



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

FISICA ESTADISTICA DE SISTEMAS COMPLEJOS

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A

CITLALI MARTINEZ SISNIEGA



Universidad Nacional
Autónoma de México



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 está 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.

INDICE

INTRODUCCION	1
CAPITULO UNO: SISTEMAS COMPLEJOS	4
1.1 ¿Qué se pretende con modelar?	4
1.2 Algunos ejemplos de sistemas complejos	5
1.3 Problemas de optimización	9
1.4 Método para la solución de algunos problemas	10
Bibliografía	13
CAPITULO DOS: VIDRIOS DE ESPIN	14
2.1 Clasificación de materiales magnéticos	15
2.2 Vidrios de espín: Un poco de historia	22
2.3 Modelos	26
2.3.1 Modelo de Edwards y Anderson	26
2.3.2 Modelo de Sherrington y Kirkpatrick	27
2.4 No ergodicidad de los vidrios de espín	31
Bibliografía	34
CAPITULO TRES: REDES NEURONALES	36
3.1 Generalidades	37

3.2	Modelos	38
3.3	Funcionamiento de una red neuronal	42
3.4	Semejanzas y diferencias entre una red neuronal y una computadora	45
3.5	¿Qué se investiga actualmente?	46
	Bibliografía	54
CAPITULO CUATRO: METODO DE MONTE CARLO		58
4.1	Origenes del método	59
4.2	Definición	60
4.3	Ejemplo del método	60
4.4	Problemas que permite resolver el método	62
4.5	Algoritmo de Metropolis et al.	68
	Bibliografía	71
CAPITULO CINCO: UN PROBLEMA CONCRETO DE REDES NEURONALES		72
5.1	Introducción al problema	74
5.2	Modelo	75
5.3	Simulación	79
5.3.1	Método	80
5.3.2	Resultados	81
5.4	Conclusiones	82
	Bibliografía	88

INTRODUCCION

Desde principios de siglo, se ha mostrado gran interés por tratar de explicar el comportamiento de la materia. Inicialmente, este tipo de estudios suponía, a partir de la apariencia externa, que los sistemas presentaban cierto orden y simetría. Un ejemplo de estos sistemas son los cristales ideales que estarían constituidos por átomos regularmente espaciados, formando así un patrón que se repite indefinidamente. A ésta periodicidad se le conoce como simetría traslacional. Los modelos teóricos capaces de describir a dichos sistemas están basados en métodos estadísticos donde las aproximaciones utilizadas son bien definidas y su campo de aplicación perfectamente conocido.

Sin embargo, la mayoría de los sistemas que encontramos en la naturaleza están muy lejos del orden perfecto, por lo que se les conoce como sistemas desordenados. Estos sistemas no presentan simetría traslacional. Los desarrollos recientes de métodos numéricos y de la mecánica estadística, junto con la teoría del estado sólido, han abierto grandes posibilidades para explicar este tipo de sistemas.

Un ejemplo de sistema que presenta gran cantidad de desorden son los llamados vidrios de espín. Este nombre se le da a los sistemas magnéticos en los cuales, a bajas

temperaturas, las orientaciones de los momentos magnéticos (espines) son aparentemente al azar y sin embargo se alinean en direcciones tales que la energía del sistema es mínima. Por otro lado, debido a que estos sistemas presentan frustración (éste término será definido en el capítulo dos), no existe ninguna configuración en que la energía de todos los pares de espines sea simultáneamente mínima.

Lo interesante en los vidrios de espín va mucho más allá del área de estudios de las propiedades de la materia. Ellos han inspirado toda una línea de pensamiento de la mecánica estadística y mostrado profundas conexiones entre los comportamientos de un gran número de sistemas complejos. Las herramientas teóricas y los conceptos que se han formado, han sido aplicados en dominios muy diversos que van desde problemas de optimización hasta la Biología. El caso más fascinante, es quizás, el de redes neuronales ó memorias asociativas en las que con un modelo de vidrio de espín se explora la capacidad de una red neuronal para memorizar y reconocer patrones.

Esta tesis consta de los siguientes capítulos:

En el capítulo uno, se trata de dar una visión muy general de lo que se conoce como "sistema complejo"; asimismo, nos referimos en particular a los problemas de optimización presentando algunos ejemplos de estos.

En el capítulo dos, se realiza una investigación bibliográfica sobre un tipo de sistema complejo que en los

últimos años ha causado gran curiosidad por las características que presenta, siendo además, prototipo de aquellos sistemas con un número muy grande de elementos ($N \rightarrow \infty$). Estos sistemas son los llamados vidrios de espín.

En el capítulo tres, hacemos una analogía entre los vidrios de espín y una red de neuronas interconectadas. De esta manera se estudia la capacidad de una red neuronal para funcionar como memoria asociativa.

Muchas veces nos encontramos con problemas cuyas soluciones no son fáciles de obtener analíticamente, por lo que es necesario acudir a otro tipo de métodos complementarios como, por ejemplo, la simulación computacional. Un método que hasta el momento ha sido de gran utilidad en este tipo de problemas es el presentado en el capítulo cuatro llamado método de Monte Carlo.

En el capítulo cinco se utiliza el método de Monte Carlo a $T=0$ para investigar un problema específico de redes neuronales.

CAPITULO UNO

SISTEMAS COMPLEJOS

Dado que a la palabra "complejo" se le pueden atribuir diferentes significados dependiendo del contexto, el objetivo principal de este capítulo es dar una visión muy general a lo que dentro de la literatura se conoce como "sistema complejo". Es común llamarle sistema complejo a aquel compuesto por un número muy grande de elementos, y que muestra comportamientos colectivos. Por otro lado, hay sistemas que, independientemente del número de elementos que lo constituyen, tiene un número reducido de soluciones y otros que tienen muchas. En el primer caso la solución puede ser única o a lo más unas cuantas, y en el segundo estas pueden ser cientos o inclusive un número infinito. Nosotros llamaremos "sistema complejo" a aquel que posee un gran número de soluciones.

1.1 ¿QUE SE PRETENDE CON MODELAR?

Generalmente al toparnos con un problema nuestro propósito es tratar de describir o modelar a éste para así poder

predecir su comportamiento por medio de su solución. Por modelar entendemos dar una descripción en términos matemáticos, lo más sencilla posible pero, logrando que capture la esencia del sistema que queremos describir; para esto es necesario distinguir las variables relevantes de las irrelevantes. Posteriormente se confrontan las predicciones con el experimento.

Desde un punto de vista matemático, podemos reducir algunos problemas a problemas variacionales. Por problema variacional entendemos a aquel que muestra diferentes posibles caminos hacia la solución, encontrando de esta forma, por ejemplo, el mínimo de una función. En los casos simples, la función puede tener un mínimo único o un número pequeño de ellos de manera que la solución sea fácil de obtener. Sin embargo, en caso de que tratáramos de encontrar el mínimo de un problema que involucre a un "sistema complejo", nos encontraríamos que existe un número muy grande de éstos. No habría manera, por un lado, de saber el número total de mínimos, y por el otro, si el que hemos encontrado es el mínimo más "profundo".

1.2 ALGUNOS EJEMPLOS DE SISTEMAS COMPLEJOS

A continuación daremos unos ejemplos de lo que llamamos sistemas complejos.

Si deseamos planear el desarrollo de una ciudad, de entre cientos de cosas algo importante a considerar es el transporte. En los proyectos de transporte urbano es necesario considerar los diferentes medios de transporte, la cantidad de personas que pueden transportar y la influencia que tienen entre ellos. Todo esto resulta muy complicado. Pensemos por un momento en el problema del control de tráfico en una ciudad. Para encontrar una buena solución a este problema, es necesario tomar en cuenta un gran número de variables como son: la cantidad de automóviles circulando, la importancia relativa de las calles, el número e importancia de las calles que desembocan a la calle en cuestión, la hora del día, el día de que se trate, y circunstancias como manifestaciones, marchas, accidentes, etc. Entre las cosas que tenemos que decidir están por ejemplo el tiempo en que un semáforo está en verde o en rojo y la prioridad que se le da a una arteria vial determinada.

Otro ejemplo es la red de distribución de correos. Se requiere minimizar el tiempo de entrega de cartas contando con un número limitado de carteros y empleados postales, así como de recursos económicos.

Un problema que se presenta a menudo en las aerolíneas es el retraso de los vuelos causado por la aglomeración de aviones en los aeropuertos. Las causas se atribuyen a la distribución particular del tráfico, ya que éste debe cumplir con ciertos requisitos. Los controladores de tráfico aéreo,

aparte de otras cosas, deben garantizar, que todo avión, tanto los que esperan tomar pista para aterrizar como los que se están preparando para salir, mantengan las reglas requeridas de seguridad. También es tarea de los controladores decidir qué avión debe tomar una cierta pista, a qué hora debe hacerlo y que maniobras debe ejecutar para lograr un despeje o un aterrizaje perfecto. Dicha tarea se viene a complicar cuando la demanda aumenta ya que los aviones entran y salen de la pista con mayor frecuencia lo que puede llegar a exceder la capacidad del sistema. Al haber excesivos retrasos se observa inconformidad en los pasajeros, desorganización en los horarios, uso inútil de combustible así como gastos innecesarios. A la fecha en los aeropuertos se utiliza una disciplina que la llaman " EL PRIMERO QUE LLEGA - PRIMERO QUE SE LE SIRVE". Esta estrategia es muy fácil de seguir, desafortunadamente, causa retrasos excesivos. Sin embargo, algún esfuerzo se tiene que hacer para minimizar el retraso u optimizar otras medidas que cumplan con lo relacionado a la inconformidad de los pasajeros sin violar las medidas de seguridad.

Consideremos ahora un problema que al parecer no es tan complicado como los anteriores, pero aun así, su solución óptima no es fácil de obtener. En una biblioteca se recibe un pedido de libros en diferentes materias, por ejemplo, Historia, Física, Geología, etc.. La biblioteca cuenta con un personal capacitado en la clasificación de los libros, pero

cada miembro del personal está más familiarizado con algunas áreas por lo que tiene mayor eficiencia al clasificar ciertos libros. Por ejemplo, Ana puede acomodar seis libros de Geología en una hora, pero si son de Física, únicamente puede acomodar cuatro por hora. Por otro lado, Jorge sólo puede acomodar un libro de Geología por hora, y ocho de Física por hora. Si se cuenta con varios empleados y muchos libros de materias diversas, lo que se debe decidir es qué categorías se le asignan a cada miembro del personal de tal manera que la clasificación de libros sea lo más eficiente posible.

En todos los problemas que hasta el momento hemos mencionado existen muchas formas o maneras diferentes de hacer las cosas, sólo que unas son más sencillas o mejores. Para dar un ejemplo drástico podríamos ver el citado problema del correo en el que sería absurdo pensar en hacer la repartición de las cartas por orden alfabético así como entregarlas dependiendo del color del sobre o del peso de cada carta. En cambio, sería más eficiente entregarlas por zonas o calles. Por otro lado, si se intentara obtener la mejor manera de repartir las cartas por "fuerza bruta", o sea, enumerando todas las posibles maneras de llevar a cabo esta tarea para después evaluar de alguna manera qué tan eficientes son, el tiempo de vida de un jefe de oficina de correos o de un grupo de ellos sería insuficiente.

1.3 PROBLEMAS DE OPTIMIZACION

Cuando nos encontramos con el tipo de problemas ya mencionados y nuestro propósito principal es encontrar la mejor solución, se dice que nos hemos topado con un problema de optimización. En algunos de estos problemas es posible encontrar una "buena" solución utilizando tan sólo sentido común mientras que en otros casos se requerirá invertir mucho tiempo y trabajo para obtener dicha solución. Por otro lado, no siempre es posible hacer un modelo matemático simple para un problema dado. El primer objetivo al atacar este tipo de problemas es dar una descripción matemática del sistema de tal manera que sea cuantificable la cantidad a minimizar para después tratar de encontrar una solución eficiente.

El problema clásico de optimización es el problema del "Agente Viajero" (traveling salesman problem) debido a que se trata de un problema fácil de plantear y que nos permite ver el procedimiento general a seguir para resolver este tipo de problemas. Dicho problema es el siguiente: Un agente viajero debe visitar N ciudades llegando finalmente al lugar de partida. ¿Cuál es la secuencia que debe seguir de tal manera que su recorrido sea el más corto posible?.

A lo primero que debemos enfrentarnos es a tratar de identificar en forma concisa las variables relevantes del problema para que de esta manera sea más "sencillo" encontrar la cantidad a optimizar. Dicha cantidad a optimizar se conoce

como "función de costo" y es una función de muchas variables (variables relevantes). En este ejemplo la función de costo correspondería a la distancia total que debe recorrer para visitar las N ciudades.

Si las soluciones se buscaran calculando la función de costo para todas las posibles opciones, nos encontraríamos con que para N "elementos", el número de soluciones es del orden de $N!$. Por ejemplo, en el problema del agente viajero el cálculo exacto de la función de costo $f(d_{ij})$ (función de la distancia entre muchas ciudades) para todas las posibles trayectorias requiere de gran esfuerzo para determinar "la" ruta óptima, ya que la complejidad de los cálculos aumenta exponencialmente con el número de ciudades por visitar. En la práctica, soluciones exactas solamente se pueden esperar para problemas con unas cuantas variables.

1.4 METODOS PARA LA SOLUCION DE SISTEMAS COMPLEJOS

Debido a la importancia práctica de este tipo de problemas y a la falta de algoritmos eficientes para resolverlos se han desarrollado tratamientos heurísticos. Los problemas que involucran sistemas complejos aparecen a menudo en diversas áreas de las ciencias básicas y aplicadas, en particular en Física nos enfrentamos tanto con problemas no complejos de los cuales conocemos su solución de manera "fácil" como es el caso de los gases ideales, como también nos enfrentamos con

problemas que debido a su no ergodicidad pueden tener diferentes realizaciones. Como ejemplo tenemos a los vidrios de espín.

