida con un gran error el ajuste de sus pesos debe de ser grande y mientras que las que no tuvieron error el ajuste de sus pesos debe de ser pequeño, desde el punto de vista matemático se ve que los pesos de un nodo en particular deben ser ajustados en una proporción directa al error de las unidades con las cuales estas están conectadas, en la retropropagación estos errores a través de la red permiten que los pesos entre todas las capas sean correctamente ajustados, de esta forma la función del error es reducida y la red de neuronas aprende.

La notación usada en la regla de aprendizaje desde un punto de vista más formal, será la siguiente:

E_p es la función del error para un patrón p , t_{pj} representa el objetivo de la salida para el patrón p en el nodo j , mientras que o_{pj} representa la salida en ese nodo, w_{ij} es el peso del nodo i al nodo j .

Definiremos la función de error E_p , proporcional al cuadrado de la salida y la salida deseada, para todos los patrones que tengan que ser aprendidos.

$$E_p = \frac{1}{2} \sum (t_{pj} - o_{pj})^2 \quad (2.1)$$

El término constante $\frac{1}{2}$ facilita las operaciones algebraicas, y trae esta específica función de error dentro de un límite con otras similares características. La activación de cada unidad j , para el patrón p , puede escribirse como

$$red_{pj} = \sum_i w_{ij} o_{pi} \quad (2.2)$$

i.e. simplemente la suma ponderada como en el perceptrón. La salida de cada unidad j es la evaluación de función del umbral evaluada en la suma ponderada. En el perceptrón era la función escalón, pero en el perceptrón multicapa es usada la función sigmoide, aunque puede ser usada cualquier función continua diferenciable y monótona.

$$o_{pj} = f_j(red_{pj}) \quad (2.3)$$

Podemos escribir

$$\frac{\partial E_p}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial E_p}{\partial red_{pj}} \frac{\partial red_{pj}}{\partial w_{ij}} \quad (2.4)$$

Usando la regla de la cadena [2]. Nos fijamos en el segundo término en (2.4), y substituyendo en (2.2)

$$\begin{aligned} \frac{\partial red_{pj}}{\partial w_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial w_{ij}} \sum_k w_{kj} o_{pk} \\ &= \sum_k \frac{\partial w_{jk}}{\partial w_{ij}} o_{pk} \\ &= o_{pi} \end{aligned} \quad (2.5)$$

siendo $\frac{\partial w_{kj}}{\partial w_{ij}} = 0$, excepto cuando $k = i$ entonces es igual a 1.

Podemos definir el cambio en el error como una función de cambio en las entradas de la red a una unidad como

$$-\frac{\partial E_p}{\partial red_{pj}} = \delta_{pj} \quad (2.6)$$

Entonces a (2.4) lo podemos ver como

$$-\frac{\partial E_p}{\partial w_{ij}} = \delta_{pj} o_{pi} \quad (2.7)$$

Decrementando el valor de E_p , lo cual significa hacer los cambios proporcionales en los pesos a $\delta_{pj} o_{pi}$, *i.e.*

$$\Delta_p w_{ij} = \eta \delta_{pj} o_{pi} \quad (2.8)$$

Ahora necesitamos saber que δ_{pj} es para cada una de las unidades, sabiendo esto, entonces podemos decrementar E . Usando (2.6) y la regla de la cadena, podemos escribir

$$\delta_{pj} = -\frac{\partial E_p}{\partial red_{pj}} = -\frac{\partial E_p}{\partial o_{pj}} \frac{\partial o_{pj}}{\partial red_{pj}} \quad (2.9)$$

Considerando el segundo término, y la forma (2.3)

$$\frac{\partial o_{pj}}{\partial red_{pj}} = f' t_j(red_{pj}) \quad (2.10)$$

Considerando ahora el primer término en (2.9). de (2.1), podemos hacer la diferencial de E_p con respecto a o_{pj} , obteniendo

$$\frac{\partial E_p}{\partial o_{pj}} = -(t_{pj} - o_{pj}) \quad (2.11)$$

Así

$$\delta_{pj} = f'_j(\text{red}_{pj})(t_{pj} - o_{pj}) \quad (2.12)$$

Esto es usualmente para las unidades de salida, desde el objetivo y la salida son ambas posibles, pero no para las unidades en la capa intermedia, siendo que su objetivo no es conocido.

Entonces, si j no es una unidad de salida, podemos escribir por la regla de la cadena de nuevo, que

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_p}{\partial o_{pj}} &= \sum_k \frac{\partial E_p}{\partial \text{red}_{pk}} \frac{\partial \text{red}_{pk}}{\partial o_{pj}} \\ &= \sum_k \frac{\partial E_p}{\partial \text{red}_{pk}} \frac{\partial}{\partial o_{pj}} \sum_i w_{ik} o_{pi} \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$= - \sum_k \delta_{pk} w_{jk} \quad (2.14)$$

Usando (2.2) y (2.6), y notando que la suma siendo la parcial no cero para solo un valor, solo como en (2.5). Sustituyendo (2.14) en (2.9), nos queda finalmente:

$$\delta_{pj} = f'_j(\text{red}_{pj}) \sum_k \delta_{pk} w_{jk} \quad (2.15)$$

La ecuación representa el cambio en la función del error, con respecto a los pesos de la red. Esto nos provee de un método para cambiar la función del error como para estar seguros de reducirla. La función es proporcional al error δ_{pk} en las subsecuentes unidades, entonces el error tiene que ser calculado primero en las unidades de salida (dado por (2.12)) y entonces pasan hacia atrás a través de la red a las unidades cercanas permitiéndoles a esas unidades alterar sus pesos de conexión. Pasar el valor del error hacia atrás es lo que le da a este método el nombre de retropropagación. Las ecuaciones (2.12) y (2.15) juntas definen como podemos entrenar nuestra red neuronal multicapa.

Una ventaja de usar la función sigmoide como la función no lineal del umbral es que esta es uniformemente continua, suave y como la función escalón, y entonces debe de mostrar un comportamiento similar. La función sigmoide está definida como

$$f(\text{red}) = 1/(1 + e^{-k \text{ red}})$$

y tiene el siguiente rango $0 < f(\text{red}) < 1$. k es una constante positiva que controla el que tanto se extiende la función, valores grandes de k comprime la función, esto también actúa como un controlador automático de ganancia.

Una mayor razón para su uso es que esta tiene una derivada simple y esto hace su implementación en el algoritmo de retropropagación mucho más fácil, entonces la salida de una unidad o_{pj} está dada por

$$o_{pj} = f(\text{red}) = 1/(1 + e^{-k \text{ red}})$$

La derivada con respecto a esa unidad $f'(\text{red})$, está dada por y la derivada es una función simple para las salidas.

$$\begin{aligned} f'(\text{red}) &= ke^{-k \text{ red}}/(1 + e^{-k \text{ red}})^2 \\ &= k f(\text{red})(1 - f(\text{red})) \\ &= k o_{pj}(1 - o_{pj}) \end{aligned}$$

Capítulo 3

Modelo de Hopfield

3.1. El modelo de Hopfield

Una de las mayores contribuciones en el área de las redes neuronales fue hecha en los años ochenta del siglo pasado por John Hopfield, quien estudio una red auto asociativa que tiene algunas características similares a las redes del perceptrón multicapa, que vimos en una sección anterior (2.3), pero también algunas importantes diferencias.

Propiedades computacionales para uso de organismos biológicos o para la construcción de computadoras pueden surgir como las propiedades colectivas de sistemas como pueden ser las redes neuronales, teniendo un gran número de componentes simples que son equivalentes (neuronas), el significado de que emerge el comportamiento de una memoria con contenido direccionable es descrito por un apropiado flujo de las fases del espacio del estado de un sistema, por ejemplo, las redes neuronales de Hopfield, un modelo del cual un sistema está dado, basado sobre aspectos de neurobiología pero rápidamente adaptado a circuitos integrados, las propiedades colectivas de este modelo producen una memoria con un contenido direccionable, el algoritmo para la evolución del tiempo del estado del sistema está basado en un procesamiento paralelo asíncrono, propiedades adicionales que emergen colectivamente incluyen algunas capacidades para generalizar, reconocer, categorizar, corrección de error, las propiedades colectivas son poco sensitivas a detalles del modelo o de fallas de dispositivos individuales (neuronas) [11].

Un modelo para una gran red de neuronas con un grado de respuesta o relación sigmoide entrada-salida, que la función de salida nos deje ver si estamos cerca de nuestro objetivo o no, este sistema determinista tiene propiedades colectivas en muy cercana correspondencia con el modelo estocástico basado sobre las neuronas de McCulloch-Pitts, la memoria de contenido direccionable y otras propiedades colectivas emergentes del modelo original también están en este modelo [11].

La contribución de Hopfield no fue simplemente la sugerencia de un modelo que conmuta entre dos valores, pero su extensivo análisis y estudio, el cual ha dejado su nombre asociado con este modelo de redes neuronales. Él desarrolló el uso de una función de energía asociada a la red y relacionó a la red con otros sistemas físicos. La red de neuronas de Hopfield consiste en un número de nodos¹, los cuales están cada uno conectados con todos los otros nodos, esto es una red totalmente conectada. Observe la figura 3.1.

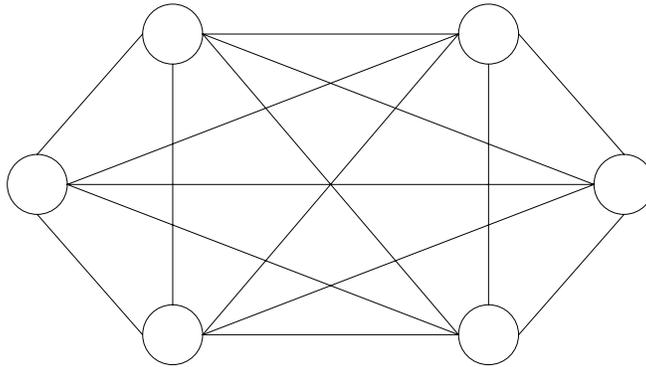


Figura 3.1: Red de neuronas de Hopfield.

Esta también es una red de pesos simétrica, siendo que los pesos de una conexión de un nodo a otro nodo son los mismos en ambas direcciones. Cada nodo tiene, como en el modelo del perceptrón, su umbral y su función de paso, y el nodo calcula su suma ponderada menos el valor del umbral, pasando

¹Léase neurona en lugar de nodos

eso a través de la función de paso para determinar su estado de la salida. La red toma sólo dos estados de entrada, que puede ser binaria $(0, 1)$ o bipolar $(-1, +1)$, aunque el bipolar hace que las matemáticas del modelo sean mas claras. Lo que realmente distingue a las redes de Hopfield de otros modelos como el perceptrón multicapa es la forma en la que el modelo de Hopfield produce una solución.

La mayor característica es que no existen entradas y salidas como tales, no son tan obvias como en los otros modelos, cada nodo es lo mismo como cualquier otro, esta es la característica principal de las redes de Hopfield y esta diferencia en su arquitectura significa que esta red opera de diferente manera. Las entradas para la red son aplicadas a todos los nodos a la vez, y consiste de un conjunto de valores de inicio que son, -1 o $+1$. La red trabaja sola, y procede cíclicamente a través de una sucesión de estados, hasta que converge a una solución estable, la cual ocurre cuando los valores de los nodos no tienen diferencias entre sí, la salida se toma como el valor de todos los nodos cuando ha sido alcanzando un estado estable .

Como cada nodo está conectado con todos los demás nodos entonces, el valor de un nodo que es activo esta afectando a los demás nodo, el estado inicial representa a algunos valores tratando de afectar a otros valores, esto es un estado inestable, siendo un valor tal vez tratando que los otros cambien a activos mientras que otro nodo tal vez este tratando de que cambien a inactivos, como la red se mueve a través de una sucesión de estados, está tratando de encontrar un compromiso entre todos los valores de la red, y el estado final representa el mejor compromiso solución que la red puede encontrar , como existen muchas entradas tratando de que un nodo cambie a activa como hay muchas que tratan de que este nodo cambie a inactiva, entonces esto permanece en un estado estable.

La operación de la red es radicalmente diferente que la operación de una red de perceptrones, en la cual, una entrada es presentada a la red y esta produce una salida la cual representa la solución, en la red de Hopfield esta primera salida es tomada como la nueva entrada, la cual produce una nueva salida y así continua, la solución ocurre cuando no existen cambios entre ciclos.

EL MODELO DE HOPFIELD

ALGORITMO DE LAS REDES DE HOPFIELD

1. Asignación de los pesos de entrada

$$w_{ij} = \begin{cases} \sum_{s=0}^{M-1} x_i^s x_j^s & i \neq j \\ 0 & i = j, 0 \leq i, j \leq M-1 \end{cases}$$

donde w_{ij} el peso de conexión entre el nodo i y el nodo j , y x_i^s es el elemento del patrón para la clase s , y es también $+1$ o -1 . Existen M patrones, de 0 a $M-1$, en total, el umbral de las unidades es cero.

2. Iniciar con un patrón no conocido

$$\mu_i(0) = x_i \quad \text{con} \quad 0 \leq i \leq N-1$$

donde $\mu_i(t)$ es la salida del nodo i al tiempo t .

3. Iterar hasta que converja

$$\mu_j(t+1) = f_h \left[\sum_{i=0}^{N-1} w_{ij} \mu_i(t) \right] \quad \text{con} \quad 0 \leq j \leq N-1$$

la función de f_h es la función de paso no lineal, que en este caso es la función escalón. Repetir la iteración hasta que las salidas de los nodos permanezcan sin cambio.

Los pesos entre las neuronas definen un conjunto, usando la ecuación que está en el algoritmo del patrón para todas las clases. Esta es la técnica del algoritmo, asocia cada patrón consigo mismo. El estado de reconocimiento ocurre cuando la salida de la red es forzada a coincidir con el patrón desconocido impuesto al tiempo cero. La red iterará libremente en un número discreto de pasos, hasta que encuentre un estado estable, *i.e.* cuando las salidas permanecen sin cambios, así la red converge a la solución. La auto asociación de patrones significa, que al presentar un patrón de entrada corrupto diera como resultado la reproducción perfecta del patrón como la salida de la red, para así actuar como un recuperador de patrones.

La operación de la red de Hopfield la podemos resumir así

- Iniciar la red
- Presentar a la red un patrón desconocido
- Iterar hasta que converja.

3.2. Teoría del potencial

Algunas funciones y campos de energía se definen en términos del gradiente de una función.

Definición 3.2.1 Gradiente

Consideremos el caso $f : U \subset \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$. Aquí $\mathbf{D}f(x)$ es una matriz de $1 \times n$:

$$\mathbf{D}f(x) = \left[\frac{\partial f}{\partial x_1} \cdots \frac{\partial f}{\partial x_n} \right]$$

Podemos formar el correspondiente vector $(\partial f/\partial x_1, \dots, \partial f/\partial x_n)$ llamado gradiente de f y denotado por $\text{grad}f$ o ∇f .

Dicho de forma muy general, se define el gradiente como la fórmula para obtener el plano tangente a una superficie de nivel.

Teorema 3.2.2 Si $\nabla f(x) \neq 0$. Entonces $\nabla f(x)$ apunta en la dirección a lo largo de la cual f crece más rápido.

En otras palabras, si queremos movernos en una dirección en la cual f va a crecer más rápidamente, debemos proceder en la dirección $\nabla f(x)$. En forma análoga, si queremos movernos en la dirección en la cual f decrece más rápido, habremos de proceder en la dirección $-\nabla f(x)$ [13].

Con el siguiente teorema se describe la relación entre el gradiente de una función f y su superficie de nivel. El gradiente apunta en la dirección en la que los valores de f cambian más rápidamente, mientras que una superficie

de nivel está en las direcciones en las que esos valores no cambian. Si f se comporta suficientemente bien, el gradiente y la superficie de nivel serán perpendiculares.

