

Determinación de estados base en el hamiltoniano de Ising a partir de algoritmos genéticos

Kennet J. Rueda Espinosa ★

Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias

Departamento de matemáticas

Introducción a la inteligencia artificial

[Repositorio github.](#)

Diciembre 2022

Abstract

En este trabajo se presenta una manera de determinar estados bases para el hamiltoniano de Ising a partir de algoritmos genéticos. Este trabajo permite clasificar el comportamiento magnético de materiales con estructura conocida pero estados de espín sin conocer.

Key words: Hamiltoniano de Ising – Algoritmos genéticos – Magnetización

1 Introducción

El modelo de Ising fue formulado por Wilhelm Lenz en 1925, para estudiar el comportamiento magnético de los materiales a nivel microscópico a partir de un modelo simplificado que considera interacciones magnéticas individuales de átomos con sus vecinos contiguos [Simon \(2017\)](#). Desde su formulación el modelo ha sido parte de los desarrollos mas comunes para el magnetismo en mecánica estadística [Wood \(2021\)](#), que han permitido identificar transiciones de fase y entender el comportamiento de los materiales ferromagnéticos, antiferromagnéticos y los mas recientes vidrios y líquidos de espín [Balents \(2010\)](#) que han abierto nuevas áreas de investigación en la física y una serie de nuevos desarrollos tecnológicos.

El modelo en cuestión, para un caso 2-dimensional se describe a partir del hamiltoniano de la ecuación 1

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + h \sum_i \sigma_i \quad (1)$$

donde los términos J_{ij} cuantifican el valor de interacción o acople magnético efectivo entre los espines mientras que σ_i y σ_j son los espines que para este caso toman valores $\sigma = 1$ o -1 . Adicionalmente el hamiltoniano considera la aplicación de un campo magnético externo h que interactúa individualmente con cada espín σ_i .

A partir del principio de mínima energía se espera que para un caso libre de perturbaciones e interacciones externas, un sistema físico real descrito por este hamiltoniano tienda naturalmente al estado de mínima energía, este es, la configuración de variables y parámetros que minimice H en 1.

En este trabajo, consideraremos el caso en el que la estructura cristalina del sistema está bien definida, es decir, cuando se tiene claridad en cuales son los vecinos cercanos con los que interactúa cada átomo y se conoce el valor de interacción J_{ij} para cada acople, que en la práctica vienen de resolver un problema distinto a partir de técnicas experimentales [Lokhov et al. \(2018\)](#). En este caso, las variables son los espines de cada átomo y el problema de encontrar el estado mínimo de energía se reduce a encontrar cual es el conjunto de valores de espín σ_i

para cada átomo i en el sistema que cumple con minimizar H . En el contexto del uso de inteligencia artificial, este problema puede enmarcarse como un problema de Constraint search problems o de optimización combinatoria con restricciones, en el que decimos que cada sitio puede tomar un único valor de espín y donde tenemos una función heurística a minimizar H . En este trabajo, utilizaremos algoritmos genéticos para buscar las configuraciones de variables (espines) que minimicen la función de evaluación H del problema.

2 Metodología

Como se mencionó en la sección anterior, para buscar la configuración de mínima energía usaremos algoritmos genéticos. Estos algoritmos están basados en una analogía del comportamiento evolutivo de los genes. En el contexto de este problema esto puede presentarse de la siguiente forma:

Un conjunto de Ng posibles configuraciones de espines, (e.g $[-1, 1, \dots, -1]$) son generadas en una iteración inicial $t = 0$, a continuación la función de evaluación (e.g el hamiltoniano del sistema) es evaluada sobre cada configuración Ng_i . Luego, a partir de una asignación de probabilidades, que podría seguir una distribución softmax, son seleccionadas parejas de configuraciones Ng_j y Ng_k donde se priorizan aquellas con mejor valor de la función de evaluación. A continuación, ocurre un proceso de proceso de "crossover" en el que un porcentaje, de los genes de Ng_j y Ng_k son mezclados para generar dos nuevas configuraciones Ng_l y Ng_m que evolutivamente son consideradas como los "hijos" o la generación resultante de una configuración de "padres".

Las generaciones de configuraciones resultantes pasan por un proceso de mutación en el que con una determinada probabilidad un espín de la cadena asume el valor opuesto al actual. El resultado de este proceso es una nueva generación de Ng'_g de cadenas de espín. Resultantes de un proceso de combinación de sus padres y mutación.

A partir de acá, la siguiente iteración $t = 1$ inicia y el proceso se repite hasta completar un numero N_{iter} de repeticiones. A través de las N_{iter} generaciones almacenamos en memoria la configuración de variables que reporta el mínimo valor de evaluación sobre todo el proceso y reportamos este valor al final.