La mecánica estadística trata con promedios sobre variables microscópicas para extraer propiedades macroscópicas de un sistema; es así como al tomar un número muy grande de partículas se obtiene el llamado límite termodinámico. La Mecánica Estadística se desarrolla suponiendo que es posible intercambiar promedios de ensamble con promedios temporales, es decir, con la hipótesis ergódica. Esta hipótesis nos dice que es equivalente observar un sistema a través del tiempo y promediar, que hacer n copias macroscópicamente iguales del sistema ($n \rightarrow \infty$) y promediar sobre éstas. Los problemas que cumplan con dicha hipótesis deben de alcanzar un estado estacionario que caracteriza al sistema con la energía en el estado de equilibrio. Tal energía es representada por el Hamiltoniano del sistema.

Las herramientas matemáticas utilizadas por la Mecánica Estadística pueden ser de utilidad en el tratamiento de algunos sistemas complejos. Pero es necesario utilizarla con cuidado y reinterpretar los resultados.

Un tipo de sistema complejo que en los últimos años ha sido de gran interés es el ya mencionado "vidrio de espín" que es una clase de sistema magnético que exhibe desorden y competencia entre los estados ferro y antiferromagnéticos diciéndose así que el sistema está frustrado. Se sabe ahora,

que un sistema frustrado y con desorden como lo son los vidrios de espín no tienen un estado de mínima energía sino un gran número de ellos.

Los modelos desarrollados para describir los vidrios de espín a temperaturas bajas proporcionan un camino posible para entender las posibilidades de optimizar sistemas complejos sujetos a conflicto entre sus interacciones.

En el capítulo siguiente se hablará más ampliamente de este tipo de aleaciones magnéticas y de las perspectivas de usar el mismo formalismo para tratar otros sistemas complejos como lo son las redes neuronales.

BIBLIOGRAFIA

Bianco, L., Rinaldi, G., Sassano, A., "A Combinatorial Optimization Approach to Aircraft Sequencing Problem", in Flow Control of Congested Networks, editado por Odoni, A. R., Bianco, L., Szegő, G., Springer-Verlag, Heidelberg (1986) 323

Haken, H., "Operational Approaches to Complex Systems. An Introduction", in Complex systems - Operational Approaches in Neurobiology, Physics and Computers, editado por Haken, H., Springer-Verlag, Heidelberg (1985) 1.

Jaillet, P., "On Some Probabilistic Combinatorial Optimization Problems Defined on Graphs", NATO ASI Series, editado por Odoni A. R. et al., Springer-Verlag, Heidelberg (1987) F30 255.

Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Vecchi, M.P., Science (1983) 220, 671.

CAPITULO DOS

VIDRIOS DE ESPIN

Todos nosotros hemos jugado con imanes y notado las interacciones de éstos con algunas sustancias como el hierro, de manera que se observan fuerzas de atracción y repulsión, que semejan a las fuerzas electrostáticas.

Un estudio más detallado de este fenómeno nos lleva a la conclusión de que se debe a fuerzas que hoy se conocen como fuerzas magnéticas. El nombre proviene del hecho de que los primeros materiales con estas propiedades fueron encontrados en Magnesia, Asia Menor. Históricamente el estudio del magnetismo comenzó con el estudio de estas fuerzas.

Las propiedades magnéticas de los materiales tienen su origen microscópico en los momentos magnéticos atómicos, que a su vez son debidos a:

- 1) El movimiento de los electrones en las órbitas atómicas.
- 2) El espín electrónico. Esto es, el momento magnético intrínseco del electrón, que puede describirse como un movimiento de giro del electrón sobre sí mismo.
- 3) Los momentos magnéticos de los núcleos atómicos.

Es interesante considerar lo que ocurre al aplicar un

campo magnético externo a los materiales que tienen momento magnético diferente de cero. La presencia del campo tiende a alinear los momentos magnéticos (indistintamente se usarán las palabras "momento magnético" o "espin") según la dirección de éste, y el grado de alineación, que se conoce como la magnetización M , está dada por el momento magnético por unidad de volumen.

En la mayoría de los casos la magnetización inducida (magnetización que adquiere el material cuando es sometido a un campo magnético) es proporcional al campo magnético H , siendo la constante de proporcionalidad la susceptibilidad magnética χ . Entonces se tiene $M=\chi H$.

2.1 CLASIFICACION DE LOS MATERIALES MAGNETICOS

Los materiales magnéticos se clasifican, de acuerdo a su susceptibilidad, de la siguiente manera:

PARAMAGNETISMO: En un material paramagnético los átomos tienen momentos magnéticos permanentes (fig.2.1a). En este caso se encuentra que la susceptibilidad es positiva, muy pequeña, e inversamente proporcional a la temperatura T . Es decir, $\chi=C/T$ donde C es la constante de Curie. Esta relación es conocida como la ley de Curie. Entonces bajo la influencia de un campo magnético los momentos tienden a orientarse en la dirección de campo, lo que induce un campo que refuerza al aplicado. La influencia de un momento magnético sobre sus

vecinos y viceversa, se manifiesta como fuerzas muy pequeñas, y a las temperaturas ordinarias las vibraciones térmicas producen las fuerzas dominantes en el material. Esto da lugar a una orientación al azar de los espines.

La magnetización a una temperatura y un campo magnético dado, está dada por el número de momentos magnéticos alineados paralelamente al campo en exceso sobre el número de los que están alineados antiparalelamente. Es por eso que la magnetización se identifica como un parámetro de orden. A temperaturas muy bajas y campos muy grandes todos los momentos magnéticos están prácticamente orientados en la dirección del campo, en esta situación se llega a una magnetización de saturación, esto es a la magnetización máxima que el material puede tener.

DIAMAGNETISMO: En los materiales diamagnéticos los momentos magnéticos inducidos se oponen al campo magnético externo. Esto resulta en una susceptibilidad negativa. Otra característica importante es que la magnetización es independiente de la temperatura.

FERROMAGNETISMO: Los materiales que adquieren propiedades magnéticas en presencia de un campo externo, y las retienen aún después de que éste se haya anulado se conocen como ferromagnetos.

Este es el efecto magnético más fácilmente observable. Ejemplo de estos materiales son los imanes permanentes, es por esto que históricamente el estudio del magnetismo se originó

con el estudio de sus propiedades.

A diferencia de los paramagnetos y diamagnetos, la magnetización en un ferromagneto depende no sólo del campo aplicado, sino de la historia previa de la muestra. En consecuencia la magnetización y el campo no son necesariamente proporcionales, y por lo que la susceptibilidad no es una constante. Una definición más general de la susceptibilidad se expresa con la relación $\chi = \partial M / \partial H$.

En los ferromagnetos χ es positiva y muy grande. Existen fuertes interacciones entre los espines que les hacen alinearse paralelamente unos a otros (fig.2.1b). Aún a temperaturas ordinarias, los pares orientados son tan grandes que las vibraciones térmicas no destruyen esta alineación. La magnetización máxima obtenida es del mismo orden que la que se presentaría en los materiales paramagnéticos, si todos los momentos estuvieran perfectamente orientados en una dirección dada. Como resultado de esta interacción la energía de los momentos vecinos es mucho menor cuando están alineados paralelamente que para cualquier otra disposición. El ferromagnetismo no existe a todas temperaturas. Al ascender ésta por arriba de una cierta temperatura T_c ($T > T_c$), conocida como la temperatura de Curie el "ruido térmico" resulta suficiente para destruir la alineación de los espines, haciendo con ello que el material cambie su comportamiento al de un material paramagnético, en cambio, si la temperatura T desciende a partir de T_c el material presenta comportamiento

ferromagnético. Arriba de la temperatura de Curie el comportamiento del material está caracterizado por su susceptibilidad, definida por la relación:

$$\chi = C/(T - T_c) \quad (1)$$

conocida como la ley de Curie - Weiss. La susceptibilidad muestra un punto singular a la temperatura $T = T_c$. A esta temperatura (y por debajo) existe una magnetización espontánea ya que χ es infinita para M finita y $H=0$ (fig.2.2a).

ANTIFERROMAGNETISMO: En los materiales antiferromagnéticos no hay un momento total neto en la ausencia de un campo magnético externo, sin embargo hay un arreglo espacial para los momentos magnéticos individuales que está lejos de ser al azar. Esto es debido a que las interacciones magnéticas favorecen orientaciones antiparalelas para espines vecinos (fig.1.1c), lo cual determina el estado de mínima energía, que es único. Se observa que la susceptibilidad magnética χ es independiente del campo magnético externo y que varía inversamente con la temperatura (fig.2.2b). A temperaturas mayores que T_N (temperatura de Néel) el material se convierte en un material paramagnético.

Una manera de visualizar más claramente lo anterior es por medio del hamiltoniano de Heisenberg, quien propuso una explicación teórica a las observaciones. En este modelo se supone que existe un acoplamiento entre los espines vecinos,

donde el acoplamiento es la constante de interacción J_{ij} . El hamiltoniano del sistema representa la energía de éste y está dado por:

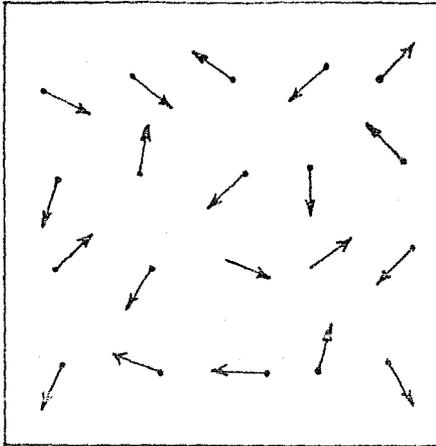
$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - h \sum_i S_i \quad (2)$$

donde el primer término incluye la interacción entre los pares $((i,j))$ de espines S_i y S_j y el segundo término el acoplamiento de los espines con el campo aplicado.

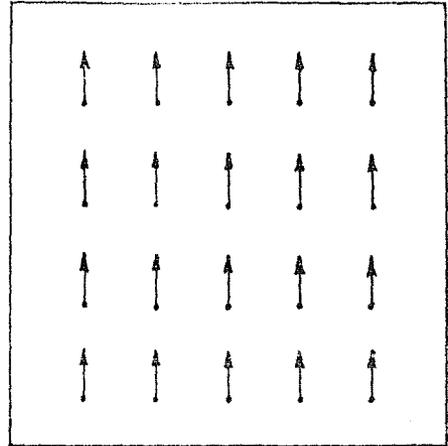
Dentro de este formalismo, se caracteriza un estado microscópico particular por el conjunto $\{S_i\}_{(i=1, \dots, N)}$ de valores tomados por los N espines de los cuales consta el sistema. Este conjunto se especifica definiendo un punto en un espacio N dimensional llamado espacio de configuraciones. También, se considera como modelo más sencillo el modelo de Ising, en el cual se asume que los espines toman los valores $+1$ y -1 .

Si $\{J_{ij}\} > 0$ el estado de mínima energía se dará cuando todos los espines estén paralelos, es decir, se tratará de un sistema ferromagnético. Por otro lado, si $\{J_{ij}\} < 0$ los espines se encuentran orientados antiparalelamente dando lugar al estado de mínima energía del sistema, esto es, el estado antiferromagnético.

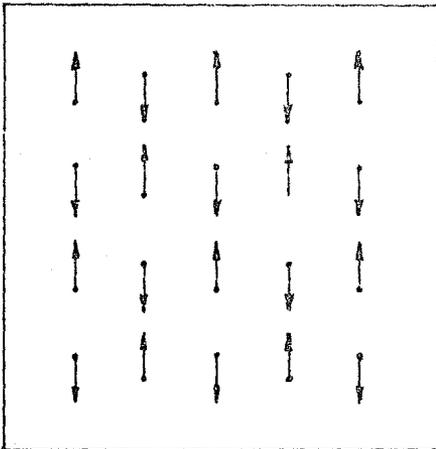
Existe otro tipo de materiales magnéticos que se han venido estudiando en los últimos quince años. Estos son los llamados vidrios de espín, cuyas características difieren de



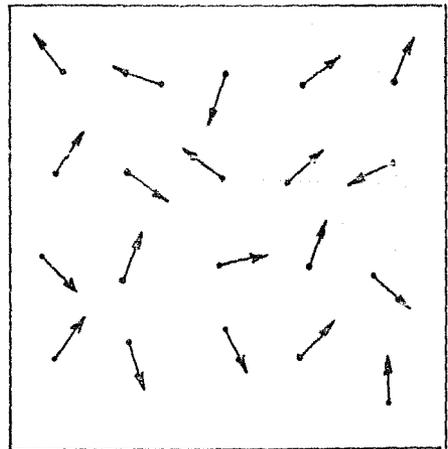
a) Estado paramagnético
(variación de espines en el tiempo)



b) Estado ferromagnético

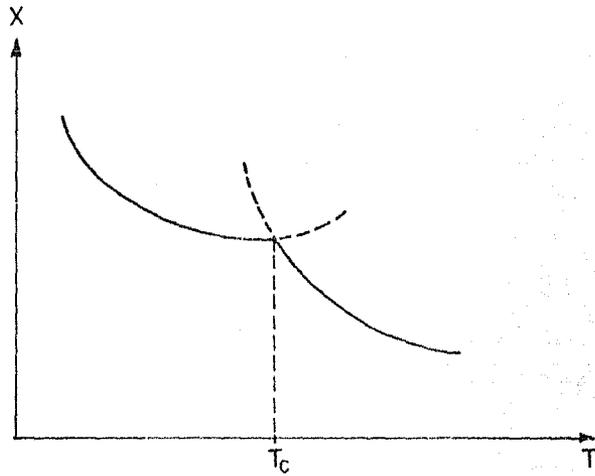


c) Estado antiferromagnético

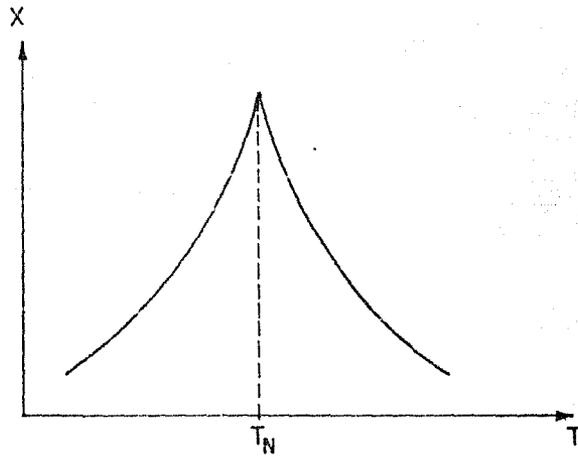


d) Estado de vidrio de espín
(espines congelados en el tiempo)