Teorema 3.2.3 *El Gradiente es normal a la superficie de nivel.*

Sea $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ una aplicación C^1 y sea (x_0, y_0, z_0) un punto sobre la superficie de nivel S definida por $f(x, y, z) = k$, para una constante k . Entonces $\nabla f(x_0, y_0, z_0)$ es normal a la superficie de nivel en el siguiente sentido: si v es el vector tangente en $t = 0$ de una trayectoria $c(t)$ en S con $c(0) = (x_0, y_0, z_0)$, entonces $(\nabla f) \cdot v = 0$.

Con frecuencia nos referimos a ∇f como campo vectorial gradiente. Notar que ∇f asigna un vector a cada punto en el dominio de f . Si pensamos en una función $f : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}$ la gráfica de ∇f es un subconjunto de \mathbb{R}^4 , con el conjunto de puntos de la forma $(x, \nabla f(x))$, entonces es más fácil representarlos como $\nabla f(P)$ ya que son vectores en el espacio con origen en el punto P .

El campo vectorial gradiente tiene un importante significado geométrico. Muestra la dirección en la cual f crece más rápido y la dirección que es ortogonal a las superficies de nivel (o curvas en el plano) de f . Es plausible que haga ambas cosas. Para ver esto, imaginemos una colina, sea h la función altura de esta colina entonces si trazamos curvas de nivel de h , serán simplemente los contornos de nivel de la colina. Una cosa será obvia para cualquiera que haya emprendido una caminata en ella, para llegar más rápido a la cima, se debería de caminar perpendicularmente a las curvas de nivel de la colina, esto es consistente con los teoremas 3.2.2 y 3.2.3, que aseguran que la dirección de crecimiento más rápido (el gradiente) es ortogonal a las curvas de nivel.

3.3. La función de energía

La red de neuronas de Hopfield se puede entender mejor en términos de su ubicación en el campo de energía, el campo de energía tiene depresiones o cuencas que representan patrones ya clasificados por la red de Hopfield ver figura 3.2. Un patrón desconocido para la red representa un punto particular del campo de energía y como la red itera su camino a la solución, el punto se

mueve a través del campo de energía en dirección de una de las depresiones, esta cuenca de atracción representa el estado estable de la red. La solución de la red ocurre cuando el punto se mueve dentro de las regiones bajas de la cuenca de atracción, de ahí que todos los puntos en una vecindad cercana estén hacia arriba en el campo de energía, y entonces este punto permanecerá donde está por que ya no hay puntos más abajo. Algo semejante a este comportamiento es cuando uno pone una canica en una bandeja que tenga valles, montañas y la canica se moverá hacia abajo en dirección de la cuenca mas cercana, permaneciendo en un estado estable el cual no se altera con el tiempo.

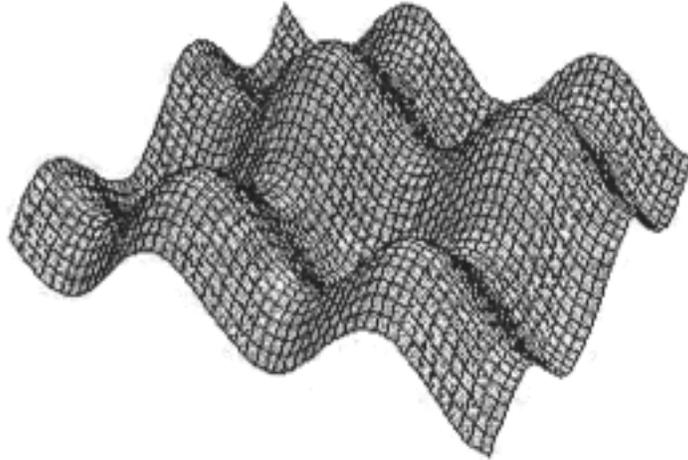


Figura 3.2: La función de energía de una red de Hopfield puede representarse como una gráfica tridimensional.

Podemos expresar con más detalle si lo vemos matemáticamente. La función de energía para el perceptrón era $E = \frac{1}{2} \sum (t_{pj} - o_i)^2$, pero esto requiere del conocimiento de las salidas de la red, y para la red de Hopfield es un paso para la búsqueda de la solución, para los pasos intermedios requeridos no son conocidas las salidas, y por lo tanto necesitamos algo mas adecuado a la arquitectura de nuestro modelo de las redes de Hopfield, aunque podemos conservar algunas de las características de la función de energía del perceptrón, la corrección debe ser grande para grandes errores y debe de ser

pequeña para errores pequeños. Los valores de los pesos de la red deben de afectar a la función de energía, así como al patrón presentado actualmente, entonces la función reflejará estas necesidades.

Esta es una función de energía para la red de neuronas de Hopfield

$$E = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} w_{ij} x_i x_j + \sum_i x_i T_i \quad (3.1)$$

Donde w_{ij} representa el valor del peso que está entre el nodo i y el nodo j de la red, y x_i representa la salida del nodo i . El valor del umbral del nodo i está representado por T_i . Como las salidas de la red en el tiempo t son las entradas de la red en el tiempo $t + 1$, y entonces las entradas y los pesos son representados explícitamente como se necesita. Los pesos en la red contienen la información del patrón, y entonces todos los patrones están contenidos en el campo de energía de la red.

Los nodos no están conectados directamente consigo mismos, por lo tanto, el valor de los pesos w_{ii} es cero, siendo las conexiones simétricas $w_{ij} = w_{ji}$.

Definida la función de error podemos ahora, ver que pasa con la clasificación y la reconstrucción de patrones, si hacemos que nuestros patrones ocupen los puntos bajos de nuestro campo de energía, entonces podemos desarrollar un gradiente descendente en nuestra función de energía en orden que al final sea ese punto mínimo en nuestro campo de energía, el cual representa nuestra solución.

3.4. Clasificación de patrones

Para clasificar los patrones tenemos que minimizar el valor de la función de energía para que ese patrón particular ocupe un punto mínimo en el campo de energía, aunque tenemos que dejar a los patrones en sus cuencas de atracción previamente clasificados, de tal forma que al clasificar nuevos patrones no se destruya la información de los ya clasificados, la matriz de los pesos contiene la información acerca de los patrones ya clasificados, entonces trataremos de encontrar una expresión para los valores de los pesos que produzcan un mínimo en la función de energía.

En términos de la función de energía, deseamos minimizar la siguiente ecuación

$$E = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} w_{ij} x_i x_j + \sum_i x_i T_i$$

Para un patrón en particular s que tiene un conjunto de elementos de entrada $(x_0, x_1, \dots, x_{n-1})$.

Queremos que cada término sea negativo, y entonces requerimos que $\sum_i x_i T_i$ sea negativo, esto puede ser conseguido si T_i es de signo contrario a x_i para un patrón en particular, aunque para diferentes patrones tendremos diferentes valores de x_i y entonces el término del umbral tal vez incrementará el valor de E .

Lo mejor que podemos hacer en este caso, es hacer el valor del umbral cero para que no decremente, pero tampoco incremente en ningún caso el valor de E para ninguno de los patrones.

Escribiremos x_i^s que significara el elemento i de la entrada del patrón s , la cual puede ser $+1$ o -1 . Ahora w_{ij} es el valor del peso entre los nodos i y j como antes y contiene la información del patrón de todos los patrones enseñados. Esto significa que podemos separar la matriz de pesos en dos partes, una de las cuales representa los efectos de todos los patrones, excepto el efecto producido por el patrón s , denotado por w'_{ij} y otra parte la cual es la contribución hecha por el patrón s mostrado como w^s_{ij} . Esto significa que podemos escribir la función de energía en dos partes

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} w_{ij} x_i x_j \\ &\quad -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} w^s_{ij} x_i^s x_j^s \\ &= E_{\text{todos excepto } s} + E_s \end{aligned} \tag{3.2}$$

donde tenemos separada la contribución hecha por la función de energía del patrón s . Esto puede ser pensando como ver la función de energía como una

señal más interferencia, donde la señal es la función de energía del patrón s y la interferencia es la función de energía de todos los demás patrones.

Guardar estos patrones corresponde a hacer la función de energía tan pequeña como se pueda. El primer término corresponde a la interferencia y no podemos hacer mucho para alterarlo, pero podemos reducir la contribución hecha por el segundo término (el término de la señal), en otras palabras para guardar el modelo s , deseamos minimizar la función de energía del patrón s y hacer la siguiente ecuación tan pequeña como sea posible

$$E_s = -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} w_{ij}^s x_i^s x_j^s \quad (3.3)$$

Esto corresponde a hacer

$$\sum_i \sum_{j \neq i} w_{ij}^s x_i^s x_j^s$$

tan grande como sea posible, debido al signo menos en la ecuación (3.3).

Ahora los elementos x_i son cualquiera $+1$ o -1 , aunque x_i^2 es siempre positivo, así si hacemos el término de la función de energía dependiente de $x_i^2 x_j^2$ este será siempre positivo y la suma será tan grande como sea posible, podemos hacer esto más simple por la siguiente ecuación

$$\sum_i \sum_{j \neq i} w_{ij}^s x_i x_j = \sum_i \sum_{j \neq i} x_i^2 x_j^2$$

y notando que todo lo que tenemos que hacer es el peso de las entradas de la siguiente manera

$$w_{ij}^s = x_i x_j$$

Esto significa que tenemos nuestro resultado, haciendo los valores de los pesos $w_{ij}^s = x_i x_j$ se minimiza la función de energía para el patrón s , sumamos esta ecuación sobre todos los patrones para obtener una expresión para el conjunto total de los pesos entre los nodos como

$$w_{ij} = \sum w_{ij}^s = \sum x_i^s x_j^s$$

Comparando esto con el paso 1 del algoritmo, vemos que son idénticos y ahora sabemos que el paso 1 del algoritmo en verdad guarda todos los patrones iniciales en la red.

Refiriéndose a la ecuación (3.3) Alterando w_{ij} cada momento alteraremos un poco el valor de $E_{\text{todos excepto } s}$, así agregando patrones se rompen los patrones previamente guardados para algún cierto número, pero esto es inevitable.

La red de neuronas de Hopfield no tiene ningún algoritmo de aprendizaje iterativo como tal, los patrones son simplemente guardados al minimizar su función de energía, la red no tiene unidades ocultas y así es imposible poner en código los datos.

3.5. Recuperación de patrones

Habiendo guardado nuestros patrones en la red de neuronas ahora necesitamos ser capaces de recuperarlos. Esto puede ser logrado si hacemos un gradiente en descenso sobre nuestra función de energía, así que necesitamos un método para hacer esto. Considerando la función de energía como en la ecuación (3.1), necesitamos calcular la contribución hecha por el valor de un nodo en particular a la función de energía y entonces podemos recorrer en torno a la red, reduciendo la contribución de cada nodo hasta que el valor de la función energía este al mínimo.

Podemos expresar la función de energía en dos partes, separando la contribución hecha por el nodo k -ésimo.

$$\begin{aligned}
 E &= -\frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \sum_{j \neq k} w_{ij} x_i x_j + \sum_{i \neq k} x_i T_i \\
 &\quad -\frac{1}{2} x_k \sum_j x_j w_{kj} - \frac{1}{2} x_k \sum_i x_i w_{ik} + x_k T_k
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

El cambio en la salida de la neurona k -ésima está dado por x_{k1} a x_{k2} , la diferencia en la energía es $\Delta E = E_2 - E_1$ causada por el cambio de estado $\Delta x_k = x_{k2} - x_{k1}$ se da al evaluar la ecuación (3.4) para x_{k1} y x_{k2} , después se restan, se pueden escribir así

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \left[\Delta x_k \sum_j x_j w_{kj} + \Delta x_k \sum_i x_i w_{ik} \right] + \Delta x_k T_k \quad (3.5)$$

Los primeros dos términos en la ecuación (3.4) no son alterados por K y así permanecen sin cambios. Puesto que la matriz de pesos w_{ij} es simétrica, podemos intercambiar los índices y simplificar la expresión a

$$\Delta E = -\Delta x_k \left[\sum_j x_j w_{kj} - T_k \right] \quad (3.6)$$

$\sum_j x_j w_{kj}$ es la suma ponderada de las entradas del nodo k -ésimo y T_k es el umbral de la unidad k -ésima. Ahora el umbral de cada nodo fue puesto en cero en la fase de almacenamiento, para asegurar que los patrones ocupan el mínimo de la función de energía. Recordando que la salida del nodo es cualquiera de los siguientes valores $+1$ o -1 , disminuir ΔE_k significa que el resultado es $+1$ si la salida es mayor que cero y -1 si la salida es menor que cero, ya que esto siempre servirá para reducir el valor de ΔE_k si comparamos esto con la función de actualización para los nodos en una red de neuronas de Hopfield dada por

$$\sum_{j \neq k} w_{ij} x_j \begin{cases} > 0 & x_i \rightarrow +1 \\ = 0 & \text{permanece en el estado anterior} \\ < 0 & x_i \rightarrow -1 \end{cases}$$

podemos ver que la función de actualización realiza esta operación y así implementa el gradiente en descenso en E . Esto nos permite recobrar nuestros patrones de la red recorriendo una sucesión de estados, cada uno de los cuales tiene un estado de baja energía como los estados previos, esta relación dentro de los estados de baja energía continua hasta que un estado estable de baja energía es alcanzado, cuando la red ha encontrado su camino dentro de un mínimo y así reproduce el patrón.

3.6. Ejemplo de recuperación de patrones

Procederemos a continuación a desarrollar un pequeño ejemplo muy sencillo. Para dejar más clara la idea de como es que se recuperan los patrones en el modelo de Hopfield. Los patrones que el modelo de Hopfield ya ha aprendido y queremos recuperar son un conjunto de números como se muestra en la figura (3.3). Podemos pensar que los números están formados por una cuadrícula de 3 columnas por 5 renglones y la forma de configurar los números en esta cuadrícula es el siguiente el cuadro x_{ij} puede tener dos colores blanco o negro y de esta manera configurarlos como se muestra en la figura (3.3), si x_{ij} es negro el valor de $x_{ij} = -1$ y cuando el cuadro x_{ij} es blanco entonces $x_{ij} = 1$, al formar los números de ésta manera tenemos números en blanco y negro como en la figura (3.3) y si nos fijamos en los valores binarios de x_{ij} tenemos de esta manera un vector binario asociado a cada número de la siguiente manera $\mathbf{X}_i = \{x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, \dots, x_{ij}, \dots, x_{53}\}$ donde $i \in \{1, 2, 3, 4, 5\}$ y $j \in \{1, 2, 3\}$ y como x_{ij} es blanco o negro entonces $x_{ij} \in \{1, -1\}$, por lo tanto los vectores \mathbf{X}_i si pueden ser entradas y salidas del modelo de Hopfield.

También podemos ver a \mathbf{X}_i como una matriz

$$\mathbf{X}_5 = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \\ x_{41} & x_{42} & x_{43} \\ x_{51} & x_{52} & x_{53} \end{pmatrix}$$

para simplificar las operaciones a la hora de trabajar con la matriz de pesos podemos renombrar a las entradas del vector \mathbf{X}_i queda de la siguiente manera

$$\mathbf{X}_i = \{x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, \dots, x_{ij}, \dots, x_{53}\} = \{y_1, y_2, y_3, \dots, y_n\}$$

de tal manera que $x_{11} = y_1$, $x_{12} = y_2$ y así sucesivamente $x_{53} = y_{15}$, en este caso el vector va a tener 15 entradas.