FIGURA 2.1. Representación esquemática de los espines en diferentes estados.



a) Ferromagneto



b) Antiferromagneto

FIGURA 2.2. Dependencia de la susceptibilidad con la temperatura.

las de los materiales anteriormente mencionados. Estos fueron descubiertos cuando se experimentaba con aleaciones magnéticas diluidas, y algunas de sus características causaron, de inmediato, gran interés: Primeramente se vio que a temperaturas ordinarias mostraban comportamiento paramagnético, en $T=T_{\gamma E}$ (donde $T_{\gamma E}$ es la temperatura de vidrio de espín la cual depende del material) la susceptibilidad magnética muestra un punto singular, lo cual parecería indicar que ocurre una transición de fase a esta temperatura. Sin embargo al observar directamente el sistema (difracción de Bragg) al bajar la temperatura por debajo de $T_{\gamma E}$ aparentemente no se observa diferencia con el estado paramagnético (fig. 2.1d).

2.2 VIDRIOS DE ESPÍN: UN POCO DE HISTORIA

Se les conoce como vidrios de espín debido a que presentan analogía con los vidrios ordinarios en lo que respecta a tiempos de relajación muy grandes y a la azarosidad aparente de los espines.

Los vidrios de espín son una clase de materiales magnéticos en desorden, con interacciones J_{ij} competitivas (algunas de ellas positivas y otras negativas) las cuales son fuente de frustración para el sistema. Como frustración entendemos cuando un espín recibe ordenes de algunos de sus "compañeros" para que se alinie en una dirección y de otros

para que se alinee en otra. Como resultado tendremos que no todos los espines se ponen de acuerdo por lo que a temperaturas bajas no hay una sino muchas configuraciones que corresponden a estados de mínima energía. Toda configuración de mínima energía contendrá muchos pares frustrados.

Un ejemplo para visualizar más claramente la frustración es: Considérese el caso de tres espines (fig.2.3). Asíumase que las ligaduras J_{12} y J_{13} son positivas (ferromagnéticas), mientras que J_{23} es negativa (antiferromagnética). Entonces S_1 y S_2 , y S_1 y S_3 tienden a alinearse paralelamente mientras S_2 y S_3 antiparalelamente. Es claro que es imposible satisfacer estas tres tendencias al mismo tiempo.

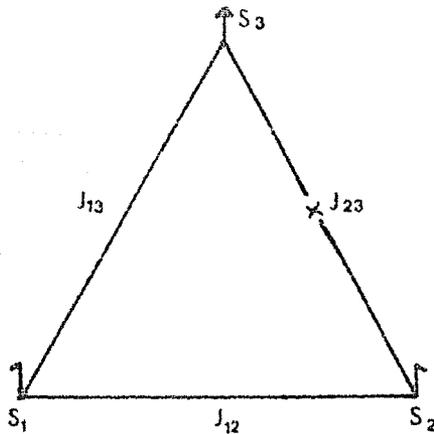


FIGURA 2.3. Triángulo formado por tres espines de Ising, $S_i = \pm 1$ con interacciones J_{ij} .

la constante de interacción puede tomar tanto valores $J_{ij} > 0$ como $J_{ij} < 0$. Esto nos lleva a que S_i y S_j tomen valores iguales o distintos dada a la frustración. El Hamiltoniano es entonces (en el caso de que no haya un campo magnético externo):

$$H_{\text{vs}} = - \sum_{ij} S_i S_j \quad (3)$$

Si fuera posible dar una representación gráfica de este Hamiltoniano (recordemos que se trata de una función discreta en N-dimensiones!) ésta sería del tipo dado en la fig. 2.4 donde en el eje X tendríamos las diferentes configuraciones.

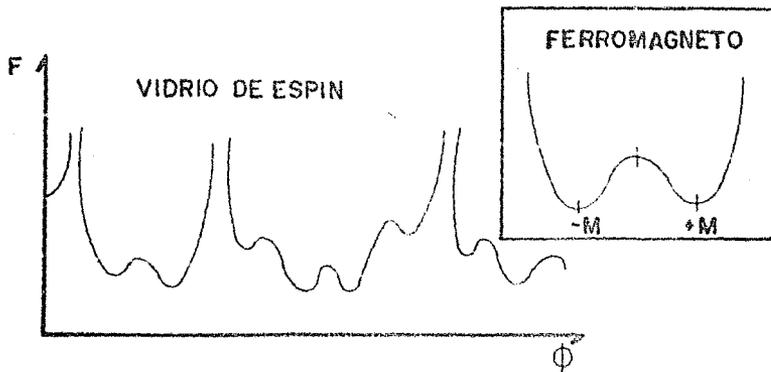


FIGURA 2.4. Representación esquemática de la energía libre como función del espacio N-dimensional de configuraciones. Mientras solo hay dos estados en el material ferromagnético, en los vidrios de espín hay un número muy grande de ellos.

Las primeras observaciones de los vidrios de espín fueron hechas en metales como: Cu, Ag, Au, Zn,....etc. en los cuales una pequeña porción de sus átomos fue sustituida por iones magnéticos tales como: Fe, Mn, Cr, Co,....etc. resultando en aleaciones magnéticas diluidas. El desorden debe ser "templado" de tal forma que los átomos sustituidos tomen lugares fijos al azar. Por "templado" se entiende que las posiciones de las impurezas son congeladas rápidamente cuando el sistema está a temperaturas altas tomando así lugares en forma azarosa.

En estos sistemas la interacción J_{ij} que se presenta es la llamada interacción RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida) la cual es debida a que los iones en el material interactúan indirectamente entre ellos por medio de los electrones de conducción del metal, induciendo un acoplamiento entre los espines magnéticos. A distancias grandes la interacción decae como $1/r^3$ y oscila con un periodo comparable con la distancia de los espines obteniendo valores positivos y negativos.

Posteriormente se encontraron otros tipos de sistemas que exhiben comportamiento de vidrio de espín. Actualmente se sabe que la frustración y el desorden son las características que debe cumplir un material para ser vidrio de espín. Debido al interés que generaron este tipo de sistemas complejos se desarrollaron varios modelos, para tratar de explicar su comportamiento.

2.3 MODELOS.

2.3.1 MODELO DE EDWARDS Y ANDERSON (EA).

Siguiendo el modelo de Ising, en este modelo, los momentos magnéticos de los átomos se aproximan por dos únicos valores, $S_i = \pm 1$.

Debido al carácter oscilatorio de la interacción RKKY no hay en promedio ni antiferromagnetismo ni ferromagnetismo por lo que Edwards y Anderson (1975) sugirieron que existe un estado de mínima energía con espines alineados en direcciones definidas, aunque estas parecieran estar al azar. Esto los llevó a proponer un modelo en el cual el desorden espacial de las impurezas (espines magnéticos) es sustituido por un desorden en la magnitud y signo de las interacciones entre primeros vecinos localizados en una red regular, permitiendo así que los espines estén regularmente espaciados en la red. Entonces, se supone que las interacciones son de corto alcance, y que las ligaduras siguen una distribución Gaussiana. Es decir, que:

$$P(J_{ij}) = (1/2\pi J^2) \exp\{-(J_{ij} - J_0)^2/2J^2\} \quad (4)$$

De acuerdo a lo dicho anteriormente la energía de la configuración microscópica va a estar determinada por el Hamiltoniano (siendo el estado de equilibrio aquel que está

relacionado con el valor mínimo de la energía libre F):

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (5)$$

donde el símbolo $\langle ij \rangle$ quiere decir que la suma corre solamente sobre primeros vecinos.

La contribución más importante de estos autores fue la proposición de un nuevo parámetro de orden "local" que caracteriza al estado de equilibrio dado por:

$$q = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle S_i(0) S_i(t) \rangle \quad (6)$$

con $\langle S_i \rangle = 0$, donde $S_i(t)$ se refiere al espín localizado en i al tiempo t . Esto nos da la correlación de espines en un periodo largo de tiempo en vez de la correlación de largo alcance espacial.

Con este modelo se logró un gran avance, ya que fue posible reproducir teóricamente un punto singular en la susceptibilidad, sin embargo se encontraron valores negativos para la entropía.

2.3.2 MODELO DE SHERRINGTON-KIRKPATRICK (SK).

En un intento de simplificación, Sherrington y Kirkpatrick propusieron reemplazar las interacciones de corto alcance

propuestas en el modelo de E.A por una interacción de largo alcance para los espines de Ising. La interacción fue introducida esperando una "solución exacta" de la teoría de campo promedio para los vidrios de espín.

En este modelo cada espín interactúa con el resto de los espines que lo rodean en el sistema ($z \rightarrow \infty$, n^0 de coordinación), y las interacciones son variables aleatorias independientes que siguen la distribución de probabilidad dada por la ec.4. Dado que J_0 y J son variables intensivas se escalan de la siguiente manera:

$$J_0 = J_0/N \quad J = J/N^{1/2} \quad (7)$$

de donde se pueden obtener variables extensivas como es la energía del sistema.

Tanto en el modelo de E.A como en el de S.K se asume que el desorden en el sistema es "templado". Es por esto que no es correcto promediar la función de partición sobre el desorden sino la energía libre.

La energía libre del sistema esta dada por:

$$-\beta F = \langle \ln Z(J) \rangle \quad \text{con} \quad Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \} \quad (8)$$

donde $\beta = 1/KT$, k constante de Boltzman, Tr es la traza; suma de todos los estados posibles, $H = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j$; con (i,j) suma sobretodos las pares y , $\langle \rangle_j$ promedio sobre las

interacciones.

Debido a las dificultades involucradas en calcular el promedio del logaritmo de una variable aleatoria, Edwards y Anderson consideraron conveniente hacer uso de la relación $\ln Z = \lim_{n \rightarrow 0} (Z^n - 1) / n$. Podemos calcular $\langle \ln Z \rangle$ en términos de $\langle Z^n \rangle$ donde n es un número entero positivo y Z^n es la función de partición de n réplicas del sistema original.

Ahora (en el caso de S.K), utilizando este truco y haciendo algunas manipulaciones matemáticas se obtiene $\langle Z^n \rangle = \int \exp(-N\Gamma) \mathcal{D}q \mathcal{D}m$ en donde Γ es la energía libre expresada como un funcional $F(q_{\alpha\beta}, m_{\alpha\beta})$ donde $q_{\alpha\beta}$ y $m_{\alpha\beta}$ son variables auxiliares, cuyo significado se justifica posteriormente como parámetros de orden.

Para poder obtener los parámetros de orden fue necesario minimizar el funcional $F(q_{\alpha\beta}, m_{\alpha\beta})$ obteniendo así:

$$q_{\alpha\beta} = \langle S^\alpha S^\beta \rangle \quad \text{y} \quad m_\alpha = \langle S^\alpha \rangle \quad (9)$$

donde α, β son índices de la réplica.

Para poder dar una solución de estas ecuaciones, Sherrington y Kirkpatrick propusieron la solución de replica simétrica que asume que todas las réplicas son iguales, esto es:

$$\begin{aligned}
 q_{\alpha\beta} &= q & \alpha \neq \beta \\
 q_{\alpha\alpha} &= 0 & \alpha = \beta \\
 m_{\alpha} &= m
 \end{aligned}
 \tag{10}$$

Finalmente se identificaron los parámetros de orden de S.K y E.A de tal forma que:

$$q_{JK} = q_{SK} \tag{11}$$

Desafortunadamente esta solución demostró ser incorrecta. La primera señal de esto fue inmediatamente reconocida por Sherrington y Kirkpatrick al calcular la entropía a bajas temperaturas notando que de nuevo se obtenía un valor negativo. La solución de Sherrington y Kirkpatrick al modelo que lleva su nombre, predice un diagrama de fases (fig.2.5), tales como la fase paramagnética, ferromagnética y de vidrio de espín.

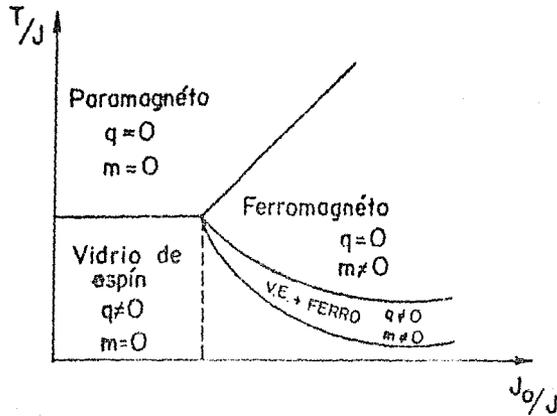


FIGURA 2.5. Diagrama de fase del modelo de Sherrington y Kirkpatrick.

2.4 NO ERGODICIDAD DE LOS VIDRIOS DE ESPIN

Tras un intento de mejorar la solución obtenida por SK en su modelo, Thouless, Anderson y Palmer (TAP 1977) proponen considerar una aproximación sin hacer uso del método de réplicas. Dicha aproximación consistió en una expansión para temperaturas altas ($T > T_{vg}$) complementada por una teoría de campo promedio que toma en cuenta el promedio del espín en cada lugar y la desviación media de este promedio. Esta aproximación los llevó a encontrar un valor no negativo (a diferencia de la solución de SK) para la entropía a $T=0$. Por otro lado, obtuvieron una solución que coincide con la de SK a temperaturas altas. Por debajo de la temperatura crítica de

Los vidrios de espín T_{VE} obtuvieron un número muy grande de soluciones (parámetros de orden) que aumentaba de manera exponencial con el número de espines al bajar la temperatura. Cada solución corresponde a un mínimo local de la energía libre y han sido indentificados como estados metaestables.

Posteriormente, Almeida y Thouless (1977) analizaron la solución de SK y encontraron que a temperaturas bajas la solución era inestable. Por dicha razón, Bray y Moore (1978) con el fin de encontrar una solución estable retomaron el uso del método de réplicas sólo que ahora proponen romper la simetría entre las réplicas. El rompimiento de réplicas se basa en considerar que las réplicas se dividen en dos subconjuntos, razón por la cual habría diferentes casos para los parámetros de orden. Haciendo uso de esta aproximación se encontró que a $T=0$ la entropía seguía siendo negativa, pero a diferencia de la encontrada por el método de réplicas simétricas ésta era mayor.

En 1979, Parisi introdujo un nuevo parámetro de orden basado en las soluciones anteriormente mencionadas. Dicho parámetro propone una solución para el espacio de configuraciones de tipo fractal, es decir,, conforme la temperatura baja el espacio se fracciona continuamente de manera que eventualmente éste queda "congelado" en un estado. Esto significa que el sistema no explora todos los estados posibles en el curso del tiempo, esto es, el sistema es no ergódico y es resultado de que se exhiba rompimiento de

réplicas simétricas en el sistema.

La solución propuesta por Parisi al modelo de SK y EA muestra estabilidad a temperaturas bajas y predice entropía no negativa, por lo que hasta el momento es considerada como la más adecuada para estos sistemas.

A la fecha hay mucha gente tratando de encontrar la solución correcta así como aún hay muchas preguntas que no han sido contestadas en particular la cuestión de que si los vidrios de espín reales (con número de coordinación Z finito) presentan o no transición de fase.

Los vidrios de espín, por todas sus complicaciones deben de ser vistos como una clase de sistemas desordenados cuyo estudio puede contribuir en gran parte a entender la física del desorden.

Se pueden hacer analogías entre los modelos de vidrios de espín y algunos problemas complejos. Una de estas analogías, y quizás la más fascinante es la aplicación de los modelos de vidrio de espín para describir Redes Neuronales.

BIBLIOGRAFIA:

Edwards, S.F., Anderson, P. W., J. Phys.F: Met.Phys. 5 (1975)
965-974

Chowdhery, D., "Spin Glasses and other Frustrated Systems",
Princeton University Press (1986).

Kondor, I., Sci. Prog, Oxford (1987) 71 145-180.

Parisi, G., J.Phys.A:Math.Gen. 13 (1980a) 1101

Parisi, G., J.Phys.A:Math.Gen. 13 (1980b) L115.

Sherrington, D, Kirkpatrick, S., Phys. Rev. Lett. 25 (1975)
1792-1798.

Tholess, D.J., Anderson, P.W. and Palmer, R.G., Phil.Mag. 35
(1977) 593.

Viana, L., (1985) PhD thesis University of Manchester
(1985).

LECTURAS REFERENTES AL TEMA

Ashcroft Neil, Mermin N. David, "Solid State Physics", Holt Saunders International Editions (1986).

Fuller, H., Fuller, R., Fuller, R., "Physics Including Human Applications, San Francisco: Harper and Row (1978).

Gopal E.S.R., "Statistical Mechanics and Properties of Mater", Ellis Horwood Limited (1975).

Hooper H, Gwynne P., "Physics and the Physical Perspective", 2^o ed., San Francisco: Harper and Row (1980).

Kip, "Fundamentals of Electricity and Magnetism", 2^o ed., Mc.Graw-Hill (1969).

Reif Federick., "Fundamentals of Statistical and Thermal Physics, Mc.Graw-Hill Kugakusha,LTD (1965).

Reif F., "Statistical Physics" Berkeley Physics Course VI Mc.Graw-Hill (1967).

Renault, Bertin, Faroux, "Electromagnétisme, IV: Milieux Dielectriques et Milieux Aimantes", Paris: Dunod Université (1984).

CAPITULO TRES

REDES NEURONALES

¿Puede el cerebro entender al cerebro?, ¿Puede entender a la mente?, ¿Es acaso una gran "máquina", como una computadora o algo semejante?. Estas son algunas de las preguntas que nos hacemos acerca del funcionamiento del cerebro.

El cerebro está compuesto de células nerviosas o neuronas cuyo número es del orden de 10^{12} . Una neurona típica consiste del cuerpo de la célula cuyo diámetro se aproxima a 100 micrómetros, de él emanan el axón y las dendritas (fig.3.1). Las señales de entrada de información son recibidas a través de las dentritas en el cuerpo de la célula en donde son "procesadas". La salida de la información es llevada a cabo por el axón, quien la distribuye a un nuevo conjunto de neuronas.

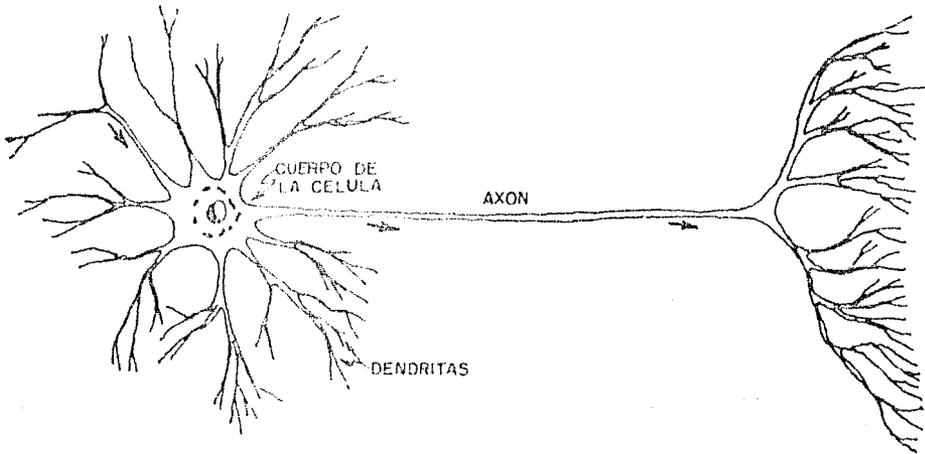


FIGURA 3.1. Dibujo esquemático de una neurona común.

El sistema de señales es doble: eléctrico y químico. La señal generada por la neurona y transportada por el axón es un impulso eléctrico, pero la señal es transmitida de célula a célula por moléculas de una sustancia transmisora que fluye a través de la llamada unión sináptica.

No todas las neuronas tienen el mismo número de sinapsis, mientras unas sólo cuentan con unas cuantas otras tienen cientos de miles.

3.1 GENERALIDADES

El cerebro al parecer no es un órgano cuyo entendimiento es sencillo. Dado que es un sistema muy complejo tanto en su

estructura como en su funcionamiento ha causado desde hace mucho tiempo gran curiosidad en el hombre. Hasta el momento existen varias áreas de la ciencia que están dedicadas al estudio de éste órgano, como son: la anatomía, que se refiere al estudio de como están distribuidos los diferentes elementos del cerebro, la fisiología que estudia cómo funcionan las partes que involucra el cerebro y la manera en las que éstas interactúan, la psiquiatría estudia y trata las desviaciones de la conducta de individuos con respecto a la conducta promedio así como la psicología analiza el modo de razonar y pensar, la física es la encargada de estudiar las señales eléctricas por medio de las cuales la información es transmitida, etc.

Sin embargo, a pesar de que se tiene gran conocimiento del cerebro, no se sabe a ciencia cierta el proceso por el cual se almacena la información. Es aquí, donde recientemente se ha visto que la Física Estadística puede jugar un papel muy significativo, ya que ésta ofrece un procedimiento para estudiar desde un punto de vista estadístico el funcionamiento colectivo de las neuronas para almacenar y procesar la información.

3.2 MODELOS.

Desde hace tiempo se han venido desarrollando modelos simples para describir la manera en que se almacena la

información en el cerebro. Los modelos que se han realizado se justifican principalmente en el número tan grande de neuronas con las que cuenta el cerebro y en que el funcionamiento de éste no se ve afectado a la destrucción de un número reducido de ellas. Ahora bien, se considera que hay en promedio del orden de 10^{15} sinapsis por cerebro. Debido a que cada neurona puede estar activa, si la señal de entrada es más grande que un cierto umbral o inactiva en caso contrario podríamos decir que el cerebro en su totalidad tiene $2^{10^{15}}$ estados posibles.

En el proceso de funcionamiento del cerebro cada neurona ajusta su estado de acuerdo con la suma de señales que ésta recibe del resto de las neuronas que las rodean.

Uno de los dos primeros modelos físicos que surgieron para describir el comportamiento de las redes neuronales fue el propuesto por Hopfield (1982). Al que nos referiremos en lo sucesivo.

Hopfield mostró que existe una analogía entre las redes neuronales (conjunto de neuronas) y los vidrios de espín vistos en el capítulo anterior.

Dicha analogía se consigue si representamos a las neuronas por un ente con dos estados posibles: "activo" ó "inactivo". Estos estados son modelados por los espines de Ising con $S_i = +1(-1)$ respectivamente (de aquí en adelante se hablará indistintamente de espines o de neuronas). La interacción J_{ij} modela a la sinapsis que conecta a la neurona S_i con la

neurona S_j . Como existen sinapsis excitadoras $J_{ij} > 0$ (ferromagnéticas) e inhibitoras $J_{ij} < 0$ (antiferromagnéticas), es posible expresar los estados del sistema por el Hamiltoniano utilizado en los vidrios de espín.

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (12)$$

en donde el primer término incluye la interacción entre las neuronas y el segundo término el acoplamiento de las neuronas con una señal de entrada (en los vidrios de espín sería el campo externo aplicado) como por ejemplo, el sistema sensorial.

También en el capítulo anterior se mencionó que dado que existe una competencia entre las interacciones (J_{ij} mayores y menores que cero) se genera así un espacio de configuraciones muy complicado, es decir, no existe un único estado de mínima energía sino un número muy grande de éstos. En el caso de una red neuronal dichos mínimos actúan como atractores, esto es, dado un estado inicial del sistema éste se relaja llevando una trayectoria que siempre va "cuesta abajo", hasta que alcance un estado estacionario en el espacio de las energías.

Como consecuencia de esto, los mínimos pueden ser considerados como estados memorizados de la red (fig.3.2). Cada estado memorizado implica almacenamiento de información.

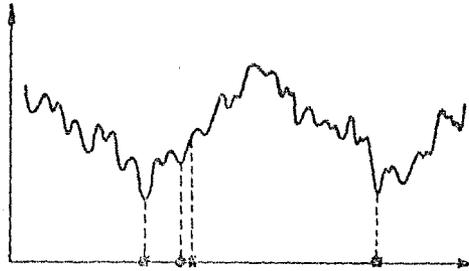


FIGURA 3.2. Representación esquemática de los estados memorizados.

Hasta el momento no hemos dicho nada acerca de la forma explícita que toman las interacciones J_{ij} . La característica principal que distingue a varios modelos es la forma analítica en que se escogen las interacciones J_{ij} para una red. El escoger las interacciones equivale a especificar la posición de mínimos en el espacio de las energías.

El modelo de Hopfield está basado en la regla de Hebb (1949) (en la que se supone que cada espín S_i interactúan con z espines S_j) dado por:

$$J_{ij} = (1/N) \sum_p \xi_i^p \xi_j^p \quad (13)$$

Aquí P es el número de patrones S_i por grabar, y $\{\xi_i\}$ (conjunto de neuronas) es un patrón escogido al azar. La

dinámica de este modelo se introduce como una relajación asincrónica de la energía.

3.3 FUNCIONAMIENTO DE UNA RED.

Hemos estado hablando constantemente de una red neuronal, sin embargo debemos preguntarnos qué características debe cumplir un modelo para describirla con cierto éxito.

Una red neuronal debe tener la capacidad de:

- i) APRENDER (almacenar patrones en la memoria del sistema).
- ii) RECORDAR (recuperar los patrones aprendidos).

El aprendizaje correspondería a la modificación de las sinapsis, esto es, a medida que se aprende algo nuevo las sinapsis reajustan su "fuerza" modificando así el espacio de configuraciones. Esta suposición está respaldada por evidencia experimental, como lo veremos posteriormente.

Por recuperación o remembranza de patrones entendemos que si un estado inicial de la red es $S_i(0)$ y está cercano a un patrón modelo el sistema responde de acuerdo a la dinámica de la ec.12, llevándolo a un estado estacionario S^* , el cual es idéntico o al menos muy cercano al patrón modelo.