Por ejemplo el vector que representa al número 5 de la manera anterior sería la siguiente

$$\mathbf{X}_5 = \{-1, -1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, -1, 1, 1, -1, -1, -1, -1\}$$

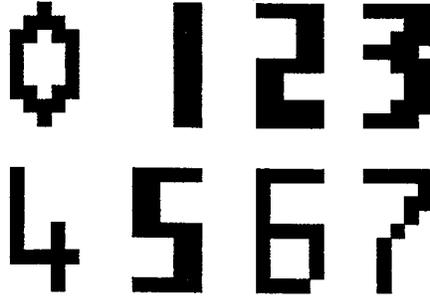


Figura 3.3: Conjunto de patrones que ha aprendido el modelo de Hopfield, figura tomada del libro [2].

y podemos ver también de esta forma al número 5 como matriz

$$\mathbf{X}_5 = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Ahora nos fijamos en la matriz de pesos del modelo de Hopfield, como recordaremos en el modelo de Hopfield los pesos de conexión son simétricos y bidireccionales $w_{ij} = w_{ji}$ y para este ejemplo definimos el peso $w_{ij} = y_i \cdot y_j$ como el producto de las entradas y_i y y_j esto nos da una matriz cuadrada y simétrica de 15 por 15, en la diagonal de la matriz de pesos es cero puesto que los elementos de la diagonal son de la forma $w_{ii} = 0$ según el algoritmo de Hopfield nos quedaría una matriz de la siguiente forma y la llamaremos \mathbf{W}_i donde la i denota cada patrón a aprender por el modelo de Hopfield.

$$\mathbf{W}_i = \begin{pmatrix} w_{11} & w_{12} & \cdots & w_{1n} \\ w_{21} & w_{22} & \cdots & w_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ w_{n1} & w_{n2} & \cdots & w_{nn} \end{pmatrix}$$

En este caso en particular $i = 5$ y $n = 15$, la matriz de pesos \mathbf{W}_5 estaría asociada al patrón 5, y algunos de sus pesos tienen el valor de $w_{11} = 0$, $w_{12} = y_1 \cdot y_2 = -1 \cdot -1 = 1$ y así tenemos que calcular las 225 entradas de la matriz menos 15 de la diagonal que sabemos que son cero, nos da 210 entre

2 por que la matriz es simétrica quedan por calcular 105 entradas mas.

La matriz de pesos \mathbf{W}_5 tiene ya la información del patrón 5, entonces podemos meter un patrón distorsionado como se muestra en la figura (3.4), hacer que el modelo de Hopfield itere hasta que la salida del modelo sea el vector del patrón 5, es decir un estado estable, que previamente aprendió el modelo de Hopfield.

La forma en que trabaja este modelo de Hopfield con el que estamos haciendo el ejemplo, es la siguiente:

Se introduce un vector corrupto del patrón que queremos recuperar, en este caso sería un vector corrupto del vector \mathbf{X}_5 que representa al número 5, este vector se multiplica por la matriz de pesos, pero de acuerdo a las leyes de la multiplicación de las matrices², lo que hacemos es una multiplicación de una matriz de 15x15 y un vector que lo podemos ver como una matriz de 15x1 y obtendríamos una matriz de 15x1 que es el vector de salida del modelo, a este vector le tenemos que aplicar algo parecido a la función escalón, a cada entrada del vector le aplicamos la siguiente función:

$$f_E(x_i) = \begin{cases} 1 & \text{si } x > 0 \\ -1 & \text{si } x \leq 0 \end{cases}$$

donde x_i es una entrada del vector resultante de la iteración sobre el vector corrupto, esta función se la aplicamos a todas las entradas. Y entonces el vector que obtenemos es binario y se lo podemos introducir al modelo y seguir iterando así hasta que ya no exista diferencia entre el vector corrupto (que lo hemos ido iterando) y el vector que corresponde al patrón.

El traslape entre patrones almacenados como hemos mencionado anteriormente, causa efectos de interferencia y ocurren errores en la recuperación de patrones, si mas de el $0.15N$ patrones han sido almacenados, donde N es el numero de nodos de la red. Esto nos dice que para una red con 100 nodos, los errores podrán ocurrir si el numero de patrones almacenados excede 15 patrones. Estos estados de error son salidas estables de la red que

²Si A es una matriz de $m \times n$ y B es una matriz de $n \times p$, el producto de A y B es la matriz C de $m \times p$ tal que cada entrada de la matriz C es $c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik}b_{kj}$, para $i \in \{1, 2, 3, \dots, m\}$ y $j \in \{1, 2, 3, \dots, p\}$

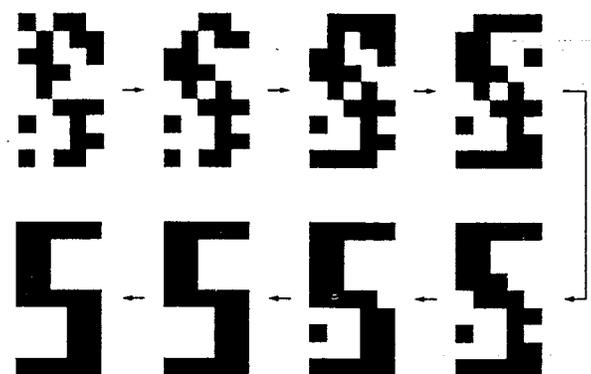


Figura 3.4: Se pone como entrada al modelo de Hopfield un patrón corrupto y la secuencia muestra como la red itera sucesivamente a través de los estados, hasta que ésta recobra el resultado estable, figura tomada del libro [2].

no corresponden con ningún patrón aprendido por la red, en términos de la superficie de energía, lo que sucede es que existe suficiente interferencia entre los mínimos locales de los patrones ya aprendidos por la red y los que no ha aprendido, pero que la red piensa que son soluciones perfectamente aceptables, tales estados son conocidos como estados *metaestables*.

Capítulo 4

Mecánica estadística

4.1. Principios generales de la mecánica estadística

Las afirmaciones básicas de la mecánica estadística pueden ser en los términos más simples introducidos de la siguiente manera, permite el estado microscópico de algunos sistemas macroscópicos tener muchos grados de libertad, descritos por la configuración de algunas variables y el número de variables es N $\{s_i\}$, donde $i \in \{1, 2, \dots, N\}$, la cantidad básica que caracteriza el estado microscópico es llamada la energía H y esta está definida como alguna función que involucra a todas las variables microscópicas $\{s_i\}$: $H = H(s_1, s_2, \dots, s_N) \equiv H[s]$.

La conducta dinámica microscópica del sistema está definida por algunas ecuaciones diferenciales dinámicas, de tal forma que la energía tiende al mínimo, por otra parte es supuesto que ningún sistema notable puede ser perfectamente aislado de el mundo que lo rodea y los efectos de la interacción con el medio circundante se cree que produce solamente el llamado ruido térmico en las ecuaciones dinámicas exactas. El ruido térmico actúa como algunas fluctuaciones aleatorias y no correlacionadas que produce la aleatoriedad y la mezcla de las trayectorias dinámicas del sistema.

Donde $A[s]$ es alguna cantidad notable, las cantidades que son de interés en la mecánica estadística son los valores promedios de los valores notables, en otras palabras en lugar de estudiar el cambio exacto en términos del tiempo

$A[s(t)]$, se introduce la cantidad promedio

$$\langle A \rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' A[s(t')] \quad (4.1)$$

la cual puede ser formalmente obtenida después de la observación durante un periodo de tiempo finito.

$$\langle A \rangle = \int A[s] P(s_1, s_2, \dots, s_N) ds_1 ds_2 \dots ds_N \quad (4.2)$$

Aquí $P[s]$ es la función de distribución de probabilidad de los estados microscópicos del sistema, en otras palabras, debido a la mezcla de la trayectoria de las dinámicas después de la observación de un tiempo infinitamente largo, en lugar de resolver la dinámica exacta el sistema puede ser descrito estadísticamente en términos de las probabilidades de sus estados microscópicos dados por la función $P[s]$. La función de distribución de probabilidad cualquiera que ésta sea debe ser normalizada:

$$\langle A \rangle = \int P(s_1, s_2, \dots, s_N) ds_1 ds_2 \dots ds_N = 1 \quad (4.3)$$

La cantidad fundamental de la mecánica estadística que caracteriza la función de distribución de probabilidad por sí misma es llamada la entropía, está definida como el promedio del logaritmo de la función de distribución:

$$S = -\langle \log(P[s]) \rangle \equiv - \int P[s] \log(P[s]) ds_1 ds_2 \dots ds_N \quad (4.4)$$

Por la anterior definición debido a la normalización (4.3), la entropía es a lo menos no negativa, en general los valores de la entropía podrían decirnos a lo que se extiende la función de distribución de probabilidad del sistema es ordenado.

Consideremos un ejemplo ilustrativo, los estados (discretos) microscópicos del sistema son etiquetados por los índices α y asumimos que la distribución de probabilidad es tal que sólo L (entre todos) los estados son distintos de cero y probabilidad igual, entonces debido a la normalización (4.3) la probabilidad de cualquiera de estos L estados debe de ser igual a $1/L$, de acuerdo a la definición de entropía se obtiene $S = -\sum_{\alpha}^L P_{\alpha} \log P_{\alpha} = \log L$ por consiguiente, la mas extensa distribución es (la L más grande) el más grande valor

de la entropía, por otro lado el más concentrado en el espacio de todos los estados es la función de distribución es el valor más pequeño de la entropía, es en el caso extremo, cuando existe solo un estado microscópico que puede ser ocupado por el sistema la entropía es igual a cero, en general el valor de $\exp(S)$, podría pensarse que es el número promedio de los estados ocupados por el sistema con una probabilidad no pequeña.

Consideremos ahora cual debe de ser la forma de la función de distribución de probabilidad en general. De acuerdo a las hipótesis básicas, el valor promedio de la energía del sistema es:

$$E \equiv \langle H \rangle = \sum_{\alpha} P_{\alpha} H_{\alpha} \quad (4.5)$$

(por simplicidad se supone que los estados del sistema son discretos). La interacción del sistema con el mundo que lo rodea produce los siguientes efectos fundamentales. Primero el valor promedio de su energía en el equilibrio térmico es conservado. Segundo por alguna razón natural es construido de tal manera que cualquier estructura interna del sistema es el valor de la entropía en el estado de equilibrio es obtenido a ser el máximo posible (Limitado por la condición de que el promedio de la energía es constante). En un sentido esto es natural, el ruido aleatorio hace al sistema ser tan desordenado como sea posible. Considere ahora cual debe de ser la función de distribución de probabilidad que habría de maximizar la entropía, para tener en cuenta las dos limitaciones: La conservación del promedio de la energía en la ecuación (4.5) y la normalización de $\sum_{\alpha} P_{\alpha} = 1$, se puede usar el método de los multiplicadores de Lagrange, por lo tanto, la siguiente expresión debe de ser maximizada con respecto a todas las posibles distribuciones de P_{α} :

$$S_{\beta, \gamma}[P] = - \sum_{\alpha} P_{\alpha} \log(P_{\alpha}) - \beta (\sum_{\alpha} P_{\alpha} H_{\alpha} - E) - \gamma (\sum_{\alpha} P_{\alpha} - 1) \quad (4.6)$$

donde β y γ son los multiplicadores de Lagrange [4]. La variación con respecto a P_{α} nos da:

$$P_{\alpha} = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H_{\alpha}) \quad (4.7)$$

donde

$$Z = \sum_{\alpha} H_{\alpha} \exp(-\beta H_{\alpha}) = \exp(\gamma + 1) \quad (4.8)$$

es llamada la función de partición y el parámetro β es llamada la temperatura inversa, es definida por la condición:

$$\frac{1}{Z} \sum_{\alpha} H_{\alpha} \exp(-\beta H_{\alpha}) = E \quad (4.9)$$

en la practica, aunque ésta sea la temperatura que es usualmente tomada como un parámetro independiente, mientras el promedio de la energía es obtenida como la función de la temperatura por la ecuación (4.9).

La otra cantidad fundamental de la mecánica estadística es la energía libre definida:

$$F = E - TS \quad (4.10)$$

donde $T = 1/\beta$ es la temperatura. Usando la ecuación (4.7) para la distribución de probabilidad se puede conducir fácilmente las siguientes relaciones básicas entre la energía libre, la función de partición, la entropía y el promedio de la energía:

$$F = -T \log(Z) \quad (4.11)$$

$$S = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta} \quad (4.12)$$

$$E = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log(Z) = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} \quad (4.13)$$

Cabe resaltar que de acuerdo con la definición (4.10), el principio del máximo de la entropía es equivalente al mínimo de la energía libre. Se puede verificar fácilmente que tomando la energía libre (en lugar de la entropía) como la cantidad fundamental que debe de ser mínima con respecto a todas las posibles funciones de distribución, de la misma forma de la distribución de probabilidad y la ecuación (4.7) es obtenida.

4.2. El sistema magnético de Ising de espín

En materiales magnéticos los estados microscópicos del sistema se supone que es definido por los valores de la magnetización del espín local, en muchos materiales magnéticos el electrón responsable del comportamiento magnético está localizado cerca de los átomos de la latiz¹ de cristal y la fuerza con la cual tiende a orientar el espín es la interacción de cambio (de corto alcance).

El modelo que cualitativamente describe esta situación es llamado el modelo de Ising las variables microscópicas de este sistema son los espines de ising σ_i que por definición sólo pueden tomar dos valores $+1$ o -1 , la forma tradicional para la energía microscópica (que será llamada en lo posterior el Hamiltoniano) como la función de todos los espines es como sigue:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (4.14)$$

Donde la suma revisa todos los lugares vecinos más cercanos de la latiz de el sistema (la notación $\langle i,j \rangle$ significa los vecinos mas cercanos), J_{ij} son los valores de la interacción espín a espín y h es el campo magnético externo. Si todos los J_{ij} son iguales a alguna constante positiva, entonces se consigue el modelo del ferromagnetismo y si todas las J_{ij} son iguales a alguna constante negativa entonces obtenemos el modelo del antiferromagnetismo.

4.3. La aproximación de campo medio

A pesar de la aparente sencillez del modelo de Ising, una solución exacta (que significa el cálculo de la función de partición y la función de correlación) ha sido encontrada sólo para sistemas en una y dos dimensiones y sin campo magnético externo. En otro caso, se necesita utilizar algunos métodos de aproximación. Uno de los más simples es llamado la aproximación de campo medio, en muchos casos este método da el resultado que no está muy lejos del resultado correcto y muy seguido este método hace posible conseguir alguna comprensión cualitativa de lo que está sucediendo en el sistema bajo

¹Retícula de puntos, para nuestros fines, en un espacio bidimensional, lo podemos pensar como una rejilla.

consideraciones.

El punto de partida del método de aproximación es la suposición acerca de la estructura de la función de distribución en el estado de equilibrio, está factorizado sobre el producto de la función de distribución independiente en los lugares de la latiz del sistema:

$$P[\sigma] = \frac{1}{Z} \exp(-\beta H[\sigma]) \simeq \prod_i P_i(\sigma_i) \quad (4.15)$$

La función de distribución normalizada en el lugar es tomada en la forma:

$$P_i(\sigma_i) = \frac{1 + m_i}{2} \delta(\sigma_i - 1) + \frac{1 - m_i}{2} \delta(\sigma_i + 1) \quad (4.16)$$

donde m_i son los parámetros que tienen que ser obtenidos.

La factorización de la función de distribución ecuación (4.15) significa que el promedio de cualquier producto de cualquier función en sitios distintos es también factorizable sobre el producto de los promedios independientes:

$$\langle f(\sigma_i)g(\sigma_i) \rangle = \langle f(\sigma_i) \rangle \langle g(\sigma_i) \rangle \quad (4.17)$$

donde de acuerdo con la *ansatz* (4.16):

$$\langle f(\sigma_i) \rangle = \frac{1 + m_i}{2} f(1) + \frac{1 - m_i}{2} f(-1) \quad (4.18)$$

En particular, para el promedio de magnetización en el lugar, se consigue fácilmente:

$$\langle \sigma_i \rangle = m_i \quad (4.19)$$

por consiguiente el significado físico de los parámetros m_i en la función de distribución de prueba son aquellos que describen el promedio de magnetización del espín en el lugar.

De acuerdo con los principios generales de la mecánica estadística, estos parámetros deben de ser tales, que ellos habrían de minimizar la energía libre del sistema.