Una manera práctica de ejemplificar lo anteriormente mencionado es imaginándonos un paisaje montañoso como analogía al espacio de las energías en los vidrios de espín. En este tipo de paisajes es casi imposible saber cuál es la cuenca más profunda, y menos aún, si nosotros estamos dentro de una de

ellas. Ahora bien, supongamos que de una cuesta dejamos rodar una pelota (¡¡¡que se desliza con mucha fricción!!!). La pelota caerá en la cuenca en la cual se dejó caer y su energía disminuirá a medida que esta caiga. Dicha cuenca equivaldría a un mínimo local tanto de los vidrios de espín como de las redes neuronales. La pelota no cambiará su estado al menos que se le aplique un impulso exterior palabras en la cuenca más cercana permaneciendo ahí hasta que no haya un impulso exterior que cause lo contrario.

Ahora bien, es necesario cuantificar de alguna forma la cantidad de ruido permitida en la recuperación de patrones. Una manera de "medir" que tanto traslape existe entre el patrón modelo (mínimo local de la energía) y el patrón inicial (de entrada) es por medio de la distancia entre el patrón inicial S^p y el patrón modelo S^a . Dicha distancia, que interpreta la fracción de errores, está dada por:

$$d_{a,p} = (1 - q_{a,p})/2 \quad (14)$$

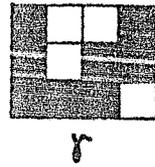
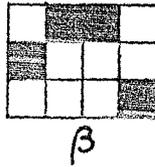
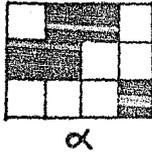
con el traslape:

$$q_{a,p} = (1/N) \sum_i \langle S_i \rangle_a \langle S_i \rangle_p \quad (15)$$

Este traslape es equivalente al parámetro de orden que representa el espacio de configuraciones de los vidrios de espín.

Veámoslo más claramente:

Supongamos que tenemos tres arreglos de 3x4 espines cada uno (fig.3.3) en los que cuadros blancos valen +1 y los cuadros negros -1.



Entonces:

$$d_{\alpha\beta} = (1 - q_{\alpha\beta}) / 2 = .045 \quad \text{con } q_{\alpha\beta} = .91$$

$$d_{\alpha\gamma} = (1 - q_{\alpha\gamma}) / 2 = .95 \quad \text{con } q_{\alpha\gamma} = -.91$$

lo que quiere decir que entre el patrón α y el patrón β hay gran semejanza o lo que es lo mismo tienen una distancia de .045 en cambio, entre los patrones α y γ no existe casi parecido alguno teniendo una distancia de .95.

3.4 SEMEJANZAS Y DIFERENCIAS ENTRE UNA RED NEURONAL Y UNA COMPUTADORA.

Con la experiencia se han logrado visualizar las características tanto de las redes neuronales como de las computadoras. De manera muy general se ha visto que mientras una red neuronal es capaz de resolver problemas aleatorios, la computadora es capaz de hacer operaciones mucho más rápido de lo que lo hace una red neuronal. Dichas operaciones requieren de algoritmos o recetas para poderse efectuar.

Desde el punto vista teórico de la computación, uno se pregunta ¿cuáles son las características de las redes neuronales que son completamente diferentes a las de las computadoras comunes?. Primeramente, las computadoras comunes almacenan información por dirección y las memorias en las redes neuronales son de "memoria asociativa". Una computadora convencional almacena información asignándole a ésta una dirección, la que identifica el lugar en donde el dato va a ser almacenado en el disco o cinta magnética. Cuando el procesador central requiere un dato, él da instrucción de leerlo en una dirección particular. La dirección por si misma no contiene información sobre la naturaleza del dato almacenado ahí.

Ahora, reflexionando un poco sobre nuestra memoria. Si nosotros pensamos sobre un amigo en particular, vamos a

recordar varios hechos como; nombre, edad, color de pelo, altura, trabajo, familia, casa, historia personal,.....,etc. Estas características de alguna manera son combinadas en "la mente" para formar la memoria del individuo. Para recordar, a veces se da el caso de que estos datos no son suficientes para relacionar a quien le pertenecen, entonces, sería necesario otro tipo de fuente, como por ejemplo, escuchar la voz, la cual a lo mejor es un característica más fuerte para recordar al individuo.

Lo que se quiere decir con todo esto es que en la mente humana no hay almacenamiento de la información por dirección sino por contenido de manera que existen muchos caminos para llegar a ella.

3.5 ¿QUE SE INVESTIGA ACTUALMENTE?

En los últimos años el interés en las redes neuronales ha aumentado enormemente. Este interés se debe por un lado, a un intento de mejorar la arquitectura computacional actual, y por otro en tratar de emular, lo más cercano posible, a la mente humana.

Es bien sabido que las computadoras tradicionales, e inclusive las supercomputadoras, las que poseen varios procesadores que trabajan en paralelo, no son adecuadas para resolver cierto tipo de problemas que para un humano son tarea sencilla.

Ya hemos dicho que las computadoras funcionan a base de algoritmos o recetas. Estos algoritmos han sido diseñados teniendo en mente las arquitecturas computacionales tradicionales. Existe una rama de la computación que se conoce como inteligencia artificial. La inteligencia artificial consiste en hacer programas que hagan que las máquinas exhiban ciertas características de "inteligencia". Es importante ser un poco más específicos acerca de este término. La inteligencia del hombre se caracteriza por un comportamiento adaptivo, orientado por metas. Esto es, tiene capacidad de actuar eficientemente en situaciones nuevas mediante el entendimiento y el razonamiento. Con el uso de la inteligencia artificial se han logrado progresos significativos en intentos de simulación de algunas características de la mente humana. Algunos de estos logros son:

- Decisiones: Ha sido posible programar computadoras para la toma de decisiones en problemas complejos no numéricos. Por ejemplo, en juegos de ajedrez.

- Procesado de lenguaje natural: Algunos aspectos del lenguaje, tales como la sintaxis han sido procesados por programas de computadora. Otros aspectos han sido más difíciles o imposibles de procesar, debido a que involucran la ambigüedad inherente del lenguaje común.

- Reconocimiento de patrones: Con éxito moderado, se ha logrado la identificación de escritura, mapas y espectros de voces. Sin embargo, siguen siendo un reto la implementación de

ciertas funciones como la percepción, la abstracción, el aprender de la experiencia, etc.

Un aspecto de la inteligencia artificial de gran importancia tecnológica son los sistemas expertos que aproximan al hombre en su desempeño. El ejemplo más conocido de estos sistemas son los robots. Hay dos tipos de robots: los de trayectoria programada y los llamados robots inteligentes. Los primeros, generalmente se utilizan en la industria automotriz para soldar, pintar, y otras operaciones rutinarias y tediosas, o en las que se requiere rapidez y precisión que el hombre es incapaz de alcanzar. Por otro lado, un robot inteligente debe ser capaz de planear sus propias acciones, y poseer un sistema sensorial. Desafortunadamente, no ha sido posible la creación de este tipo de sistemas, aunque, como ya hemos dicho, se han conseguido logros significativos con robots no inteligentes los que cumplen con ciertas características limitadas de inteligencia. Dichos robots están equipados con programas o "software" (palabras que usaremos indistintamente) especializado para que cumplan con tareas muy específicas.

* Se usarán los anglicismos "software" y "hardware" debido a que éstas son las palabras utilizadas comúnmente en el lenguaje para representar a los programas y a las componentes de una máquina respectivamente. Las palabras correctas en el español son programas y circuitería.

Tales programas, como todos los escritos para arquitecturas computacionales convencionales, están basados en el uso de algoritmos concretos con instrucciones precisas a seguir. Típicamente, las decisiones que hay que tomar para resolver el problema están descritas por árboles de toma de decisiones. La evaluación de las decisiones depende de los pesos de las ramas, que reflejan la importancia relativa de estas.

Por otro lado, si el propósito es lograr artificialmente algunas funciones neuronales tales como las sensoriales, las motoras y algún tipo de "proceso interno", es necesario tomar una ruta radicalmente diferente. Es por ésto que las redes neuronales han causado tanto interés, pues rompen con los esquemas convencionales, y tienen arquitecturas más apropiadas para implementar las funciones que recién mencionamos. Este tipo de sistemas consisten en redes compuestas por elementos simples, interconectados de tal manera que, idealmente, simulan la estructura del sistema nervioso. El almacenamiento de la información en dichas redes se realiza al modificar las interacciones entre los elementos ("neuronas").

Las arquitecturas de las redes neuronales artificiales (redes computacionales) que se han propuesto hasta ahora, representan aproximaciones sumamente simplificadas de los sistemas biológicos a los cuales éstas tratan de modelar. Debido a que la arquitectura funcional de los sistemas biológicos aun no ha sido comprendida completamente, debe entenderse que las arquitecturas de las redes neuronales

artificiales representan especulaciones en lo que concierne a la estructura real del cerebro.

Las neuronas pueden ser representadas por elementos de hardware* tales como componentes electrónicas u ópticas. También pueden existir como programas que eventualmente correrán en un hardware apropiado. Similarmente, las interacciones se resuelven por medio de hardware o software. En realidad, este tipo de sistemas son modelos simplificados del sistema nervioso del hombre, que exhiben habilidades tales como:

- Aprendizaje: En esta disciplina no se requiere que las redes neuronales tengan descripciones cuantitativas de objetos a ser reconocidos, ni conjuntos de criterios lógicos para distinguir este objeto de objetos similares. En lugar de esto, se le muestra a la red neuronal ejemplos de objetos (caras, partes, escenas) junto con sus identificaciones. Esto se va a memorizar de tal manera que se produzca una respuesta apropiada cuando el objeto se vuelva a ver. Esta habilidad tiene implicaciones profundas en el reconocimiento de patrones.

- Generalización: En el proceso de reconocimiento de imágenes una característica frustrante de las computadoras convencionales, es que las presentadas deben corresponder de manera muy precisa con alguna imagen aprendida por la computadora, y así tener la respuesta deseada. Por otro lado, las redes neuronales pueden tolerar variaciones en sus

imágenes de entrada y aun así producir la respuesta correcta. Un ejemplo de esto sería un sistema entrenado para reconocer letras impresas.

- Abstracción: Las redes neuronales pueden abstraer el "ideal" de un conjunto de prueba no ideal. Supongamos, por ejemplo, que entrenamos a una red para reconocer el alfabeto mostrándole sólo imágenes con mucho ruido. Después del entrenamiento el sistema puede reconocer un caracter deformado y producir en la salida un caracter perfectamente bien formado. Esto a pesar de que al sistema jamás se le mostró el caracter bien formado.

Es importante enfatizar que las redes neuronales no son sólo otra técnica computacional. Estas representan un avance significativo en la manera de resolver cierto tipo de problemas. Constituyen un modo de computación que es fundamentalmente diferente y que tiene un gran número de ventajas y aplicaciones. Se ha visto que estas máquinas tienen características análogas a la inteligencia del hombre pues son capaces de resolver problemas que una computadora convencional solamente puede atacar con limitaciones, y los cuales un niño de cinco años puede hacer con facilidad.

La investigación en redes neuronales es de carácter interdisciplinario, pues involucra gentes dedicadas a la Computación, a la Electrónica, a la Ingeniería, a la Biología, a la Física y a las Matemáticas.

Dentro de la Física, ha habido gran interés en los

modelos de vidrio de espín de largo alcance (como se ha mencionado a lo largo de este capítulo), debido a que es posible hacer una analogía entre éstos y las redes neuronales. Estos sistemas han servido para modelar las redes neuronales por medio de recetas para las matrices de interacción (Hopfield 1982, Amit et al. 1985-1987, Mezard et al. 1986, Gardner 1986, Bruce et al. 1987), ya que las interacciones definen los mínimos del sistema, o puesto de otra manera, la información almacenada.

Un hecho interesante es que en estas redes, la información puede ser recuperada por contenido y no por dirección. Esto ha llevado a trabajos en los que se analiza con mucho detenimiento ciertos puntos, como son:

- Capacidades máxima y óptima de almacenamiento en base a márgenes aceptables de error.
- Estudio de diferentes esquemas de aprendizaje.
- Estructura del espacio de configuraciones.

Uno de los puntos de mayor importancia en la actualidad es el de encontrar una manera óptima de proponer y evaluar las reglas de aprendizaje para las interacciones $\{J_{ij}\}$. Se han considerado reglas de varios tipos, entre ellas podemos mencionar las de tipo local, no local, simétricas, antisimétricas, lineales, no lineales.

Los puntos que hemos mencionado forman parte de un gran número de problemas que hasta la fecha no han podido ser resueltos del todo. Sin embargo, se han desarrollado modelos

que son de gran utilidad para entender más acerca de este fascinante problema: las redes neuronales.

Finalmente, este campo de investigación se ve muy prometedor, no sólo desde el punto de vista de la investigación básica en neurociencia y reconocimiento de patrones, sino también en el desarrollo de la próxima generación tecnológica de computadoras. Dichas computadoras serán capaces de aprender en base a la experiencia y de recuperar información en base a su contenido y no por una dirección.

BIBLIOGRAFIA:

Amit, D. J., et al., Phys. Rev. Lett. 55 (1985a) 1530.

Amit, D. J., et al., Phys. Rev. A32 (1985b) 1007.

Amit, D. J., et al., Phys. Rev. A35 (1987) 2293.

Bruce A. D., et al., "Proc. Conf. on Neural Networks for Computing" ed. J S Denker (New York) (1986) 65.

Bruce A.D, Gardner E y Wallace D.J., J. Phys. A: Math. Gen. 20 (1987) 2909.

Diederich S. y Oppen M., Phys. Rev. Lett. 58 (1987) 949.

Gardner E. J. Phys. A: Math. Gen. 19 (1986) L1047.

Gardner E. Europhys. Lett. 4 (1987) 481.

Gardner E. J. Phys. A: Math. Gen. 21 (1988) 257.