Usando la ecuación (4.15) y la ecuación (4.16) para la entropía y para el promedio de la energía se obtiene:

$$\begin{aligned} S &= -\langle \log(P[\sigma]) \rangle \simeq -\sum_i \langle \log(P_i(\sigma_i)) \rangle = \\ &= -\sum_i \left[\frac{1+m_i}{2} \log\left(\frac{1+m_i}{2}\right) + \frac{1-m_i}{2} \log\left(\frac{1-m_i}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$E = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} m_i m_j - h \sum_i m_i \quad (4.21)$$

Para la energía libre, de la ecuación (4.10) se obtiene:

$$\begin{aligned} F &= -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} m_i m_j - h \sum_i m_i + \\ T &\sum_i \left[\frac{1+m_i}{2} \log\left(\frac{1+m_i}{2}\right) + \frac{1-m_i}{2} \log\left(\frac{1-m_i}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (4.22)$$

Las condiciones necesarias para el mínimo de F son que $\partial F/\partial m_i = 0$, esta ecuación nos da:

$$-2 \sum_j J_{ij} m_j - h + T \operatorname{arctanh}(m_i) = 0 \quad (4.23)$$

La ecuación resultante, la cual define el parámetro m_i es:

$$m_i = \tanh[\beta(2 \sum_j J_{ij} m_j + h)] \quad (4.24)$$

Para ser más concretos, podemos considerar el sistema antiferromagnético en una latiz cubica en el espacio de tres dimensiones en un campo con cero magnetización, en este caso todas las interacciones de parejas de espines son iguales $J_{ij} = J > 0$ y que cada lugar tiene seis vecinos que están mas cerca que los demás, puesto que el sistema es homogéneo, es natural esperar que todas las m_i deban de ser iguales a alguna constante m , entonces la ecuación (4.24) se reduce a

$$m = \tanh[\beta(12Jm)] \quad (4.25)$$

Notar que el mínimo de la energía libre está condicionado por $\partial^2 f / \partial m^2 > 0$, usando la ecuación (4.23) esta condición puede ser reducida a

$$\frac{1}{1 - m^2} > 12\beta J \quad (4.26)$$

Se puede ver fácilmente que si $T > T_c = J/12$ la única solución a la ecuación (4.25) es $m = 0$ y esta solución satisface la condición (4.26) para que a todas las temperaturas mas altas que T_c el mínimo de la energía libre es alcanzado en el estado en el cual todos los lugares de los espines no están magnetizados.

Sin embargo si $T < T_c$, entonces en adición a la solución $m = 0$ la ecuación tiene dos soluciones no triviales $m = \pm m(T) \neq 0$. Se puede verificar fácilmente que en las regiones de estas temperaturas la solución $m = 0$ llega a ser el máximo y no el mínimo de la energía libre, mientras que el mínimo verdadero es alcanzado en $m = \pm m(T)$, para eso en la región de la baja temperatura $T < T_c$ la energía libre tiene dos mínimos, la cual está caracterizada por los lugares de magnetización distintos de cero de signos opuestos.

Cerca de T_c la magnetización $m(T)$ es pequeña, en este caso la expansión de potencias de $m(T)$ en la ecuación (4.25) pueden hacerse, en el orden principal en $r \equiv (1 - T/T_c) \ll 1$ se consigue

$$m(T) = \text{constante } r^{1/2} \quad (4.27)$$

para que como $T \rightarrow T_c$ viniendo de abajo, entonces $m(T) \rightarrow 0$.

Usando la ecuación (4.22) para la energía libre como la función de m se obtiene

$$F(m) = NT \left[-6Jm^2 + \frac{1+m}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) + \frac{1-m}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) \right] \quad (4.28)$$

donde N es el número total de lugares en el sistema. La forma cualitativa de la función $f(m)$ en $T > T_c$ y $T < T_c$ es mostrada en la figura (4.1). Notar que puesto que la energía libre por si misma es proporcional al volumen del sistema que es N , el valor de la energía libre forma una barrera separando los estados con $m = \pm m(T)$ en $T < T_c$ es también proporcional al volumen del

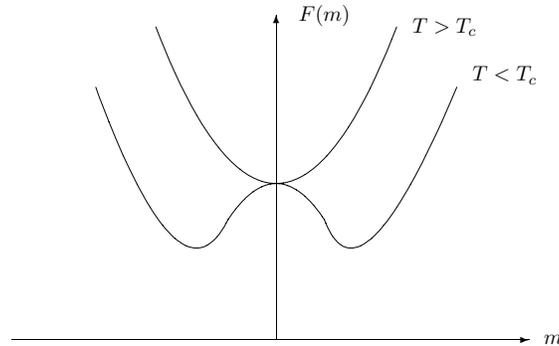


Figura 4.1: La energía libre del modelo ferromagnético de Ising: (a) en la región de la temperatura superior $T > T_c$, (b) en la región de temperatura inferior $T < T_c$.

sistema, por lo tanto en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ (que corresponde a la consideración de los sistemas macroscópicos), la barrera que separa a los dos estados se obtiene al infinito.

Las simples consideraciones anteriores demuestran sobre un nivel cualitativo el fenómeno fundamental el cual es llamado la espontánea ruptura de simetría, en la temperatura $T = T_c$ la transición de fase de segundo orden ocurre tal como en la región de baja temperatura $T < T_c$ la simetría con respecto al cambio global de los signos de los espines es roto y los segundos estados base aparecen, (en cambio del primero) estos dos estados difieren en el signo del promedio del espín de magnetización y ellos están separados por la barrera microscópica de la energía libre.

Ahora consideremos un simple e ilustrativo sistema de Ising, para el cual la aproximación de campo medio mencionada anteriormente, parece ser exacta.

4.4. El modelo de Ising con interacciones de largo alcance débiles

Este es el sistema de Ising ferromagnético descrito por el Hamiltoniano (4.14) en el cual la interacción espín a espín J_{ij} se supone que son iguales para todos los pares de los espines (y no solo para los vecinos más cercanos).

Esta es una situación muy poco probable físicamente, debido a que la interacción entre cualesquiera dos espines es asumida para ser independiente de la distancia espacial entre ellos, no obstante este modelo es muy conveniente para propósitos educativos, puesto que su solución es exacta, simple y no trivial.

Ya que la energía del sistema debe ser proporcional al volumen N , mientras el número total de pares de los espines es proporcional a N^2 , el valor de la interacción de espín a espín debe de ser tomado para N^{-1} , tomemos $J_{ij} = J/N$. Entonces el Hamiltoniano del sistema es

$$\begin{aligned} H &= -\frac{J}{2N} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i = \\ &= -\frac{J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - h \sum_i \sigma_i \end{aligned} \quad (4.29)$$

Para la función de partición se obtiene

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma} \exp \left[\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \beta h \sum_i \sigma_i \right] = \\ &= \left(\frac{\beta N J}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\sigma} \exp \left[-\frac{\beta N J}{2} m^2 + \beta J m \left(\sum_i \sigma_i \right) + \beta h \sum_i \sigma_i \right] dm \end{aligned} \quad (4.30)$$

El parámetro gaussiano m introducido arriba es sólo para linealizar la suma sobre los espines, de hecho tiene un claro significado físico, la expresión anterior para la función de partición podría asumirse que corresponde al sistema descrito por el Hamiltoniano

$$H [m, \sigma] = \frac{NJ}{2} m^2 - Jm \left(\sum_1^N \sigma_i \right) - h \sum_i^N \sigma_i \quad (4.31)$$

La correspondiente energía libre como la función del parámetro m habría de ser

$$F = -T \log \left[\sum_{\sigma} \exp (-\beta H [m, \sigma]) \right] \quad (4.32)$$

El mínimo de F con respecto a m se obtiene de la ecuación $\partial F / \partial m = 0$, Simples calculos usando las ecuaciones (4.31) y (4.32)

$$m = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle \sigma_i \rangle \quad (4.33)$$

Donde

$$\langle \sigma_i \rangle \equiv \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \sigma_i \exp (-\beta H [m, \sigma]) \quad (4.34)$$

es el valor del promedio térmico de la magnetización del lugar del espín, por consiguiente, el parámetro m describe el promedio de la magnetización del sistema.

Los cálculos para la función de partición son los siguientes, de la ecuación (4.30) se obtiene

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{\beta NJ}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2} m^2 \right) \prod_i^N \left[\sum_{\sigma_i = \pm 1} \exp (\beta (Jm + h) \sigma_i) \right] dm \\ &= \left(\frac{\beta NJ}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2} m^2 \right) [2 \cosh \beta (Jm + h)]^N dm \\ &= \left(\frac{\beta NJ}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left(-\frac{\beta NJ}{2} m^2 + N \log [2 \cosh \beta (Jm + h)] \right) dm \\ &= \left(\frac{\beta NJ}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp (-\beta JN f(m)) dm \end{aligned} \quad (4.35)$$

donde

$$f(m) = \frac{1}{2}m^2 - \frac{1}{\beta J} \log(2 \cosh \beta(Jm + h)) \quad (4.36)$$

ya que la expresión en el exponente en la última integral en la ecuación (4.35) es proporcional al volumen del sistema N , en el límite macroscópico cuando $N \rightarrow \infty$, la principal contribución a la función de partición (y a la energía libre) viene de la proximidad del mínimo de la función $f(m)$. El valor de m que corresponde al mínimo se obtiene de la ecuación $\partial f / \partial m = 0$. obteniendo la diferencial de la ecuación (4.36) con respecto a m y se obtiene la siguiente ecuación

$$m = \tanh \beta(Jm + h) \quad (4.37)$$

que coincide con la ecuación correspondiente para la magnetización en la aproximación de campo medio parece ser exacta, para la energía libre del sistema en principal orden en N se obtiene

$$F = NJ \left[\frac{1}{2}m^2 - \frac{1}{\beta J} \log(2 \cosh \beta(Jm + h)) \right] \quad (4.38)$$

donde el valor de m se obtiene de la ecuación (4.37).

Los posibles tipos de la solución y las resultantes transiciones de fases del espontáneo rompimiento de la simetría de esta ecuación ya han sido discutidos brevemente en conexión con la aproximación de campo medio.

Capítulo 5

Vidrios de espín

En esta parte veremos en simples términos cualitativos, que el problema de los estados de los vidrios de espín están por todas partes. Será útil conseguir al menos alguna comprensión cualitativa de que clase de física puede esperarse que resulte de los sistemas de la mecánica estadística en los cuales el factor dominante es el desorden [5].

5.1. El modelo de vidrios de espín

Existen muchos diferentes tipos de modelos estadísticos de los vidrios de espín, uno de los mas simples y por otro lado el mas general es en términos del clásico espín de Ising descrito por el Hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^N J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (5.1)$$

Este sistema consiste en N espines de Ising σ_i $\{i = 1, 2, \dots, N\}$ tomando valores ± 1 , que son puestos en los vértices de alguna latiz numerados por el índice i , las interacciones espín a espín J_{ij} son aleatorias en sus signos y sus valores. El modelo está definido por la elección de la función de distribución $P(J_{ij})$ para la interacción espín a espín. La más simple y por otro lado suficientemente realista desde el punto de vista experimental, la función es la que tiene únicamente las interacciones con los vecinos más cercanos distinta de cero y su distribución de probabilidad es gaussiana e independiente para todos los pares de interacciones entre los espines

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi J^2}} \exp\left(-\frac{J_{ij}^2}{2J^2}\right) \quad (5.2)$$

el parámetro J es el valor característico de la interacción espín a espín.

Para conocer más de la motivación para el Hamiltoniano (5.1) desde el punto de vista de la descripción del sistema de vidrios de espín sugiero leer el artículo [3]

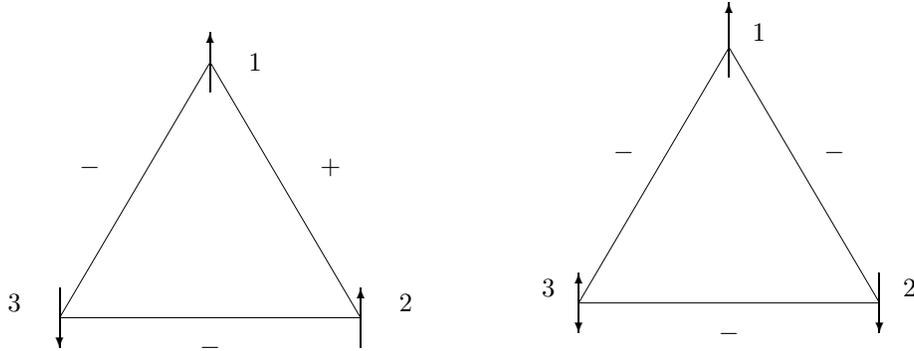
5.2. El concepto de frustración

El problema principal es debido al hecho de que la interacción es aleatoria J_{ij} está apagada *i.e.* para cualquier muestra concreta ellos están fijos esto resulta en el siguiente fenómeno. Considerar tres interacciones arbitrarias entre los espines (5.1). Supongamos por simplicidad que todas las interacciones son iguales en sus valores y solo diferentes en signos.

Ahora si en las tres interacciones J_{12} J_{23} J_{31} , ha ocurrido que todas son positivas, o que dos de ellas han sido negativas mientras que la tercera es positiva (este es el caso cuando el producto de las interacciones a lo largo del triángulo es positivo), entonces el estado base de tal sistema de tres espines será único (excepto por el cambio global de los signos de todos los espines) figura (5.1(a)).

Sin embargo, si el producto de las interacciones a lo largo del triángulo ha ocurrido que es negativa (una de las interacciones es negativa o las tres interacciones son negativas) entonces el estado base de tal sistema será degenerado, se puede componer por ejemplo, que el primer espín apunte hacia arriba entonces si vamos a lo largo del triángulo en el sentido de las manecillas del reloj (en el caso de que las tres interacciones sean negativas figura 5.1(b)) el segundo espín debe ser orientado hacia abajo, mientras que la orientación del tercer espín debe permanecer indefinida, de acuerdo con $J_{23} < 0$ este debería de ser orientado hacia arriba, mientras que de acuerdo con $J_{31} < 0$ este debería de ser orientado hacia abajo.

Se puede comprobar fácilmente que un fenómeno similar tiene lugar en cualquier cadena cerrada de espines, que consista en un número arbitrario de



- (a) No hay frustración: El producto de las interacciones a lo largo de el triángulo es positivo.
- (b) La frustración: el producto de las interacciones a lo largo del triángulo es negativo.

Figura 5.1: La frustración en el sistema de los tres espines.

espines, en donde el producto de las interacciones a lo largo de la cadena es negativo, este fenómeno es llamado frustración.

Un importante punto es que no cualquier desorden parece ser relevante para las propiedades termodinámicas del sistema. Esta es la frustración que es una parte relevante del desorden, que esencialmente cambia el comportamiento del sistema en comparación con su correspondiente sin desorden, en otras palabras, si el desorden no produce frustración entonces este no es relevante para las propiedades básicas del estado base del sistema. El término de frustración fue introducido por G. Toulouse [20].

También podría pasar que el desorden fuera solo ficticio, en cierto sentido, que pueda quitarse por una apropiada redefinición de las variables del sistema. Un ejemplo trivial es el imán de Mattis [4] que también es descrito por el Hamiltoniano (5.1) donde la interacción espín a espín está definida como sigue $J_{ij} = \xi_i \xi_j$ y el *quenched* ξ_i toma valores ± 1 con igual probabilidad, en tal sistema la interacción J_{ij} es también aleatorio el signo pero después de una simple redefinición de las variables de espín $\sigma_i \rightarrow \sigma_i \xi_i$ un ordinario modelo de Ising ferromagnético será recobrado.

Ahora en un sistema multiespines se pueden dibujar muchas de todas las

posibles cadenas de espines cerradas, en general si la interacción espín a espín es aleatoria con respecto al signo, entonces se podría esperar que ahí existiera mucha frustración en el sistema. Esto a su vez resultaría en una tremenda degeneración del estado base o al menos produciría muchos estados bajo aparentes o engañosos con la energía muy cercana a los estados base. En el vidrio de espín de Ising descrito por el Hamiltoniano (5.1) con interacciones de largo alcance el número de tales estados parece ser del orden de $\exp(\lambda N)$ donde λ es un número más pequeño que $\log 2$, mientras la cantidad total de estados en el sistema es igual a $2^N = \exp[(\log 2)N]$.

5.3. Promedio de las celdas

Debemos hacer notar de nuevo que todas las dinámicas térmicas de las que estamos hablando toman un lugar *quenched* en la interacción aleatoria de espín a espín. Por consiguiente hablando estrictamente todos los resultados que podemos esperar conseguir para las cantidades notables para el sistema en concreto, dependerán de la matriz de interacciones J_{ij} *i.e.* Los resultados puede esperarse que contengan algunos $N(N - 1)/2$ parámetros aleatorios. Aparentemente los resultados de tal tipo son mas o menos imposibles de calcular y además ellos son inútiles, intuitivamente esto es claro, sin embargo las cantidades que son utilizadas para ser llamadas notables, deben de depender en algún termino medio en general de características de las interacciones aleatorias. Esto nos trae el concepto de promedio de las celdas.

La forma tradicional de las especulaciones porque el fenómeno del promedio de las celdas se debe de esperar que tome lugar, está en lo siguiente, la energía libre del sistema se conoce que es proporcional al volumen del sistema, el cual en nuestro caso es N , por lo tanto en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$ la principal contribución a la energía libre debe de venir del volumen y no del limite, que usualmente produce los efectos de los siguientes ordenes en el pequeño parámetro $1/N$, cualquier sistema macroscópico podría ser dividido en un número macroscópico de macroscópicos sistemas entonces el total de la energía libre del sistema consistiría en la suma de las energías libres de los subsistemas, más la interacción que viene de los subsistemas sobre sus limites, si todas las interacciones en el sistema son de corto alcance (que tiene lugar en cualquier sistema normal), entonces la interacción de los subsistemas es solo el efecto del limite que se está desapareciendo en el limite

de la termodinámica, por consiguiente, el total de la energía libre puede ser representada por una suma del número macroscópico de términos. Cada uno de estos términos será una cantidad *quenched* aleatoria, puesto que él contiene, como los parámetros los elementos aleatorios de la matriz de interacción de espín a espín, luego de acuerdo con la ley de los grandes números, la suma de muchas cantidades aleatorias puede ser representada como su valor promedio obtenido de su distribución estadística (todo esto es cierto solo bajo ciertos requerimientos sobre las características de la distribución estadística en el límite $N \rightarrow \infty$).

Por esto la conclusión que resulta de tales especulaciones es que la energía libre de un sistema macroscópico deben de ser el promedio de las celdas sobre la realización de las interacciones aleatorias de acuerdo con su distribución aleatoria.

La energía libre se da por el logaritmo de la función de partición, de manera que esto parece como si la única cosa que debe de ser hecha por el cálculo de la termodinámica notable es producir el promedio del logaritmo de la función de partición sobre la distribución dada de J_{ij} aleatorios simultáneamente con el cálculo de la función de partición, es bastante claro que tal programa no es fácil, no obstante, en el nivel de esta clase de especulaciones parece como si esto solo fuera un problema técnico (presumiblemente uno muy difícil) y no mas que esto.

5.4. La interrupción de la ergodicidad

Los argumentos anteriores son útiles por dos razones. Primera ellos muestran en una forma bastante simple y en un nivel cuantitativo de que manera una física ordinaria de sistemas desordenados puede esperarse que se parezca a ellos. Segundo debido a que en general para vidrios de espín ellos no son aplicables. Que hace a los vidrios de espín ser una materia tan especial, será discutido un poco más adelante, pero consideremos unos puntos generales acerca de la mecánica estadística.

Todas las cosas serían bastantes simples si la energía libre fuera una función analítica de la temperatura (y los otros parámetros) o en otras palabras,

si no hubiera transición de fase debido a la ruptura de algún tipo de simetría que existe en el sistema bajo consideración.

Aquí está el ejemplo simple de como con argumentos claros, formales y absolutamente correctos nos conducen a conclusiones incorrectas. Considerar un modelo ferromagnético ordinario (capítulo 4). Este es descrito por el Hamiltoniano (5.1) en el cual todas las interacciones espín a espín son iguales a alguna constante positiva, ya que el Hamiltoniano es invariante con respecto al cambio global de los signos de todos los espines del sistema, cualquier cantidad termodinámica que es distinta en espín debe de ser igual a cero. En particular esto también debe ser cierto para cantidades que describen la magnetización general del sistema, para cualquier N finita estos argumentos son perfectamente correctos.

Formalmente ellos pretenden permanecer correctos también en el límite $N \rightarrow \infty$, sin embargo, lo que ocurre en este límite es que la energía libre se convierte en una función que no es analítica de la temperatura en algún punto crítico T_c . En el resultado debajo de T_c se sabe que un rompimiento espontáneo de simetría tiene lugar y un promedio magnético distinto de cero aparece. Argumentos formales muestran por que las especulaciones de la simetría anteriores parecen no ser correctas, es para decir que en el límite cuando $N \rightarrow \infty$ la función de partición es formalmente divergente, mientras que las cantidades divergentes muy seguido pueden producir cosas bastante inesperadas. En términos de física, el fenómeno es cualitativamente muy simple, debajo de T_c el espacio de todos los estados del sistema está consignado a ser dividido en dos partes iguales separadas por una barrera infinita (en el límite $N \rightarrow \infty$). Por esa razón en la termodinámica notable sólo la mitad de los estados contribuyen y estos son los estados que están en un lado de la barrera y por eso en la termodinámica notable el promedio de la magnetización parece ser distinto de cero.

En los cálculos actuales de la termodinámica para tales sistemas, todos los resultados están saliendo automáticamente ambos arriba y abajo de T_c y usualmente esto se hace sin ninguna referencia al semifilosófico antecedente descrito anteriormente, sin embargo, incluso en esta simple situación es útil recordar que debajo de T_c no toda la función de partición es computable, sino solo una mitad de esta y es esta mitad que nos da la física notable. Este fenómeno es llamado fracaso de la ergodicidad y es la propiedad de cualquier

transición de fase.

El ejemplo del sistema ferromagnético es muy simple debido a que somos capaces de suponer la manera correcta de que clase de simetría podría esperarse que se rompiera a bajas temperaturas, podemos fácilmente suponer que es la simetría con respecto al cambio generalizado de la magnetización y sabiendo que somos capaces de concluir que parte de todos los estados del sistema deben ser tomados en cuenta.

En vidrios de espín el rompimiento espontáneo de simetría también tiene lugar, pero es mucho más difícil decir cuál es la manera correcta. El problema principal es que debe de ser rota la simetría directamente conectada con el desorden *quenched* de el sistema. Además lo que verdaderamente pasa en vidrios de espín es que la ruptura espontánea de la simetría ocurre no solo a cierto valor de T_c , pero esto ocurre a cualquier temperatura debajo de T_c . En otras palabras, debajo de T_c una continua secuencia de la transición de fase del rompimiento de la simetría tiene lugar y correspondientemente la energía libre es no analítica para ninguna temperatura por debajo de T_c . Y ese es el fenómeno que hace a los vidrios de espín mucho más especiales.

5.5. Los posibles escenarios

El único hecho que hemos aprendido ahora sobre los vidrios de espín es que pueden existir muchos estados metaestables (mínimo local de energía) y que los estados base pueden ser fuertemente degenerados.

Ahora basándonos sobre simples argumentos físicos trataremos de anticipar qué tipos de comportamientos de baja temperatura podríamos esperar que tuvieran lugar en tales sistemas.

Primero, si las barreras que están separando el mínimo local de energía permanecen finitas a bajas temperaturas, entonces los estados termodinámicos del sistema habrían de corresponder a estados paramagnéticos, aunque el tiempo de relajación puede parecer ser anormalmente bajo. En otras palabras el promedio térmico de la magnetización para cada sitio puede esperarse que sea cero $\langle \sigma_i \rangle = 0$ (la notación $\langle \dots \rangle$ significa el promedio térmico) y todo

el tiempo la función de correlación como $\langle \sigma_i(0)\sigma_i(t) \rangle$ podría esperarse que tienda a cero (posiblemente mas lento que una exponencial) $t \rightarrow \infty$ también.

Segundo, también podría pasar que exista un cierto estado de espín que tendiera la energía libre mucho más baja que todos los otros mínimos locales, así que para temperaturas suficientemente bajas el sistema se congelaría en este estado. En términos más concretos esto significaría que el sistema es sometido a la transición de fase tal como en la baja temperatura el promedio térmico de la magnetización de los espines para cada lugar $\langle \sigma_i \rangle$ no serían cero nunca mas, en este estado congelado los valores de la magnetización $\langle \sigma_i \rangle$ fluctúan en sus valores y signos de lugar a lugar (ya que el estado es desordenado), así que el parámetro que describe la parametrización del sistema es $m = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle$ sería cero como un estado paramagnetico, no obstante el otro parámetro de orden (usualmente llamado el parámetro de orden de Edwards-Anderson [6])

$$q = \frac{1}{N} \sum_i \langle \sigma_i \rangle^2 \quad (5.3)$$

sería distinta de cero en este caso.

En esta situación la termodinámica del sistema diferiría esencialmente de aquellos dos estados paramagnetico y ferromagnetico, el tiempo de relajación podría ser también anormalmente lento, subsecuentemente en esta región del espacio fase donde el sistema está congelado, numerosos mínimos locales de la energía libre podrían existir y correspondientemente allí podría existir el espectro total de las barreras de energía separándolos.

Tercero, algo mucho más sofisticado. Este es el caso cuando allí podrían existir muchos de los estados, en que el sistema congelarse a bajas temperaturas.

El primer caso podría tener lugar cuando existen fuertes fluctuaciones en el sistema, esto usualmente ocurre en sistemas de baja dimensión (como el modelo de Ising en dos dimensiones) o si las variables de los espines son continuas (como en el modelo de Heisenberg), que resulta en la existencia del estilo goldstone suave, que podría fácilmente derretir cualquier congelamiento.

Es más difícil de decir cuando el segundo escenario podría tener lugar, sin embargo también es realmente razonable esperar que esto sea realizable en ciertos sistemas estadísticos desordenados, toda la termodinámica que sería observada en este caso es descrita con todo detalle en las publicaciones de Fisher y Huse [7].

En lo posterior sólo consideraremos el tercer escenario y este es el caso en que cualitativamente la nueva física entra.

5.6. La secuencia continua de la transición de fase

En una transición ordinaria de fase de un estado paramagnético a ferromagnético, un rompimiento espontáneo de simetría tiene lugar, así que debajo de T_c el sistema podría estar en uno de los dos estados caracterizado por los parámetros de orden $\langle \sigma_i \rangle = +m$ o $\langle \sigma_i \rangle = -m$ el parámetro de orden m tiende a cero como $T \rightarrow T_c$. Estos dos valles en el espacio de estados son separados por la barrera infinita, así que una vez atrapado el sistema en uno de los valles debajo de T_c el sistema nunca podría venir al otro valle. Este fenómeno es llamado el rompimiento de ergodicidad.

Si la temperatura es disminuida más allá, ningún otro rompimiento de simetría tiene lugar en un sistema ordinario ferromagnético. En un sistema de vidrios de espín existe también una cierta temperatura crítica T_c y por encima de T_c la ergodicidad no es rota, así que el sistema está en el estado paramagnético. En T_c una transición de fase del rompimiento de la ergodicidad tiene lugar así que solo debajo de T_c el espacio de estados es dividido en muchos valles (su número se va a infinito en un límite termodinámico), separado por barreras infinitas de energía libre.

En alguna temperatura $T = T_c - \delta T$ cada valle es caracterizado por los valores distintos de cero del promedio para cada lugar $\langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)}$ (que por supuesto que fluctúa de signo y magnitud de lugar a lugar).

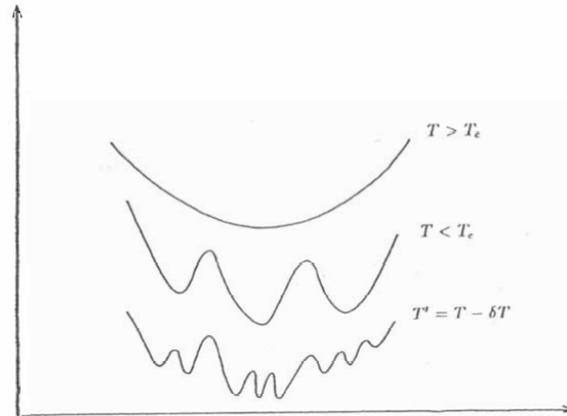


Figura 5.2: La estructura cualitativa de la superficies de energía libre en diferentes temperaturas.

Aquí el símbolo (signo) $\langle \dots \rangle_{(\alpha)}$ denota el promedio térmico dentro del valle número α , notar que, como hemos visto en el ejemplo del sistema ferromagnético sólo es tal que restringiendo el promedio hace que la física tenga sentido, si la ergodicidad es rota. El parámetro de orden que describía el grado de congelamiento del sistema dentro de los valles puede ser definido como sigue

$$q = \frac{1}{N} \sum_i |\langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)}|^2 \quad (5.4)$$

Lo que ocurre usualmente es que el valor de q parece ser el mismo para todos los valles a causa de que $T \rightarrow T_c$, $q \rightarrow 0$.

El punto más importante es que en cualquier decremento más allá de la temperatura en todos los valles nuevas transiciones de fases de de rompimiento de la ergodicidad tienen lugar, así que cada valle es dividido en muchos nuevos valles más pequeños separados por barreras infinitas de la energía libre (como se ve en la figura 5.2). El estado del sistema en cualquiera de estos nuevos valles es caracterizado de nuevo por el parámetro de orden (5.4) y su valor es creciente mientras la temperatura este decreciendo.

Este proceso de fragmentación del espacio de estados en más pequeños y más pequeños valles sigue continuamente con la temperatura decreciendo ha-

cia la temperatura cero. Esto significa que para cualquier temperatura debajo de T_c , el sistema está en el estado de la transición de fase del rompimiento de la ergodicidad.

Sin embargo esto no es todo, el otro punto es que en cualquier temperatura por debajo de T_c en cada uno de los valles existen también muchos estados metaestables separados por barreras finitas de energía libre. Existen barreras de cualquier elevación o altura, así que el espectro del valor de las barreras se va continuamente hacia arriba, hacia infinito.

5.7. El parámetro de orden

Vamos a construir el parámetro de orden, que reflejaría todo lo complicado que es la estructura del espacio de estados, lo más completo que sea posible.

Es más o menos claro que el parámetro de orden (5.4) definido solamente dentro de un valle, no contiene ninguna información acerca de otros valles, así como esto no nos dice nada acerca de lo que es, por así decirlo, la topología de estos valles dentro de la fase de estados.

Considere la siguiente serie de experimentos. A alguna temperatura por debajo de T_c empezando en un estado desordenado arbitrario del espín, permitimos que el sistema se relaje a su equilibrio térmico. En cada nuevo experimento empezaremos de un nuevo estado inicial aleatorio del espín. En el resultado de cada experimento estaremos consiguiendo algunos valores de equilibrio para el promedio de magnetización del espín en cada lugar $\langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)}$, donde α denota el número de experimentos, ya que se espera que existan muchos valles en el espacio de fases en el que el sistema podría quedar atrapado, este lugar de magnetización puede ser encontrado distinto en diferentes experimentos. El equilibrio es entendido aquí un poco condicionado, simplemente es asumido que el lugar de magnetización son tales cantidades que son conseguidos sus valores de equilibrio suficientemente rápido.

Asumamos que hemos un número infinito de tales experimentos entonces podemos introducir la cantidad, que describe a lo que se extiende el estado

que ha sido obtenido en diferentes experimentos, están cerca de cada uno de los otros

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_i^N \langle \sigma_i \rangle_{(\alpha)} \langle \sigma_i \rangle_{(\beta)} \quad (5.5)$$

obviamente que $|q_{\alpha\beta}| \leq 1$ y el valor máximo de $|q_{\alpha\beta}|$ es alcanzado cuando los estados en el experimento α y β son los mismos (en este caso el traslape (5.5) coincide con el de (5.4), que ha sido introducido para un valle solamente). Se puede ver fácilmente que, el menos puesto en correlación de los dos estados es, el valor mas pequeño del traslape (5.5) que ellos tengan. Si los dos estados son puestos en absoluta correlación, entonces su traslape (en el limite termodinámico) es igual a cero. En este sentido el traslape $q_{\alpha\beta}$ define una clase de materia en el que el espacio de estados (la cantidad que es inversa a q podría ser llamada la distancia en el espacio de estados).