Hebb, D.C., "The Organization of Behavior" Wiley, New York (1949).

Van Hemmen J. L. y Kuhn R., Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 913.

Hopfield, J.J., Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 79 (1982) 2554.

Hubel, D.H., The Brain, Sci. Am., 241 (1979),.

Mézard M, Nadal J. P. y Toulouse G., J. Physique 47 (1986) 1457.

Wallace D.J., Lattice Gauge Theory - a Challenge to Large Scale Computing, editado por Bunk and K H Mutter, New York (1986).

LECTURAS RELACIONADAS

Abbis, J.B. and Brames, B.J., Paper Presented at SPIE Symposium on Innovative Science and Technology (1988).

Abu-Mostafa, Y. and Psaltis, D., Sci. Am. (1987) 88.

Anderson, J.A., (1986) Nature 322 (1986) 406.

Denker, J.S., (1986) Physica 220 (1986) 216.

Grossberg, S., Neural Networks 1 (1988) 17.

Hopfield, J.J., Proc. Natl. Acad. Sci. USA 79 (1982) 2554.

Hopfield, J.J. and Tank, D.W., (1986) Science 233 (1986)
625.

Kinzel, W., Z. Phys. B60 (1985) 205.

Kinzel, W., " Spin Glasses as Model Systems for Neural
Networks", Lecture Notes for the International Symposium on
Complex Systems, Springer-Verlag, Heidelberg (1985).

Kohonen, T., Neural Networks 1 (1988) 3

Peretto, P., Biol. Cybern. 50 (1984) 51.

Rumelhart, D.E., Hinton, G.E., Williams, R.J., Nature 323
(1986) 533.

Sutherland, S., Nature 323 (1986) 486.

Tank, D.W. and Hopfield, J.J., Sci. Am. (1987) 104.

Toulouse G., Nature 327 (1987) 662.

Viana, L., J. Phys. (France) 49 (1988) 167.

Wasserman, P. y Schwartz, T., IEEE Expert 2 (1988) 10.

Wasserman, P. y Schwartz, T., IEEE Expert 3 (1988) 10.

CAPITULO CUATRO

METODO DE MONTECARLO

En la Física es frecuente encontrar problemas que involucren sistemas en los cuales el número de variables es muy grande. Tal es el caso de los electrones en un sólido, de las moléculas de un gas en un recipiente, . . . , etc. Muchos de estos problemas se pueden describir formalmente en términos de integrales cuya dimensión es grande, por ejemplo, del orden de $3N$, siendo N el número de partículas. El tratar de resolver dichas integrales por métodos numéricos está fuera de discusión. Para ilustrar esto, supongamos que un problema físico se ha logrado reducir a la evaluación de una integral en M dimensiones y que cada coordenada tome 10 diferentes valores, entonces el integrando debe ser evaluado en 10^M puntos. Para un valor de $M=60$ y una computadora muy rápida capaz de hacer 10^7 evaluaciones por segundo, esto tomaría aproximadamente 10^{53} segundos, ¡más de 10^{34} veces la edad del universo!.

Algunos de estos problemas se pueden tratar en forma analítica acudiendo a ciertas aproximaciones como son: la

teoría de campo promedio, el método de punto silla, la teoría de perturbaciones que utiliza aproximaciones restrictivas, es decir, perturbaciones pequeñas. Otra posibilidad que en general involucra aproximaciones menos restrictivas es el llamado METODO DE MONTE CARLO (MMC). Con este método también es posible estudiar problemas que no pueden ser resueltos por métodos analíticos, como es el caso de los llamados sistemas complejos.

4.1 ORIGENES DEL METODO

El nombre de Monte Carlo se debe a una población del principado de Mónaco, la cual ganó su fama en el mundo como la capital de la ruleta. Podríamos encontrar una relación entre el método y la ruleta, considerando que el elemento principal del MMC es una rueda que decide la suerte.

Desde hace mucho tiempo la base teórica del MMC era bien conocida. Es más, algunos problemas de estadística se resolvían empleando muestras aleatorias, esto es, aplicando de hecho el método de Monte Carlo. Antes de la aparición de las máquinas computadoras este método no encontraba aplicaciones suficientemente amplias ya que el proceso de simulación de variables aleatorias "a mano" es un proceso muy laborioso (como tirar 10^3 veces un dado). Actualmente los matemáticos han mejorado esto. No hay una rueda que gire como es el caso de la ruleta pero sí programas de computadora llamados

"generadores de números aleatorios" que hacen el papel de la ruleta.

4.2 DEFINICION

El MMC es la solución que representa un parámetro hipotético en un problema. Se usa una secuencia de números azarosos de tal manera que la muestra de la población permita estimaciones estadísticas de los parámetros.

Sí, como ya se mencionó anteriormente el MMC es un método numérico que permite simular cualquier proceso cuya marcha dependa de factores aleatorios. También permite resolver problemas, por ejemplo en el área de matemáticas, que no tengan la menor relación con cuestiones aleatorias, inventando un método probabilístico artificial que permita la solución de estos problemas.

4.3 EJEMPLO DEL METODO

En un principio se mencionó que la meta era calcular cantidades que aparecen como resultados de integrales cuya dimension es muy grande. Una forma de ilustrar esto es considerando un problema simple en una dimensión.

Supongamos que se debe evaluar la integral:

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad a < x < b \quad (16)$$

Existen diferentes fórmulas para evaluar dicha función en valores muy particulares de x , pero también es posible conocer el valor de la integral I pensando en el promedio de f en el intervalo $[a,b]$, esto es, puede ser calculada escogiendo al azar n puntos x_i del intervalo $[a,b]$ distribuidos uniformemente. Por lo que obtendríamos:

$$I = (1/n) \sum_1^n f(x_i) \quad (17)$$

Llamémosle "muestreo sin problemas" a la forma en que se muestrea en este ejemplo, que consiste en considerar que todos los puntos en donde la función es evaluada son escogidos uniformemente, a pesar de que la función no se especifique, y esto nos llevaría a tener una estimación más o menos eficiente de la función.

Bien, ahora supongamos el caso en el que la función $f(x)$ no es una función uniforme, por ejemplo $f(x) = e^{-x^2}$, es claro que las colas de la función van a contribuir insignificadamente en el promedio, por lo que sería más eficaz muestrear la función en los puntos que más contribuyen.

Por ejemplo, si nosotros deseáramos saber el promedio de estaturas de las gentes del mundo, no sería adecuado escoger una persona como representante de cada país dado que el número de habitantes de país en país varía enormemente; entonces lo conveniente sería escoger un número de representantes de cada país proporcional al número de habitantes que éste tiene, para

así tener una aproximación más cercana al valor promedio de las estaturas.

En nuestro caso escogeríamos los puntos con una cierta probabilidad $p(x)$. Supongamos que podemos construir una función $p(x) > 0$ tal que cumpla con las características de $f(x)$ y que pueda ser evaluada analíticamente.

$$\int p(x)dx = 1 \quad (18)$$

entonces obtenemos:

$$1 = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b [f(x)/p(x)]p(x)dx \quad (19)$$

Con todo esto hemos llegado a la idea de muestreo por importancia ya que es posible escoger los puntos x_i de acuerdo con $\int p(x)dx$ en vez de escogerlos uniformemente.

Dado que nuestro interés de entender la herramienta que proporciona el MMC es principalmente en física estadística, dejaremos el problema anterior para así poder dar más énfasis al propósito deseado.

4.4 PROBLEMAS QUE PERMITE RESOLVER EL METODO

Para simular un problema en física estadística y resolverlo por medio de MMC es necesario empezar dando una descripción del sistema en términos de su Hamiltoniano. Posteriormente se selecciona el ensamble asociado a dicho

sistema, ya sea el ensamble microcanónico, canónico, grancanónico, ..., etc., para así poder calcular cualquier observable como la temperatura, el volumen y otros usando la función de distribución apropiada y la función de partición. En general la idea es muestrear la contribución principal para obtener una estimación de la observable.

Veámoslo más claramente.

Sea N el número de partículas. Asociado con cada partícula i existe un conjunto de variables dinámicas $\{s_i\}$ que representan los grados de libertad. El conjunto $\{s_i\} = (s_1, \dots, s_N)$ describe el espacio de configuraciones. Sea x un punto en el espacio de configuraciones. Asumimos que el sistema está gobernado por un Hamiltoniano $H(x)$, que representa la energía del sistema.

Se desea calcular la observable A del sistema. Sea $f(\cdot)$ el ensamble apropiado, por ejemplo $f(\cdot)$ puede ser la función de distribución del ensamble canónico. Entonces, A se calcula como:

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \int_n a(x) f(H(x)) dx \quad (20)$$

donde

$$Z = \int_n f(H(x)) dx \quad (21)$$

es la función de partición.

Para calcular $\langle A \rangle$ nos hemos encontrado con el problema de

que se tiene que calcular un integral cuya dimensión es grande. Si la calculamos por medio del MMC la única aproximación necesaria es considerar que el espacio de configuraciones es discreto.

Dado que en este ejemplo el ensamble escogido es el ensamble canónico tenemos que la función de partición correspondiente está expresada por:

$$f(H(x)) \propto \exp(-H(x)/k_b T) \quad (22)$$

Aquí, los estados del sistema no contribuyen uniformemente ya que los estados correspondientes a valores grandes de H tienen una contribución pequeña en la integral mientras que otros estados contribuyen de manera significativa. Bajo estas características esperamos que la función esté distribuida alrededor del valor medio de $H(x)$. Ahora supongamos que calculamos la integral seleccionando al azar estados x y sumando todas sus contribuciones. Pero sabemos que el espacio de configuraciones es muy grande por lo que necesitamos un número tremendo de estados, de los cuales su contribución en la suma:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i A(x_i) f(H(x_i))}{\sum_i f(H(x_i))} \quad (23)$$

puede ser despreciable.

Para³ reducir el problema a un nivel más manejable, hacemos

uso de la idea de muestreo por importancia mencionada anteriormente en el problema de la integral en una dimensión. En ese caso los puntos no se toman en el espacio de configuraciones al azar sino con una cierta probabilidad, por lo que la ec.23 se convierte en:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_i^N A(x_i) P^{-1}(x_i) f(H(x_i))}{\sum_i^N P^{-1}(x_i) f(H(x_i))} \quad (24)$$

escogiendo:

$$P(x) = Z^{-1} f(H(x)) \quad (25)$$

Aceptando esto tenemos que el cálculo de A se reduce a un simple promedio aritmético;

$$\langle A \rangle = (1/N) \sum_i^N A(x_i) \quad (26)$$

Hasta aquí todo ha sido relativamente sencillo, pero ahora surge la pregunta ¿Cómo generar estados distribuidos de acuerdo con $P(x) = Z^{-1} f(H(x))$?

Para dar una respuesta a dicho problema Metrópolis et al. (1949) propusieron la idea de usar una cadena de Markov, con la cual es posible construir una caminata al azar de puntos x , en el espacio de tal forma que $P(x)$ tienda a $P_{eq}(x)$ a medida

que $M \rightarrow \infty$, i.e. que tienda al equilibrio termodinámico.

El proceso de Markov es especificado definiendo la probabilidad de transición de un estado x del sistema a otro estado x' del mismo, denotada por :

$$W(x, x') \quad (27)$$

Dado que el proceso de Markov tiene la propiedad de que converge a $P_{eq}(x)$, es suficiente (más no necesario) proponer la condición de balance detallado:

$$P_{eq}(x)W(x, x') = P_{eq}(x')W(x', x) \quad (28)$$

lo que significa que la razón de las probabilidades de transición depende únicamente del cambio en las energías $H = H(x') - H(x)$, esto es:

$$W(x, x')/W(x', x) = \exp(-\tau H/k, T) \quad (29)$$

La ec. 30 no especifica a $W(x, x')$ de manera única por lo que comunmente se utilizan expresiones que cumplan con ciertas características como son:

- i) Para un par de conjuntos $\{S, S'\}$, existe $x \in S$ y $x' \in S'$ tal que $W(x, x') \neq 0$.
- ii) Para todo x, x' : $W(x, x') > 0$.
- iii) Para todo x : $\sum W(x, x') = 1$.
- iv) Para todo x : $\sum W(x, x') P(x) = P(x)$.

La primera relación implica que existe conexión entre los estados. La segunda, implica que la probabilidad de transición entre dos estados es siempre positiva. La tercera restricción implica conservación, es decir, la probabilidad total de que el sistema esté en algún estado es 1, y por último la cuarta nos dice que la distribución límite es la distribución de equilibrio, a la cual se desea que los estados tiendan.

Comúnmente se sugiere definir la probabilidad de transición de tal forma que involucre cocientes como por ejemplo;

$$\begin{aligned}
 W(x, x') &= 1/2\tau_s [1 - \tanh(\delta H - 2k_B T)] \\
 &= (1/\tau_s) \exp(-\delta H/k_B T) / H \exp(-\delta H/k_B T)
 \end{aligned}$$

o

(30)

$$W(x, x') = \begin{cases} (1/\tau_s) \exp(-\delta H/k_B T) & \text{si } \delta H > 0 \\ (1/\tau_s) & \text{para otro caso} \end{cases}$$

4.5 ALGORITMO DE METROPOLIS ET AL.

Bien, ahora veamos cómo el algoritmo de Metropolis et al. se realiza en la práctica.

Se empieza especificando una condición inicial para el conjunto de variables dinámicas $\{\alpha_i\}$. En principio esta especificación es escogida al azar. Después, se selecciona una partícula (i) para la cual una (o varias) variables dinámicas van a cambiar al azar de α_i a α_i' . La partícula (i) es seleccionada para ir a través del arreglo de partículas ya sea regular o azarosamente.

El movimiento $\alpha_i \rightarrow \alpha_i'$ es la transición denotada formalmente por $x_i \rightarrow x_i'$ en la ec.27. Se calcula el cambio de la energía H producida por la prueba, y la probabilidad de transición W . Después uno selecciona un número al azar R en el intervalo $0 < R < 1$. Si $W > R$ el movimiento es rechazado, y se acepta el estado con la antigua configuración (α_i) ; contándolo de nuevo como un "nuevo" estado en el promedio ec.29. Si $W < R$, el movimiento es aceptado, i.e. el estado con la nueva configuración (α_i') se acepta como nuevo en el promedio.

Este procedimiento se repite varias veces, de tal forma que se genera una cadena de Markov de M elementos.

Resumiendo:

- 1.- Se especifica un punto inicial x en el espacio de configuraciones.

- 2.- Se genera un nuevo estado x' .
- 3.- Se calcula la probabilidad de transición $W(x,x')$ y la energía $H(x)$.
- 4.- Se genera un número al azar R entre 0 y 1.
- 5.- Si la transición de probabilidad W es menor que R , se cuenta el viejo estado como nuevo y se regresa al paso 2.
- 6.- En otro caso se acepta como nuevo estado y se regresa al paso 2.

El hecho de que la transición de probabilidad dependa únicamente de la razón de las probabilidades nos lleva finalmente a que la distribución de los estados corresponda a la distribución de equilibrio.

$$Z^{-1}f(Hx)) \quad (31)$$

porque $P(x)=Z^{-1}f(H(x))$ nos dice que la constante de proporcionalidad Z , que es la función de partición no está involucrada en la probabilidad de transición. Sin embargo esto es lo que hace que la aproximación sea flexible. Ahora bien, el precio que hay que pagar es que la función de partición, por sí misma, no es accesible directamente en la simulación. Esto trae como consecuencia, por ejemplo, que tanto la energía libre $F=-k_B T \ln Z$ como la entropía $S=(U-F)/T$ no puedan ser calculadas directamente.

Las principales limitaciones del MMC estriban en el número de

partículas que se pueden manejar de manera eficiente en la computadora. Sin embargo la extrapolación de los resultados a sistemas con un número de partículas característico de los sistemas microscópicos reales (límite termodinámico), se puede simular con el uso de "trucos" por ejemplo, el empleo de condiciones periódicas a la frontera del sistema, etc.

BIBLIOGRAFIA:

Bhanot, G., "The Metropolis Algorithm", Rep. Prog. Phys. 51 (1988) 429.

Binder, et al., "Introduction: Theory and "Technical" Aspects of Monte Carlo Simulation", Monte Carlo Methods in Statistical Physics, editado por Binder, K., Springer-Verlag, Heidelberg (1979) 1.

Heermann, D.W., "Monte Carlo Methods", Computer Simulation Methods in Theoretical Physics, Springer-Verlag, Heidelberg (1986).

Metropolis, N., Ulam, S., "The Monte Carlo Method" (1949) J. Amer., Stat., Assoc., 44 (1949) 335.

Mouritsen, O.G., Computer Studies of Phase Transitions and Critical Phenomena Springer-Verlag, Heidelberg (1975).

Sobol, I.M., "The Montecarlo Method" Mir Publishers, Moscow (1985).

CAPITULO CINCO

UN PROBLEMA CONCRETO DE REDES NEURONALES

En capítulos anteriores, mencionamos que el cerebro ha sido objeto de estudio de diversas disciplinas que van desde la biología, la física, la anatomía, la fisiología, la química, hasta la psicología, la psiquiatría, la filosofía, etc. También mencionamos que el uso reciente de la Física Estadística ha sido de gran ayuda para entender aspectos del funcionamiento del cerebro que ninguna otra disciplina había podido explicar, tales como el almacenamiento de información.

La información, en este tipo de redes, es almacenada como "memoria asociativa" que corresponde a propiedades colectivas de un gran número de neuronas. Estas propiedades sirven para almacenar información que puede ser extraída por contenido y no por dirección como ocurre en las computadoras convencionales. De esta manera vemos que con gran rapidéz una memoria puede ser "identificada" a partir de una señal de entrada con información incompleta o deformada, o con ruido y fallas (fig.5.1).

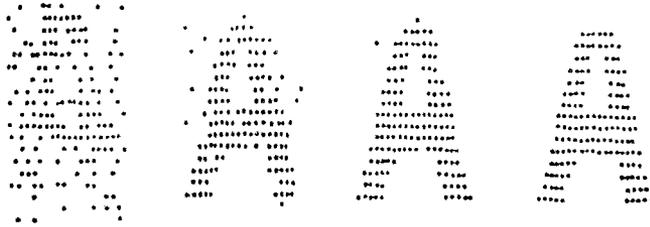


FIGURA 5.1. Patron "A" con 30% de ruido se relaja a un patron aprendido en 4 etapas.

En este capítulo daremos una idea de cómo se lleva a cabo la investigación numérica de problemas relacionados con propiedades colectivas de un número muy grande de "elementos".

Como se mencionó en su oportunidad, es posible asignar un Hamiltoniano a las redes neuronales haciendo una analogía con los vidrios de espín vistos en el capítulo dos. Dicha analogía consiste en representar a las neuronas por dos estados: "activo" ó "inactivo", los cuales son modelados por los espines de Ising con $S_i = \pm 1$ respectivamente. Por otro lado, la interacción existente entre la neurona i y la neurona j está dada por J_{ij} , de manera que la interacción toma valores positivos si es excitadora ($J_{ij} > 0$) y negativos si es

inhibidora ($J_{ij} < 0$). Finalmente, la temperatura T en los vidrios de espín, se hace corresponder en una red neuronal, a una función de ruido que depende entre otros factores de la temperatura real.

El hecho de que exista competencia entre el conjunto de interacciones $\{J_{ij}\}$ da lugar a que el Hamiltoniano tenga muchos mínimos en el espacio de configuraciones. Estos mínimos actúan como atractores dinámicos del sistema y funcionan como memorias aprendidas. Hay dos tipos de memorias: las memorias puras y las memorias espurias en donde estas últimas se caracterizan por ser mezcla de memorias puras y entorpecen el proceso de recuperación de la información.

5.1 INTRODUCCION AL PROBLEMA

El aprendizaje es una propiedad interesante en una red. Para un conjunto apropiado de las interacciones $\{J_{ij}\}$ la red funciona como memoria asociativa tolerando ciertos defectos.

El hecho de que la información pueda ser recuperada por contenido ha sido motivo para analizar más profundamente diversos puntos, como son: El estudio de diferentes esquemas de aprendizaje, capacidades máxima y óptima de almacenamiento en base a márgenes aceptables de error, estructura del espacio de configuraciones, número de memorias por almacenar de tal manera que no se borre la información ya aprendida, etc.

Sobre este último punto ya se han adaptado tratamientos

analíticos utilizados anteriormente en los vidrios de espín, así como métodos tipo Monte Carlo.

Dentro de los puntos ya mencionados, uno de los que ha tomado mayor importancia en la investigación actual es el de proponer y evaluar diferentes reglas de aprendizaje para $\{J_{ij}\}$. Se han propuesto reglas de aprendizaje de tipo local, no local, lineales, no lineales, simétricas, no simétricas, etc.. Biológicamente las más realistas han sido las de tipo local, ya que considera que el valor de la interacción J_{ij} entre dos neuronas (i,j) es función únicamente de lo que ha sucedido a dichas neuronas. Por otro lado, aunque haya interacciones menos realistas desde el punto de vista biológico pueden tener ventajas para la implementación del diseño de computadoras, razón por lo que sería interesante estudiarlas.

Todos estos modelos de redes neuronales (tipo vidrio de espín) suponen que la eficiencia de las interacciones (sinapsis) es modificada durante el proceso de aprendizaje. Esta hipótesis se apoya en resultados experimentales realizados sobre unos pequeños organismos conocidos como *aplysia* [Kansel(1979)].

5.2 MODELO

Consideremos un modelo de memoria de largo alcance con N "elementos" descrito por el Hamiltoniano:

$$H = - \sum_{(ij)} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (32)$$

en donde el primer término incluye la interacción entre todos los pares de neuronas (i, j) y el segundo término el acoplamiento de las neuronas con una señal de entrada. Tomando esto en cuenta, se estudia el caso en el que la sinapsis J_{ij} está dada por la regla de Hebb [Amit et al. (1985)]:

$$J_{ij} = (1/N) \sum_{\mu} \xi_i^{\mu} \xi_j^{\mu} \quad \text{con} \quad \xi_i^{\mu} = \pm 1 \quad (33)$$

$$\mu = 1, \dots, P \quad (35)$$

en la que la suma de un número p finito de patrones fijos (equivalente al estado templado en los vidrios de espín) (ξ_i^{μ}) al azar son memorizados.

En este caso se encontró que, dado que el Hamiltoniano es invariante ante $\mu \leftrightarrow \nu$, entonces aparecen p mínimos absolutos con idéntica energía en el espacio de configuraciones. Estos p mínimos están relacionados con las memorias puras, y son los únicos mínimos para $T \ll T_c$. Por otro lado, si $T \approx T_c$ aparecen algunos estados espurios como mínimos locales, los cuales están relacionados con mezclas simétricas de un número impar de memorias. A medida que T disminuye (siempre por debajo de $T \approx T_c$) aumenta el número de mínimos locales que están relacionados con soluciones espurias simétricas, que

involucran un número impar de memorias (Fig.5.2)

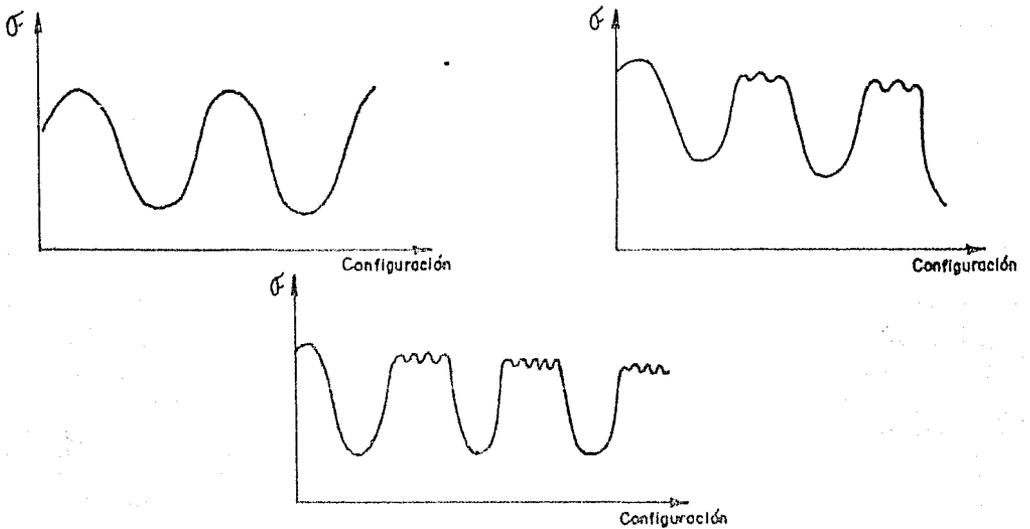


FIGURA 5.2. Representación esquemática del espacio de configuraciones. (a) $.461 \leq T < 1$ cada mínimo relacionado con una memoria pura; (b) $T \leq .461$ aparición de mínimos (no absolutos) relacionados con mezclas; (c) $T \rightarrow 0$ aumento de mínimos no absolutos.

Recientemente se buscó extender estos resultados [L. Viana (1988)] también por métodos analíticos para el caso en el que un número finito de patrones al azar fuera almacenado de acuerdo a una regla de Hebb modificada dada por:

$$J_{ij} = (1/N) \sum_p \xi_i^p \xi_j^p \quad (34)$$

en donde se quiere decir que se consideran pesos estrictamente

diferentes para cada memoria ($1=J_1 > J_2 \dots > J_p > 0$). En dicho modelo se investigaron la estabilidad de las memorias individuales como función de sus pesos relativos así como la posible existencia de memorias espurias estables. Estas últimas como se mencionó anteriormente, entorpecen la recuperación de la información de las memorias puras en el espacio de configuraciones.

En este modelo, donde las memorias no están igualmente representadas en el Hamiltoniano (aprendidas con diferentes pesos), se encontró que repercute en que las condiciones de estabilidad del sistema son más fuertes que para el caso de pesos iguales (fig.5.3). Por otro lado, no se encontraron memorias espurias estables (que correspondieran a mínimos de la energía del sistema); lo cual no quiere decir que no existan. Esto es debido a que el cálculo analítico involucra la solución de p ecuaciones simultáneas trascendentales, por lo que nos es imposible saber el número total de mínimos del sistema así como si el mínimo que encontramos es el mínimo más profundo. Dada la situación a la que nos enfrentamos es necesario recurrir a un método alternativo que nos permita obtener una idea más clara de lo que sucede. Debido a lo anterior, se consideró hacer simulaciones tipo Monte Carlo que nos permitieran tener una visión más completa del espacio de configuraciones.

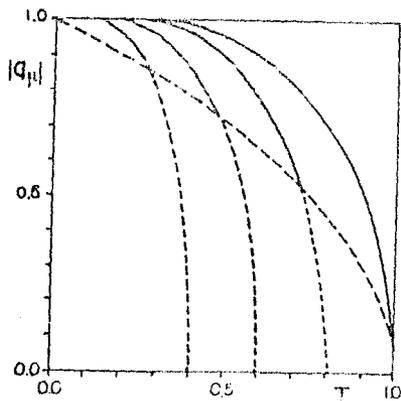


FIGURA 5.3. Gráfica de la magnitud del parámetro de orden como función del nivel de ruido T .