Ahora, para describir la estadística de todos los posibles traslapos en el espacio de estados podría introducir la función de distribución de probabilidad

$$P(q) = \sum_{\alpha\beta} \delta(q_{\alpha\beta} - q) \quad (5.6)$$

Es esta función que podría ser considerada como el parámetro de orden físico y es en términos de la función $P(q)$ que la fase de vidrios de espín parece esencialmente diferente de cualquier otra fase, aunque en el procedimiento descrito anteriormente esta función ha sido introducida en un sentido bastante imaginario. Se mostrará después que podría definirse como la cantidad normal termodinámica y para el modelo de interacciones de largo alcance puede ser calculada explícitamente.

Posibles tipos de figuras son mostradas en la figura (5.3). El estado paramagnético es el único estado termodinámico que es caracterizado por la magnetización cero en el lugar y por lo tanto la función $P(q)$ es la función δ en $q = 0$ (figura 5.3(a)). En el estado ferromagnético debajo de T_c existen dos estados caracterizados por la magnetización del lugar $\pm m$ y por lo tanto la función $P(q)$ es las dos funciones δ en $q = +m^2$ y en $q = -m^2$ (figura 5.3(b)). Obviamente que en el caso de por así decirlo que imite a los vidrios de espín (escenario 2) la función $P(q)$ parece la misma como en el estado

ferromagnético.

En el caso real de vidrios de espín la función $P(q)$ parece esencialmente diferente (figura 5.3(c)), aquí entre las dos funciones δ en $q = \pm q_{max}(T)$ existe una curva continua. El $q_{max}(T)$ es el máximo traslape posible que es el auto traslape (5.4), ya que el número de valles en el sistema es macroscópico y (por alguna razón) sus autotraslapes son todos iguales, la función $P(q)$ tiene dos funciones en $q = \pm q_{max}(T)$ (la simetría de $P(q)$ se debe al hecho de que el Hamiltoniano del sistema es simétrico con respecto al cambio global de los signos de todos los espines). La existencia de la curva continua sobre el intervalo $(0, \pm q_{max}(T))$ es el resultado del proceso continuo de fragmentación de los valles en más y más pequeños cada vez. La jerarquía de los estados que simplemente aparece de esta manera no puede ser no correlacionada.

5.8. Ultrametricidad

De acuerdo a un cuadro cualitativo de los estados de los vidrios de espín descrito antes, una clase de estructura jerárquica de los estados de los vidrios de espín podría esperarse que aparezca (figura 5.2), dentro de cada valle, existen muchos valles más pequeños y dentro de los más pequeños existen aun muchos más pequeños y así sucesivamente. Lo antes mencionado puede ser descrito en términos de las cantidades termodinámicas.

En la sección previa hemos introducido la función $P(q)$, que nos da la probabilidad de encontrar dos estados de vidrios de espín con el traslape igual a q , introduciremos algo más complicado, la función de distribución de probabilidad $P(q_1, q_2, q_3)$, que daría la probabilidad de que tres estados arbitrarios de vidrios de espín tendría sus pares de traslapes simultáneamente igual a q_1, q_2 y q_3

$$P(q_1, q_2, q_3) = \sum_{\alpha\beta\gamma} \delta(q_{\alpha\beta} - q_1) \delta(q_{\alpha\gamma} - q_2) \delta(q_{\beta\gamma} - q_3) \quad (5.7)$$

La función $P(q_1, q_2, q_3)$ no es igual a cero sólo si al menos dos de los traslapes son iguales y sus valores no sean tan grandes como el tercero, en otras palabras la función $P(q_1, q_2, q_3)$ es distinta de cero solo en uno de los tres casos $q_1 = q_2 \leq q_3$, $q_1 = q_3 \leq q_2$ o $q_3 = q_2 \leq q_1$ en todos los otros casos

$P(q_1, q_2, q_3)$ es igual a cero, esto significa que en el espacio de estados de vidrios de espín, no exista ningún triángulo con todos sus tres lados diferentes. El espacio tiene tal propiedad métrica que es llamada la ultrametricidad, en matemáticas las estructuras con ultrametricidad ya han sido conocidas desde el final del siglo pasado y ellas vinieron de la física debido a los vidrios de espín. La ultrametricidad desde el punto de vista físico está descrito con todo detalle en el artículo [18].

La más simple ilustración de la estructura ultrametricidad pueden ser hecha en términos del árbol jerárquico (figura 5.4). El espacio de los estados de los vidrios de espín está identificado con el conjunto de los puntos finales del árbol. La métrica en este espacio está definida de una manera tal que el traslape (la distancia) entre cualesquiera dos estados depende solamente del número de generaciones a su antepasado más cercano en el árbol (con el crecimiento del número de generaciones, el valor del traslape decrece), se puede verificar fácilmente (sólo jugando con cualquier elección de puntos arbitrarios de el árbol en el conjunto) que el espacio definido de tal modo es ultramétrico.

Actualmente el árbol de estados no es solamente una ilustración abstracta auxiliar, realmente corresponde a la fragmentación jerárquica del espacio de estados dentro de los valles, como ha sido descrito antes (en la figura (5.2)). Para el eje vertical en la figura (5.4) el valor de q debe ser asignado y entonces para cualquier temperatura dada $T < T_c$ el conjunto de todos los estados de los vidrios de espín que existan a esa temperatura, se obtendrán donde se intersecta la sección del árbol en el nivel $q = q_{max}(T)$, la dirección horizontal en este cuadro es la dimensión infinita del espacio de estados.

Mientras decrece la temperatura a una nueva temperatura $T' < T$, cada uno de los estados que viven en el nivel $q_{max}(T)$ da el nacimiento a numerosos descendientes, que son los puntos finales del árbol a un nuevo nivel $q_{max}(T') > q_{max}(T)$, como $T \rightarrow 0$ entonces $q_{max}(T) \rightarrow 1$ y este es el más bajo (mas detallado) nivel del árbol en el cual se puede encontrar todos los posibles estados que podrían existir en los vidrios de espín.

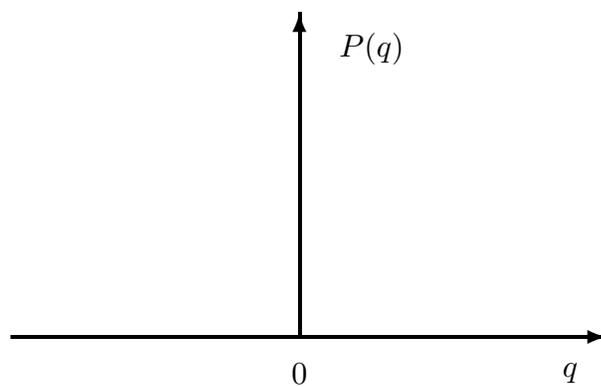
Correspondientemente, como la temperatura se incrementa a algún valor $T'' > T$ todos los estados con ancestros en común en el nivel $q_{max}(T'')$ < $q_{max}(T)$ convergen juntos en ese ancestro, como $T \rightarrow T_c$ entonces $q_{max}(T) \rightarrow 0$ y este es el nivel del (paramagnético) antecesor de este ancestro de todos

los estados de los vidrios de espín.

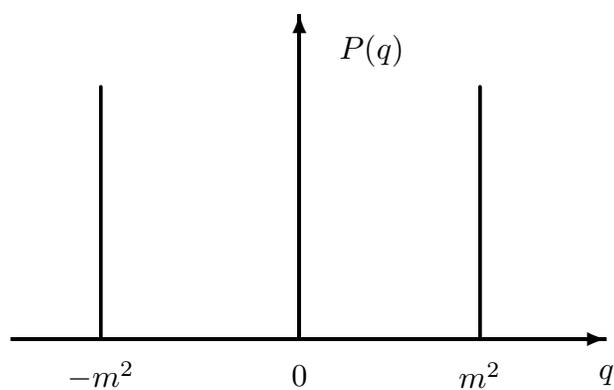
Puesto que la función $q_{max}(T)$ es determinada por la temperatura, esta define singularmente a que niveles del árbol el cruce debe de hacerse y que a su vez define la existencia de todos los estados de los vidrios de espín a esta temperatura.

Todo lo que se encuentra por debajo de esta temperatura es invisible y lo que se encuentra antes o arriba de este nivel es la historia de la evolución de los estados de los vidrios de espín.

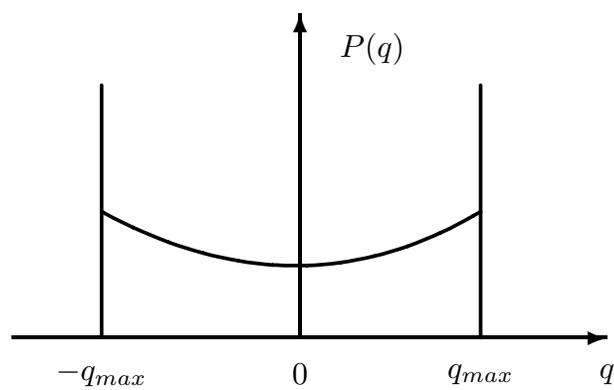
Por consiguiente, la temperatura determina la escala en el espacio de los estados de los vidrios de espín, los estados que tienen el traslape mas grande que $q_{max}(T)$ no son distinguibles, en este sentido también se podría decir que existe una clase especial de escala en la temperatura baja de la fase de vidrios de espín, endonde cambiando la temperatura solo se cambia la escala en el espacio de estados.



(a) En la fase paramagnetica



(b) en la fase ferromagnetica,



(c) en la fase de vidrios de espín.

Figura 5.3: La función de distribución de probabilidad $P(q)$.

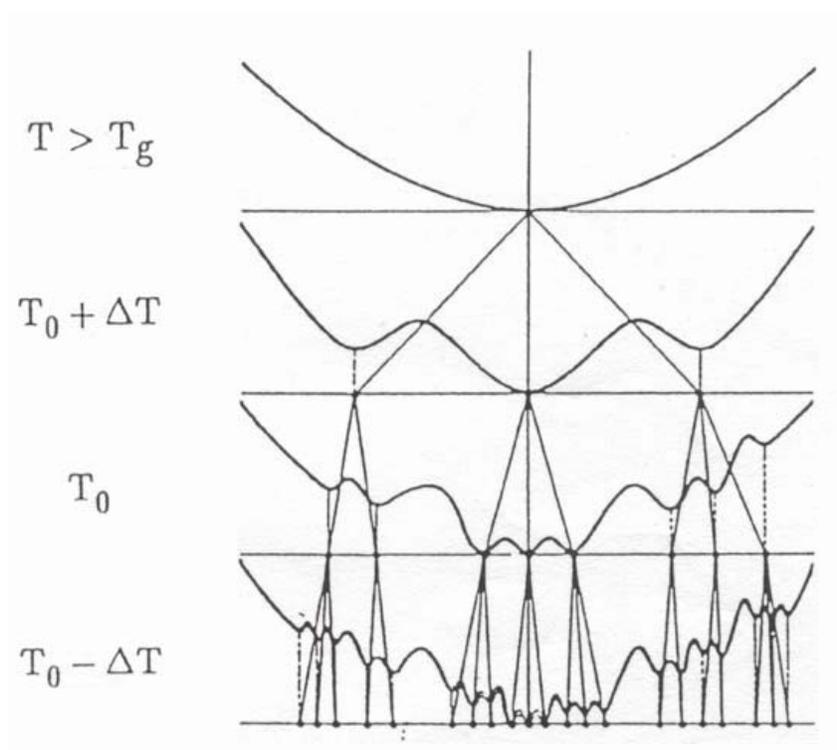


Figura 5.4: El árbol jerárquico de los estados de los vidrios de espín.

Capítulo 6

Redes de neuronas y vidrios de espín

6.1. Preámbulo

6.1.1. Modelos de redes de neuronas

El modelo de las redes de neuronas de Hopfield, es un modelo que estudia a la memoria humana como una propiedad colectiva de la gran interacción de las redes de neuronas, repasaremos brevemente el antecedente fisiológico de este modelo con el enfoque actual que vamos a trabajar, en este modelo cada neurona está vista como un espín de Ising con dos posibles estados hacia arriba y hacia abajo dependiendo de si la neurona tiene o no encendida un señal eléctrica como se ha visto anteriormente. El estado de la red de N neuronas en el tiempo t está definido como la configuración instantánea de todas las variables de espín en el tiempo t :

$$|\alpha, t\rangle = |S_1^\alpha, S_2^\alpha, \dots, S_N^\alpha; t\rangle \quad (6.1)$$

La dinámica de la evolución de estos estados en el espacio de fases de 2^N estados, es determinado por las interacciones entre las neuronas, que están interconectadas por uniones sinápticas de fuerza J_{ij} que determinan la contribución de una señal lanzada por la i -ésima neurona a la sinápsis receptora de la j -ésima neurona. Esta contribución puede ser de dos formas positiva (excitadora) o negativa (inhibidora). El potencial V_i en cada una de las neuronas es la suma de todas las señales pasadas a través de cada sinápsis,

realizada en un periodo de tiempo del orden de pocos milisegundos, es decir,

$$V_i = \sum_j J_{ij}(S_j + 1) \quad (6.2)$$

En ausencia de ruido o perturbaciones externas, cada neurona lanza una señal si su potencial V_i excede el valor del umbral U_i . De esta manera los estados estables de la red de neuronas serán aquellas configuraciones en que cada una de las variables de espín S_i este alineada con su campo molecular $h_i = V_i - U_i$, es decir

$$S_i h_i = S_i(V_i - U_i) > 0 \quad (6.3)$$

Asumiremos que los J_{ij} son simétricos, es decir que $J_{ij} = J_{ji}$ en tal caso la ecuación (6.3) es equivalente a la condición de que la configuración $\{S_i\}$ sean los mínimos locales (es decir estable a todas las inversiones de los espines individuales) del Hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2} \sum_i h_i S_i = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j \quad (6.4)$$

Donde normalmente es supuesto que el potencial del umbral satisface $U_i \simeq \sum_j J_{ij}$. Así no hay ningún término de campo externo en H . En la presencia de ruido hay una probabilidad finita de tener configuraciones dadas de otra manera que por la ecuación (6.3). Esto puede ser tomado en cuenta al introducir una temperatura efectiva $1/\beta$ caracterizando el nivel de ruido [19] o interferencia en el sistema como describiremos después.

Para las redes que tiene capacidad de aprender y memorizar su configuración estable debe ser correlacionada con ciertas configuraciones que son determinadas por el proceso de aprendizaje, esto se logra con las interacciones J_{ij} al ser dadas por

$$J_{ij} = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu, \quad i \neq j \quad (6.5)$$

El conjunto p de $\{\xi_i^\mu\}$ son ciertas configuraciones de la red que eran estables por el proceso de aprendizaje. Los $\{\xi_i^\mu\}$ son tomados para ser variables aleatorias *quenched*, tomando los valores $+1$ y -1 con igual probabilidad, cabe mencionar, que de acuerdo con la ecuación (6.5) cada par de neuronas

están conectadas.

El modelo (6.3)-(6.5) tendrá la capacidad de almacenamiento y recuperación de información, si las dinámicas emergentes de las configuraciones estables $\{S_i\}$ están correlacionadas con la memoria aprendidas $\{\xi_i^\mu\}$. Esta cuestión es el tema central del presente estudio, para completar la definición del modelo se tiene que prescribir una dinámica del mecanismo, por el cual la red evoluciona desde una condición inicial arbitraria.

6.1.2. Modelo generalizado de Hopfield

La dinámica del modelo de Hopfield es esencialmente una dinámica de Monte Carlo (o Glauber) con $T = 0$. Empezando con una configuración arbitraria el sistema evoluciona por una secuencia de inversiones o cambios individuales de espines, involucra a espines que están desalineados de sus campos moleculares instantáneos, este proceso decrece monótonamente el valor de H (6.4), y lleva en el futuro a estados estables, que son los mínimos locales de (6.6). Una generalización natural de este modelo a un sistema con ruido es adoptar la dinámica de Glauber de un solo espín a una temperatura finita $1/\beta$. La distribución de configuraciones relajadas (6.1), en este caso es una distribución de Gibbs

$$P[S] \propto \exp(-\beta H\{S\}) \quad (6.6)$$

Con H de (6.4) nos referimos a este modelo de temperatura finita, como el modelo generalizado de Hopfield. Notar que la estabilidad de un estado para todas las inversiones de los espines solos no es suficiente para la estabilidad dinámica a una temperatura finita. La probabilidad de que el i -ésimo espín este en un estado S'_i al tiempo $t + \delta t$, dada una configuración $\{S_i\}$ de la red al tiempo t , es proporcional a

$$P(S'_i) = \frac{\exp(-\beta S'_i h_i \{S_i\})}{\exp(-\beta S'_i h_i \{S_i\}) + \exp(+\beta S'_i h_i \{S_i\})} \quad (6.7)$$

Donde $h_i = V_i - U_i = \sum_j J_{ij} S_j$, como antes. La matriz W , de las probabilidades de transición del estado $|\alpha, t\rangle$ al estado $|\beta, t + \delta t\rangle$, es solo un producto de probabilidades (6.7), es decir

$$\langle \beta | W | \alpha \rangle = \prod_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} e^{-\beta h_i^\alpha S_i^\beta} \operatorname{sech}(\beta h_i^\alpha S_i^\beta) \right] \quad (6.8)$$

Así, a cada paso todos los espines comprueban simultáneamente sus estados contra sus campos moleculares. Cada paso puede consistir de muchos, incluso N inversiones de los espines.

Esto ha sido mostrado por Peretto [16], que mientras J_{ij} es simétrico la ecuación maestra basada en las proporciones de la transición dada por (6.8), obedece al equilibrio detallado y la conduce a una distribución Gibbs estacionaria de los estados, $\exp(\beta \bar{H})$ con el Hamiltoniano vigente

$$\bar{H} = -\frac{1}{\beta} \sum_i \ln \left[2 \cosh \left[\beta \sum_j J_{ij} S_j \right] \right] \quad (6.9)$$

La dinámica síncrona de este modelo parece llevar a primera vista un muy diferente comportamiento colectivo del mecanismo asíncrono de Hopfield. La dinámica del sistema real es mas probable que este entre los dos extremos, así es importante investigar hasta que punto estas diferencias son relevantes.

6.1.3. La relación de los modelos de magnetos aleatorios

El estudio de los modelos descritos anteriormente es interesante, no solo en el contexto de memoria, sino también en el contexto de la mecánica estadística de sistemas magnéticos desordenados. El Hamiltoniano descrito en (6.4) y (6.5) es un caso especial de vidrios de espín con alcance infinito [10], donde cada espín está interactuando por la vía de intervenir aleatoriamente *quenched* J_{ij} en el modelo canónico de vidrios de espín de rango infinito, introducido por Sherrington y Kirkpatrick [12], en el cual cada J_{ij} es una variable aleatoria independiente. En este modelo el desorden nos conduce a la apariencia de un número infinito de estados bases (en el limite $N \rightarrow \infty$) con propiedades estáticas y dinámicas, que son muy diferentes del caso usual del ferromagnetismo.

El otro extremo es el caso de (6.5) con $p = 1$ que es un modelo de Mattis de alcance infinito [14]. Aquí el desorden puede ser medido a la distancia, aquí la termodinamicamente es irrelevante. Hay dos estados bases ($\{S_i\} = \pm\{\xi_i\}$) sin frustración, cada vínculo $S_i S_j J_{ij}$ en el estado base es positivo. El modelo (6.4) y (6.5) con $p > 1$ representa un caso intermedio. Siempre hay una fracción finita de vínculos frustrados, sin embargo la correlación entre los vínculos puede ser suficientemente fuerte para producir una estructura de ruptura de simetría considerablemente más simple que la del modelo Sherrington y Kirkpatrick. Van Hemmen [9] introduce y resuelve el modelo relacionado con $p = 2$, su ecuación de aproximación de campo medio ha sido generalizada a una p arbitraria por Provost y Vallee [17], sin embargo la estructura y las propiedades de la solución de la ecuación de aproximación de campo medio para una p en general no ha sido investigada, no tiene la posibilidad de existir ni las propiedades de estados metaestables. Estos problemas son el enfoque principal de este estudio.

6.2. El modelo generalizado de Hopfield

6.2.1. Teoría de aproximación de campo medio

Ahora regresamos a la termodinámica del Hamiltoniano

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[\left[\frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^p \xi_i^\mu \xi_j^\mu \right] S_i S_j \right] \quad (6.10)$$

Donde ξ_i^μ son variables independientes y aleatorias con media cero, este sistema será estudiado en el límite cuando $N \rightarrow \infty$ y p finita. El conjunto promedio de la densidad de la energía libre está dado por

$$-\beta f(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} [N^{-1} \langle \langle \ln \text{Tr}_s \exp(-\beta H) \rangle \rangle] \quad (6.11)$$

Donde $\beta = 1/T$ (Con las unidades que $K_B = 1$), la notación $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ representa el promedio sobre la distribución de ξ_i^μ , la función de partición se reescribe para una realización dada de los ξ , como sigue

$$\begin{aligned}
Z &= \text{Tr}_s \exp(-\beta H) = \exp(-\beta p/2) \text{Tr}_s \exp \left[(\beta/2N) \sum_{\mu} \left[\sum_i S_i \xi_i^{\mu} \right]^2 \right] \quad (6.12) \\
&= (N\beta)^{p/2} e^{-\beta p/2} \int \prod_{\mu} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[\frac{-N\beta \mathbf{m}^2}{2} + \sum_i \ln[2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i)] \right] d\mathbf{m}^{\mu}
\end{aligned}$$

Donde una notación vectorial para los componentes p de ξ_i^{μ} y m^{μ} han sido introducidos, tan grande como p permanezca finita, la integral sobre m está dominada por el valor de su punto silla,

$$-\frac{1}{n\beta} \ln Z = \frac{1}{2} \mathbf{m}^2 - \frac{1}{N\beta} \sum_i \ln[2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i)] \quad (6.13)$$

El parámetro de orden \mathbf{m} está determinado por la ecuación del punto silla $\partial \ln Z / \partial m^{\mu} = 0$,

$$\mathbf{m} = \frac{1}{N} \sum_i \xi_i \tanh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i) \quad (6.14)$$

Para cualquier N Finita el lado derecho de la ecuación (6.13) y (6.14) depende de la realización particular de $\{\xi_i^{\mu}\}$. Sin embargo en el límite cuando $N \rightarrow \infty$ las fluctuaciones aleatorias se suprimen y ambos $\ln Z$ m son auto-promedio, La suma $(1/N) \sum_i$, es por consiguiente remplazada por promedios sobre $\{\xi_i\}$, llevando a la ecuación de aproximación de campo medio [17]

$$f(\beta) = \frac{1}{2} \mathbf{m}^2 - \frac{1}{\beta} \langle \langle \ln[2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi)] \rangle \rangle \quad (6.15)$$

$$\mathbf{m} = \langle \langle \xi \tanh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi) \rangle \rangle \quad (6.16)$$

Para interpretar el parámetro de orden \mathbf{m} se agrega de una fuente externa conjugando a $\xi_i^{\mu} S_i$, para encontrar que \mathbf{m} es solo el promedio del traslape entre la magnetización local los ξ , explícitamente se tiene

$$m^{\mu} = \langle \langle \xi_i^{\mu} \langle S_i \rangle \rangle \rangle \quad (6.17)$$

Donde

$$\langle S_i \rangle = \tanh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi_i) \quad (6.18)$$

es el promedio térmico del espín en el lugar i .

La estructura detallada de la solución de la ecuación (6.16) es esencial para la determinación de la correlación de los estados de los espines y $\{\langle S_i \rangle\}$ con cada una de las p memorias *quenched* $\{\xi_i\}$.

6.2.2. Los estados de Mattis

Nos restringiremos en esta sección al caso en que la distribución de ξ_i este dada por

$$\begin{aligned} P\{\xi_i^\mu\} &= \prod_{\mu,i} p(\xi_i^\mu), \\ p(\xi_i^\mu) &= \frac{1}{2}\delta(\xi_i^\mu - 1) + \frac{1}{2}\delta(\xi_i^\mu + 1) \end{aligned} \quad (6.19)$$

Expandiendo las ecuaciones (6.15) y (6.16) en potencias de \mathbf{m} se obtiene

$$f = -T \ln 2 + \frac{1}{2}(1 - \beta)\mathbf{m}^2 + O(m^4) \quad (6.20)$$

$$\begin{aligned} m^\mu &= \beta m^\mu + \frac{2}{3}\beta^3(m^\mu)^3 - \beta^3 m^\mu \mathbf{m}^2 + O(m^4) \\ \mu &= 1, 2, \dots, p \end{aligned} \quad (6.21)$$

de aquí se ve que por encima de $T = 1$ la única solución es el estado paramagnético $\mathbf{m} = 0$ con $f = -T \ln 2$.

Esta solución llega a ser inestable por debajo de $T_c = 1$ donde las soluciones de las m distintas de cero aparecen.

Denotaremos con n la dimensionalidad de \mathbf{m} , es decir el número de componentes de \mathbf{m} distintas de cero en una solución particular debajo de T_c . Es claro que de las ecuaciones (6.16) y (6.19) que permutando las m^μ o cambiando el signo de cada uno de los n componentes no cero independientemente generan soluciones enteramente equivalentes.

Sin pérdida de generalidad podemos restringir a las soluciones en que los primeros n componentes (es decir m^μ con $\mu = 1, 2, \dots, n$) son positivos, el resto de ellos son cero.

Primero discutiremos soluciones con $n = 1$ asumiendo $m^\mu = 0$ para toda $\mu > 1$

$$f = \frac{1}{2}(m^1)^2 - \frac{1}{\beta} \ln[2 \cosh(\beta m^1)] \quad (6.22)$$

$$m^1 = \tanh(\beta m^1) \quad (6.23)$$

Estas son las ecuaciones usuales de aproximación de campo medio de los modelos de Ising ferromagneticos. De hecho, esta solución corresponde a un estado en que todas las magnetizaciones locales (crece a una fracción despreciable cuando $N \rightarrow \infty$) son iguales a

$$\langle S_i \rangle = \xi_i^1 \tanh(\beta m^1) \quad (6.24)$$

Este estado es termodinámicamente equivalente (vía una transformación de Mattis [14]) al estado ferromagnético. Existen $2p$ estados equivalentes de esta forma correspondiendo a diferentes μ ya diferentes signos de m , nos referimos a estos estados como estados de Mattis.

Los estados de Mattis son el mínimo global de la energía libre, ambos cerca de $T = 1$ y $T = 0$ y más probablemente para todo $T < 1$. Cerca de $T = 1$ mostramos explícitamente en la subsección siguiente que la energía libre de Mattis es la más baja de todos los otros puntos silla [ver ecuación (6.38)]. Para $T = 0$, las ecuaciones (6.22) y (6.23) se leen

$$\mathbf{m}(T = 0) = (1, 0, 0, \dots, 0), \quad (6.25)$$

$$E(T = 0) = -\frac{1}{2} \quad (6.26)$$

Para mostrar que $-\frac{1}{2}$ es el estado base de la energía para $T = 0$ notar que la ecuación general de aproximación de campo medio [ecuaciones (6.6) y (6.7)] producen lo siguiente cuando $T \rightarrow \infty$

$$E = -\frac{1}{2}\mathbf{m}^2 \quad (6.27)$$

$$\mathbf{m} = \langle\langle \xi \operatorname{sgn}(\mathbf{m} \cdot \xi) \rangle\rangle \quad (6.28)$$

Hemos usado aquí los límites

$$\begin{aligned} \tanh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi) &\rightarrow \operatorname{sgn}(\mathbf{m} \cdot \xi) \\ T \ln[2 \cosh(\beta \mathbf{m} \cdot \xi)] &\rightarrow |\mathbf{m} \cdot \xi| \end{aligned} \quad (6.29)$$

que por definición $\operatorname{sgn}(0) = 0$, aplica también al caso cuando $\mathbf{m} \cdot \xi$ puede tomar el valor cero, tan grande como la distribución de ξ es discreta, cada componente de m^μ , es claro que está limitada por arriba por 1, sin embargo \mathbf{m} obedece a un límite más fuerte que es

$$\mathbf{m} \leq 1 \quad (6.30)$$

con la igualdad que se satisficiera solo por un componente \mathbf{m} . El límite (6.30) puede ser deducido usando la ecuación (6.28) y la desigualdad de Schwartz,

$$\begin{aligned} \mathbf{m}^2 &= \langle\langle |\xi \cdot \mathbf{m}| \rangle\rangle \\ &\leq [\langle\langle (\xi \cdot \mathbf{m})^2 \rangle\rangle]^{1/2} \\ &= \left[\sum_{\mu, \nu=1}^n m^\mu m^\nu \langle\langle \xi^\mu \xi^\nu \rangle\rangle \right]^{1/2} = (\mathbf{m}^2)^{1/2} \end{aligned}$$

que implica que m^2 es menor que la unidad para $n > 1$ e igual a la unidad para $n = 1$, desde el punto de vista de almacenamiento y de recuperación de la memoria estos estados son ideales ya que cada uno de ellos es completamente correlacionado con una de las memorias *quenched*.

Sin embargo a pesar de que los estados de Mattis, son los únicos estados que contribuyen a la termodinámica del sistema, soluciones con $n > 1$ también pueden ser importantes si son mínimos locales de la energía libre.

6.2.3. Soluciones simétricas

Una clase particularmente simple de soluciones de la ecuación (6.16) consiste en aquellas en que todos los n componentes distintos de cero de \mathbf{m} son iguales en magnitud, es decir

$$\mathbf{m} = m_n(1, 1, \dots, 1, 0, 0, \dots, 0) \quad (6.31)$$

Donde los primeros n componentes son la unidad y el resto $p-n$ son ceros, para una n -ada existen $\binom{p}{n}2^n$ soluciones que son equivalentes a la ecuación (6.31), estas soluciones simétricas son importantes por que ellas son las únicas soluciones que existen a lo largo de todo el rango de temperatura $T < 1$. La temperatura de transición para la aparición de soluciones asimétricas en que algunos de los n componentes tienen diferentes magnitudes, son todas menores que 1. Dividiendo cada una de las primeras n ecuaciones de (6.21) por m^μ , resulta en $\frac{2}{3}(m^\mu)^2 \simeq T - 1 + \mathbf{m}^2$ que es independiente de μ , es complicado ver que la igualdad de todos los $(m^\mu)^2$ distintos de cero de los dominios de orden por orden en la teoría de la perturbación alrededor de $T = 1$ para todos los órdenes, de esta manera el rompimiento de la simetría entre $(m^\mu)^2$ ocurre por debajo de una temperatura crítica que es menor que 1.