5.3. SIMULACION

ESTA TESIS NO DEBE
SALIR DE LA BIBLIOTECA

Por métodos analíticos se ha podido encontrar la existencia de mínimos del sistema, más no es posible determinar el tamaño de las cuencas de dichos mínimos. Desde el punto de vista práctico esta información es importante, pues es una indicación de que tan fácil será la recuperación de la información.

El método de Monte Carlo es un método alternativo que nos permite mapear el espacio de configuraciones y tener noción sobre el tamaño de las cuencas. Al hacer uso de este método a

T=0 estamos rechazando todos los cambios que incrementan la energía del sistema. Esto quiere decir, que el sistema no puede salir de un mínimo debido a fluctuaciones, y caerá en el mínimo más cercano a la configuración inicial.

Al realizar la simulación es de esperarse que si se tiene un Hamiltoniano como el representado por la ec.34 con $J_{ij} = \sum_k J_{ik} \xi_i^k \xi_j^k$ (regla de Hebb modificada) entonces el tamaño de las cuencas aumenta en relación a los pesos relacionados a cada memoria.

5.3.1 METODO

Nuestro interés principal es considerar el caso de pesos diferentes para cada memoria cuando el número p de memorias almacenadas es finito y $N \rightarrow \infty$. Sin embargo, dado que es imposible llevar a cabo esta simulación, nos contentaremos con analizar el comportamiento como función de $\alpha = p/N$ y tratar de extrapolar para obtener el comportamiento cuando $\alpha \rightarrow 0$. Estos estudios se harán para un conjunto de redes, cada una de ellas con N elementos completamente conectados (de $N=32$ a $N=480$). Cada red memoriza p ($p=3,5$) estados conectados en base a la regla de Hebb modificada ($J_1 > J_2 \dots > J_p$), escogiendo valores arbitrarios para las J_{ij} igualmente espaciados.

Una manera de evaluar cuantitativamente la lejanía o cercanía de estados en un sistema es por medio de los traslapes, definidos por:

$$q_{\alpha\beta} = (1/N) \sum_i \langle S_i \rangle_{\alpha} \langle S_i \rangle_{\beta} \quad (35)$$

Ahora bien, si $N \rightarrow \infty$ y p es un número finito de patrones al azar, el traslape entre ellos $q^{\alpha\beta}$, es prácticamente de orden cero. Es por esto que en la simulación se consideraron p patrones sin traslapes entre ellos.

La simulación se llevó a cabo en una computadora MICROVAX con un programa que consta de dos partes:

La primera parte concierne al aprendizaje de la red. Se genera un patrón p al azar y a partir de éste se construyen $p-1$ patrones sin correlación entre ellos.

En la segunda parte, se realizó un mapeo del espacio de estados usando el método de Monte Carlo a $T=0$. Se escoge al azar un estado inicial y se deja que el sistema se relaje hasta que H alcance un valor mínimo. De esta manera se repitieron M corridas para evaluar el porcentaje de accesibilidad en cada memoria.

5.3.2 RESULTADOS

La simulación, como ya se mencionó con anterioridad, fue realizada para $p=3,5$ y N de 32 a 480. Para cada caso se hicieron corridas para pesos iguales (a) y pesos diferentes (b).

Los resultados que se obtuvieron están representados en las gráficas de las figuras 5.4 y 5.5.

Si analizamos con detalle dichas gráficas (casos a y b), se observa que tanto para $p=3$ como para $p=5$ aparecen memorias espurias estables. Por otro lado, si comparamos las figuras "a" con las figuras "b", notamos que el porcentaje de memorias espurias disminuye cuando el sistema memoriza con pesos diferentes. Ahora, si nos fijamos únicamente en los casos b (pesos diferentes) de dichas figuras, observamos que el porcentaje para cada memoria aumenta conforme aumenta su peso. Esto se muestra en la figura 5.6 donde se muestra el caso para pesos diferentes con $N=192$ y $p=5$. Finalmente, la figura 5.7 muestra el porcentaje de mínimos espurios como función de α . En esta gráfica vemos que el porcentaje que ocupan en el espacio de configuraciones las memorias espurias para $p=5$ es mayor que para $p=3$. Esto último es de esperarse ya que las memorias espurias están relacionadas con mezclas simétricas de un número impar de memorias.

5.4 CONCLUSIONES

En los resultados que se obtuvieron se encontró que sí existen memorias espurias estables. Sin embargo, sus cuencas ocupan un porcentaje menor para pesos diferentes en el espacio de configuraciones que cuando se trata de pesos iguales. Además, se observa que las cuencas de las memorias puras son

más anchas para el caso de pesos diferentes (aumenta conforme aumenta el peso) (fig.5.7) lo que nos lleva a poder recuperar la información de manera más sencilla que cuando se trata de pesos iguales. El hecho de que las cuencas con más peso ocupen mayor espacio en el espacio de configuraciones nos hace suponer que se presenta un efecto importante de entrenamiento.

Todos estos resultados nos llevan a tener más perspectivas sobre el tema por lo que sería interesante ver, por ejemplo, que pasa cuando se consideran diferentes reglas de aprendizaje.

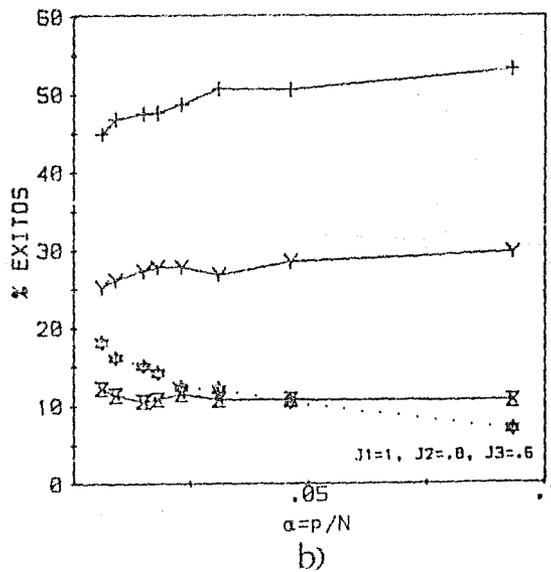
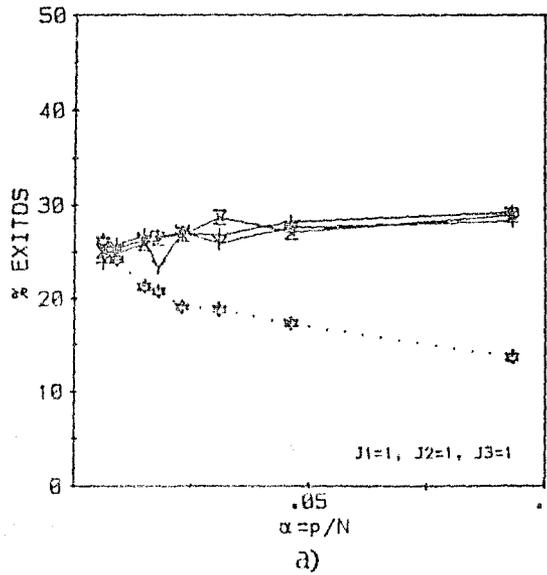


FIGURA 5.4. Porcentaje de exitos como función de α para $p=3$ memorias estables. Las líneas sólidas representan las memorias estables y la línea punteada representa el porcentaje de memorias espurias:
 (a) Pesos iguales.
 (b) Pesos diferentes.

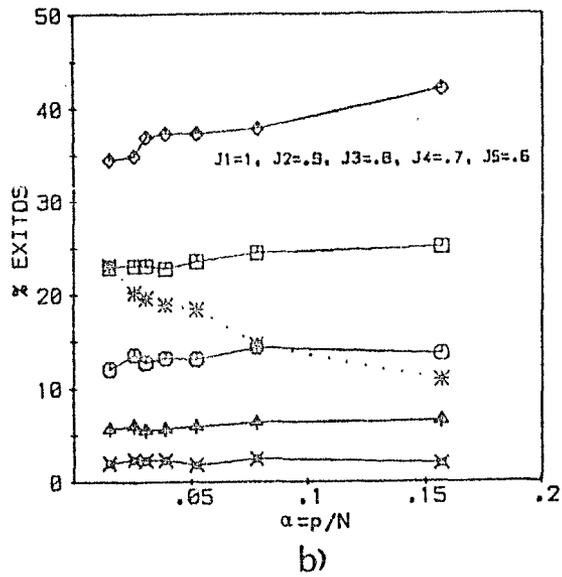
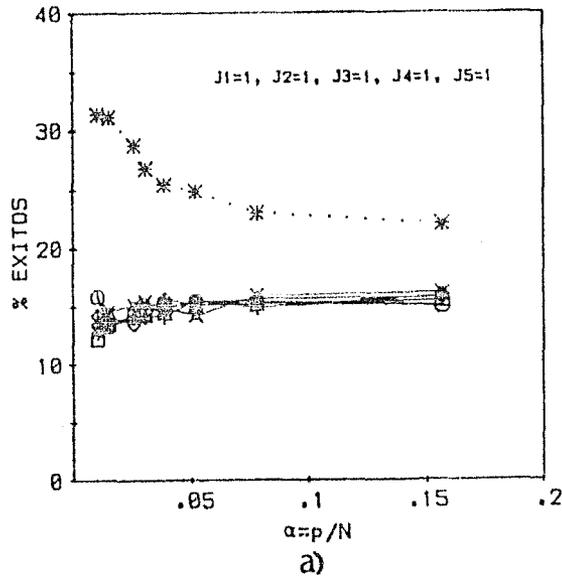


FIGURA 5.5. Porcentaje de éxitos como función de α para $p=5$ memorias estables. Las líneas sólidas representan las memorias estables y la línea punteada representa el porcentaje de memorias espurias:
 (a) Pesos iguales.
 (b) Pesos diferentes.

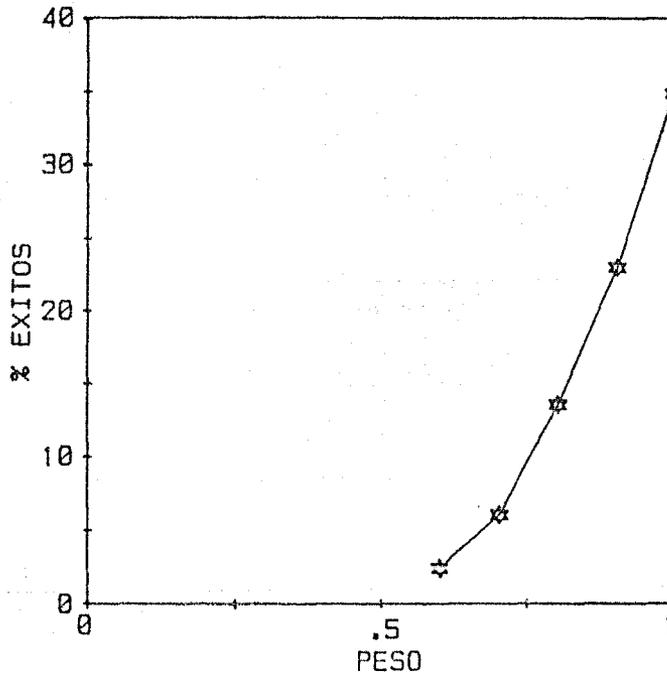


FIGURA 5.6. Relación entre el porcentaje de éxitos y el peso para el caso $p=5$ y $N=192$. El porcentaje de cada memoria aumenta como función del peso.

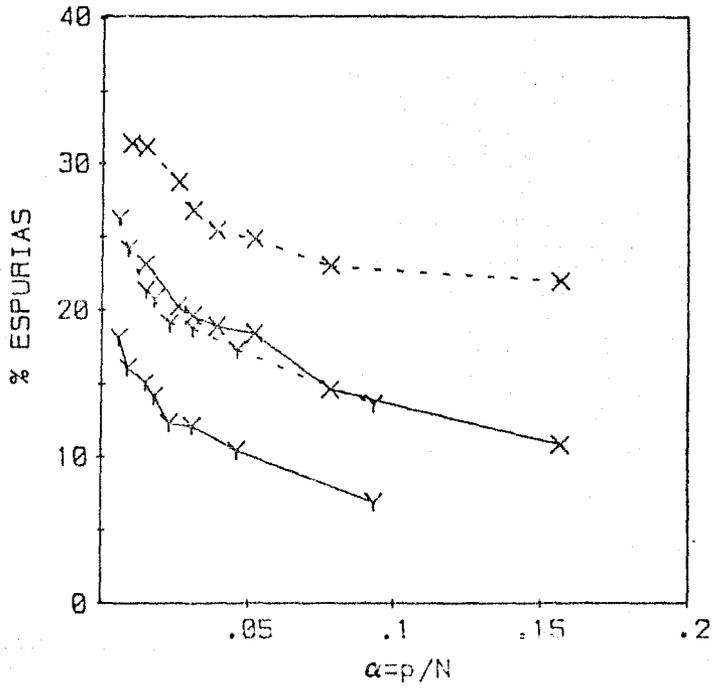


FIGURA 5.7. Porcentaje de memorias espurias para $p=3$ (Y) y $p=5$ (X) como función de α . Las líneas punteadas representan a las memorias espurias con pesos iguales y las líneas sólidas a las memorias espurias con pesos diferentes. En ambos casos se ve que el porcentaje disminuye para pesos diferentes.

BIBLIOGRAFIA

Amit, D.J., Gutfreund, H., Sompolinsky, H., Phys. Rev. **A32**
(1985) 1007.

Kandel, E.R., (1979) Sci. Am., **241** (1979) 66.

Viana, L., J.Phys. (France) **49** (1988) 167.