La ecuación de aproximación de campo medio para el estado simétrico (6.31) es

$$f_n = \frac{n}{2}m_n^2 - \frac{1}{\beta} \langle \langle \ln[2 \cosh(\beta m_n z_n)] \rangle \rangle \quad (6.32)$$

$$m_n = (1/n) \langle \langle z_n \tanh(\beta m_n z_n) \rangle \rangle \quad (6.33)$$

Donde

$$z_n^i = \sum_{\mu=1}^n \xi_i^\mu$$

La distribución sobre z_n^i está dada, de acuerdo con la ecuación (6.19), por

$$p(z_n) = 2^{-n} \binom{n}{k} \quad (6.34)$$

Donde

$$k = (z_n + n)/2$$

Es el número de ξ_i^u positivos que contribuyen a z_n^i . A propósito notamos que la ecuación (6.34) es la distribución aleatoria de un camino a través de una latiz unidimensional. Estas soluciones corresponden a estados en que la magnetización local es inducida por un campo molecular

$$h_i = m_n z_n^i,$$

es decir

$$\langle S_i \rangle = \tanh(\beta m_n z_n^i) \quad (6.35)$$

en otras palabras, las soluciones simétricas con $n > 1$ representa estados que son iguales a mezclas de varias memorias.

Para evaluar las soluciones cerca de T_c extendemos la ecuaciones (6.32) y (6.33) en potencias de \mathbf{m} y obtenemos

$$\begin{aligned} \overline{f_n} &\equiv \beta f_n - \ln 2 \\ &\simeq \frac{n}{2}(T-1)(\beta m_n)^2 + \frac{1}{12}(\beta m_n)^4 \langle\langle z_n^4 \rangle\rangle, \end{aligned} \quad (6.36)$$

$$m_n \simeq \beta m_n - \frac{\langle\langle z_n^4 \rangle\rangle}{3n} (\beta m_n)^3 \quad (6.37)$$

usando la igualdad $\langle\langle z_n^4 \rangle\rangle = n(3n-2)$ se obtiene el resultado final

$$\overline{f_n} \simeq -\frac{3nt^2}{4(3n-2)} \quad (6.38)$$

$$m_n^2 \simeq \frac{3t}{3n-2} \quad (6.39)$$

donde $t \equiv T-1$, así, $T=1$ es la temperatura critica para la aparición de todas las soluciones simétricas. La ecuación (6.38) implica que cerca de $T=1$ la energía libre aumenta monótonamente con n , el estado que tiene más baja energía es $n=1$, a saber el estado de Mattis con

$$m_1^2 \simeq 3ty\bar{f}_1 \simeq -\frac{3t^2}{4}$$

para estudiar las soluciones simétricas cerca de $T = 0$ usaremos las ecuaciones (6.27) y (6.28) para obtener

$$m_n(T = 0) = \frac{1}{n} \langle\langle |z_n| \rangle\rangle \quad (6.40)$$

$$f_n(T = 0) = -\frac{1}{2}nm_n^2 \quad (6.41)$$

Usando (6.34) se llega para incluso n a

$$\begin{aligned} m_{2k} &= \frac{1}{2^{2k}} \begin{bmatrix} 2k \\ k \end{bmatrix} \\ f_{2k} &= -\frac{2k}{2^{4k+1}} \begin{bmatrix} 2k \\ k \end{bmatrix}^2, k = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (6.42)$$

y para n impar

$$\begin{aligned} m_{2k+1} &= \frac{1}{2^{2k}} \begin{bmatrix} 2k \\ k \end{bmatrix} \\ f_{2k+1} &= -\frac{2k+1}{2^{4k+1}} \begin{bmatrix} 2k \\ k \end{bmatrix}^2, k = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (6.43)$$

Esta sucesión de f_n es delimitada por abajo por el estado base de energía $f_1 = -0,5$ y por arriba por $f_2 = -0,25$ además la sucesión (6.42) decrece monótonamente con k , mientras que la sucesión de (6.43) es monótonamente creciente, ambas tienen un límite en común ($l = -1/\pi$) como $k \rightarrow \infty$. Este estado coincide con el estado base de la energía por espín para una distribución Gaussiana de ξ^μ [1], en conclusión se obtiene el siguiente ordenamiento de las energías de los puntos silla simétricos para $T = 0$:

$$f_1 < f_3 < f_5 < \dots < f_\infty \dots < f_6 < f_4 < f_2 \quad (6.44)$$

Notar que en la solución par existe una probabilidad finita de $z_n = 0$. Desde una fracción finita del espín permanece el desorden para todas las temperaturas. Esta diferencia entre las soluciones impares y las soluciones pares

manifiestan por si mismas en el valor de la temperatura baja del parametro de orden de Edwards-Anderson [6],

$$q_n = \langle\langle S_i^2 \rangle\rangle = \langle\langle \tanh^2(\beta m_n z_n) \rangle\rangle \quad (6.45)$$

En el caso de n impar el valor mínimo de $|z|$ es 1. Por consiguiente

$$q_n \simeq 1 - 2p(z_n = 1) \exp(-2\beta m_n) \rightarrow 1 \quad \text{como } \beta \rightarrow \infty \quad (\text{o } T \rightarrow 0) \quad (6.46)$$

cuando por el contrario para n par se obtiene

$$q_n = 1 - p(z_n = 0) \quad \text{con } T = 0. \quad (6.47)$$

En la sección (6.3) se estudian las propiedades de la estabilidad de varios puntos silla simétricos en orden para determinar su importancia para las dinámicas.

6.3. Metaestabilidad en el modelo generalizado de Hopfield

6.3.1. La matriz de estabilidad de las soluciones simétricas

La estabilidad local de los puntos silla de f , ecuación (6.15) es determinada por los eigenvalores de la matriz A ,

$$A^{\mu\nu} = \frac{\partial^2 f}{\partial m^\mu \partial m^\nu} = \delta^{\mu\nu} - \beta(\delta^{\mu\nu} - Q^{\mu\nu}), \quad (6.48)$$

con

$$Q^{\mu\nu} \equiv \langle\langle \xi^\mu \xi^\nu \tanh^2(\beta \mathbf{m} \cdot \xi) \rangle\rangle. \quad (6.49)$$

Las soluciones de la ecuación (6.16) estables locales si todos los eigenvalores de A son positivos.

La forma general de A en el caso de las soluciones simétricas es bastante simple, todos sus elementos de la diagonal son de la siguiente forma

$$A^{\mu\nu} = 1 - \beta(1 - q),$$

donde $q = Q^{\mu\nu}$ está dada por la ecuación (6.45). Los elementos fuera de la diagonal con $\mu, \nu \leq n$ son todos iguales a

$$\beta Q = \beta \langle\langle \xi^1 \xi^2 \tanh^2(\beta m_n z_n) \rangle\rangle \quad (6.50)$$

y todos los demás elementos desaparecen. Recordar que hemos escogido una solución que tiene la forma de la ecuación (6.31).

La matriz A tiene tres grupos de eigenvalores: (1) un eigenvalor no degenerado

$$\lambda_1 = 1 - \beta(1 - q) + \beta(n - 1)Q \quad (6.51)$$

correspondiente a las fluctuaciones longitudinales en la amplitud de m_n ; (2) un eigenvalor degenerado $p - n$,

$$\lambda_2 = 1 - \beta(1 - q) \quad (6.52)$$

que corresponden a fluctuaciones en direcciones que mezclan más memorias; y (3) un eigenvalor degenerado $n - 1$,

$$\lambda_3 = 1 - \beta(1 - q) - \beta Q, \quad (6.53)$$

que está asociada con las fluctuaciones de anisotropía en el espacio de las n memorias ocupadas. Ya que Q es positivo para todos los $T < 1$ [1], los eigenvalores mas bajos de A son λ_3 , estos son los eigenvalores que determinan la estabilidad de las soluciones. Este es el caso para todas las n excepto $n = 1$, para el cual Q no existe, en este caso el único eigenvalor es $\lambda_1 = 1 - \beta(1 - q)$. En lo siguiente este eigenvalor es calculado cerca de T_c y cerca de $T = 0$.

6.3.2. Estabilidad cerca de T_c y $T = 0$

Expandiendo (6.45) y (6.50) en potencias de $t = 1 - T$ se obtiene

$$q \simeq 3nt/(3n - 2), \quad Q \simeq 2q/n,$$

de aquí se sigue esto

$$\lambda_1 \simeq -t + q + (n-1)Q \simeq 2q/n, \quad (6.54)$$

$$\lambda_2 \simeq -t + q \simeq \frac{2t}{3n-2} > 0, \quad (6.55)$$

pero

$$\lambda_3 \simeq -t + q - Q \simeq \frac{-4t}{3n-2} < 0 \quad (6.56)$$

Para todo $n > 1$. De casi $T = 1$, solo la solución con $n = 1$ es localmente estable, todas las demás soluciones son puntos silla.

La situación es bastante diferente a bajas temperaturas, cerca de $T = 0$ la solución simétrica de orden completo de n impar, con a lo más pequeñas desviaciones exponenciales [ver ecuación (6.46)], de esta manera como $T \rightarrow 0$, $q = 1$ y $Q = 0$ (se va hacia arriba por pequeñas correcciones exponenciales) y todos los eigenvalores iguales a la unidad, las soluciones son todas localmente estables.

Por otro lado, en las soluciones para n par el sistema resiste el completo orden, incluso en $T = 0$ [ecuación (6.47)]. Consecuentemente, ambos λ_2 y λ_3 son proporcionales a $-\beta$ considerando que $\lambda_1 \simeq 1$. Este resultado implica que mientras las soluciones simétricas de las n pares son inestables para toda T , las n impares llegan a ser localmente estables por debajo de cierta temperatura, $0 < T_n < 1$, dada la desaparición de λ_3 , es decir

$$\begin{aligned} -T_n &= (q - Q) \\ &= \langle\langle (1 - \xi^1 \xi^2) \tanh^2(\beta m_n z_n) \rangle\rangle \end{aligned} \quad (6.57)$$

Una solución numérica de esta ecuación produce $T_3 = 0,461$, $T_5 = 0,385$ y $T_7 = 0,345$, se puede ver de la ecuación (6.46) que la T -finita corrige para un T baja, es exponencialmente pequeña, con tal de que $T \ll m_n$, como $n \rightarrow \infty$, $m_n \propto 1/\sqrt{n}$ [1]. Así, para n grande T_n se espera que se escale como $1/\sqrt{n}$, que implica que sólo las soluciones simétricas de n impares con $n < T^2$ son estables, esto es corroborado por soluciones numéricas de la ecuación (6.50) para n grandes.

6.3.3. La estabilidad dinámica

Se ha mostrado anteriormente que el estado de Mattis es la única solución estable de la ecuación de aproximación de campo medio cerca de $T = 1$, por debajo de $T = 0,461$. Algunas de las soluciones simétricas de las n impares llegan a ser mínimos locales, mientras que las n pares permanecen inestables para toda T . Además, para bajas temperaturas, algunas de las soluciones asimétricas llegan a ser localmente estables. La importancia de las soluciones localmente estables para la evolución dinámica del sistema depende de las cuencas de atracción en el espacio fase de cada uno de estos estados y de las barreras de energía que los separa a ellos de cada uno de los otros estados o de los estados bases. Esto es bastante difícil de calcular las cuencas de atracción, aunque generalmente se espera que los estados altos en energía libre tengan significativamente pequeñas cuencas de atracción que aquellos de los estados bases, las barreras son fáciles de calcular, siendo las fluctuaciones de la energía libre por espín acerca de estos estados son finitas, las barreras de energía libre separándolos a ellos son todas proporcionales al tamaño del sistema N . Dentro de todo el mínimo local de la energía libre de la ecuación de aproximación de campo medio son en verdad estados metaestables. La vida de un estado metaestable es proporcional a $\exp(N\Delta f)$ donde Δf es la diferencia de la energía libre por espín de los estados metaestables y de los más bajos puntos silla anteriores a estos. Por ejemplo, el camino de más baja energía del estado $n = 3$ es $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, \dots, 0)$ al estado $n = 1$ $(1, 0, 0, \dots, 0)$ pasando a través del punto silla $n = 2$ $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0, 0, \dots, 0)$ produciendo una barrera de energía por espín [1]

$$\Delta f = f_2(T = 0) - f_3(T = 0) = 0,175 \quad (6.58)$$

[ver ecuaciones (6.42) y (6.43)].

Capítulo 7

Conclusiones

En el presente trabajo de tesis se introduce al lector en dos modelos matemáticos, tratando que sea lo más sencillo posible, con el fin de motivar el interés del lector en estos dos modelos y de ir más allá en el estudio de ambos modelos y encontrar alguna forma de relacionarlos, en ambos modelos emergen cualidades colectivas de la interacción de su componentes básicos.

Para la documentación del presente trabajo se consultaron una gran cantidad de artículos especializados y libros que abordaran el tema con el fin de seleccionar los adecuados al análisis que en este trabajo se les da a ambos modelos.

En este trabajo se presentó un estudio desde el punto de vista de la mecánica estadística del modelo de Hopfield, Este estudio está explícitamente restringido al límite de $N \rightarrow \infty$ y una p finita. En la sección del modelo generalizado de Hopfield las soluciones de la ecuación de aproximación de campo medio del modelo de Hopfield son estudiadas, se muestra que en todas las $T < T_c = 1$ la energía libre de los estados bases son todos estados Mattis, cada uno de ellos está correlacionado con una de las p memorias $\{\xi_i^\mu\}$ en $T = 1$ aparecen soluciones adicionales de la ecuación de aproximación de campo medio con alto grado de energía libre, estos son estados simétricos que tienen igual traslape con varias memorias.

En la sección de Metaestabilidad en el modelo generalizado de Hopfield, se presentó el análisis de estabilidad de esas soluciones, se muestra que cuando la temperatura decrece por debajo de

$$T \simeq 0.461 \tag{7.1}$$

algunas de estas soluciones llegan a ser mínimos locales en $T = 0$.

Todos los puntos que se traslapan con un número sobrante de memorias llegarán a ser mínimo local. Estos estados son realmente metaestables. Ellos están separados por barreras de energía libre proporcionales a N .

Bibliografía

- [1] D. J. Amit and H. Gutfreund. Spin glass models of neural networks. *Phys. Rev. A*, 32:1007, 1985.
- [2] R. Beale and T. Jackson. *Neural Computing: An Introduction*. Adam Hilger, New York, 1990.
- [3] K. Binder and A. P. Young. Spin glasses: Experimental facts, theoretical concepts and open questions. *Rev. Mod.Phys.*, 58:801, 1986.
- [4] V. Dotsenko. *AN INTRODUCTION TO THE THEORY OF SPIN GLASSES AND NEURAL NETWORKS*, volume 54. World Scientific Lecture Notes in Physics, Singapore.
- [5] V. Dotsenko. *Physics-Uspekhi*, 36(6):455, 1993.
- [6] S. F. Edwards and P. W. Anderson. *J. Phys.*, F 5:965, 1975.
- [7] D. S. Fisher and D. A. Huse. *Phys. Rev.*, B 38:373,386, 1988.
- [8] D. O. Hebb. *The organization of behavior; a neuropsychological theory*. Wiley, New York, 1949.
- [9] J. L. V. Hemmen. *Phys. Rev. Lett.*, 49:409, 1982.
- [10] J. L. V. Hemmen and I. Morgenstern, editors. *Heidelberg Colloquium on Spin Glasses*, volume 192 of Lecture Notes in Physic. Springer, New York, 1983.
- [11] J. J. Hopfield. Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 79:2554–2558, April 1982.

- [12] Kirkpatrick and D. Sherrington. *Phys. Rev. B*, 17:4384, 1978.
- [13] J. E. Marsden and A. J. Tromba. *Calculo Vectorial*. Addison Wesley, México, cuarta edition, 1998.
- [14] D. C. Mattis. *Phys. Lett.*, 56A:421, 1976.
- [15] W. McCulloch and W. Pitts. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, 5:115,133, 1943.
- [16] P. Peretto. *Biol. Cybern*, 50:51, 1984.
- [17] J. P. Provost and G. Vallee. *Phys. Rev. Lett.*, 50:598, 1983.
- [18] R. Rammal, G. Toulouse, and M. A. Virasoro. *Rev. Mod. Phys.*, 58:765, 1986.
- [19] L. Shaw and R. Vasudevan. *Math. Biosci*, 21:207, 1974.
- [20] G. Toulouse. *Commun Phys.*, 2:115, 1977.
- [21] B. Widrow and M. E. Hoff. Adaptive switching circuits. *IRE WESCON Convention Record New York*, pages 96,104, 1960.