★ kruedae@unal.edu.co

2 Kennet J. Rueda Espinosa

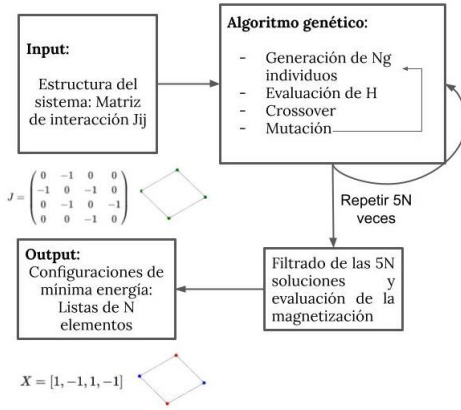


Figure 1. Diagrama de bloques de la solución propuesta

Para este trabajo se utilizó la implementación de Solgi (Solgi) de los algoritmos.

2.0.1 Multiplicidad de las soluciones

Aunque con el proceso anterior obtenemos una solución al problema, partiendo del planteamiento físico sabemos que hay sistemas en los que el estado base tiene una multiplicidad que puede ser distinta de cero, por lo que podemos esperar mas de una solución. Es importante tratar de identificar estos casos puesto que permiten identificar casos físicos de interés como la frustración de la que hablaremos en la sección siguiente.

Para esto planteamos que el proceso de solución por algoritmo genético se repita $N * 5$, donde N es el número de espines, a fin de dar oportunidad al proceso de converger en las distintas configuraciones que tengan la misma energía.

El proceso anterior completo se resume en la imagen 1

2.0.2 Configuración experimental

Para realizar pruebas sobre el algoritmo se decidieron probar 3 sistemas base ya conocidos en la literatura Simon (2017) con $N = 3$, $N = 4$ y $N = 8$. Y un sistema aleatorio con $N = 20$. Un esquema de estos sistemas, a modo de representación de grafos se muestra en la figura 2

Para los 3 primeros sistemas, los resultados esperados son bien conocidos, con lo que fue posible contrastar la resolución del problema, lo que se muestra en la sección siguiente.

Así mismo, para todos los resultados se estudió el comportamiento de los algoritmos en el proceso de optimización y el tiempo de computo.

2.1 Resultados

Iniciamos estudiando el caso del sistema cuadrado b.2. Para este caso consideramos dos escenarios en los que las interacciones J , son todas positivas o todas negativas.

De acuerdo a la literatura, si las interacciones son positivas, la configuración que minimiza la energía es aquella en la que todos los espines tienen una misma orientación. Esto es esperable de la forma de 1. Por otra parte, cuando las interacciones son negativas, la configuración de mínima energía es aquella en la que cada espín es antiparalelo a sus vecinos. Los resultados y lo esperado en la literatura se muestra en la figura 3

El tiempo de computo para este caso fue de 4 segundos.

Un resumen de los tiempos para cada sistema se muestra en 4

En la configuración b. con $N = 3$ se muestra que para

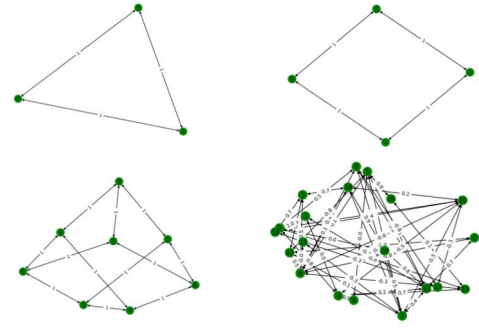


Figure 2. Configuración de testeo con a. $N = 3$, b. $N = 4$, c. $N = 8$ y d. $N = 20$. Los valores de las interacciones aparecen entre los vértices

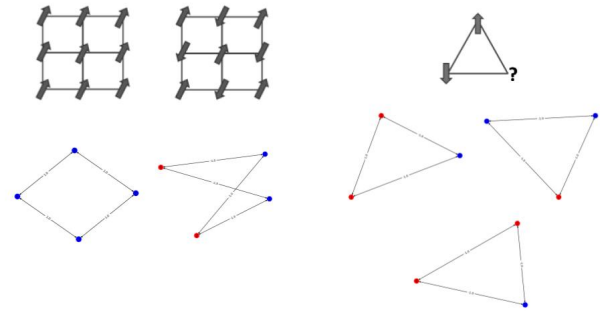


Figure 3. Soluciones a las configuraciones a. y b.

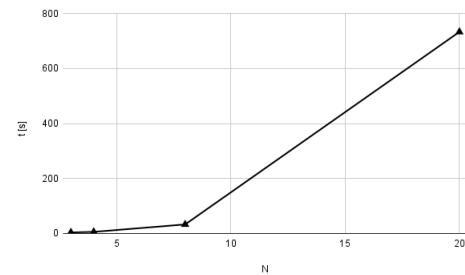


Figure 4. Tiempo de computo en función del numero de espines

interacciones con J negativos aparecen múltiples soluciones puesto que no es posible hacer interacciones completamente antiparalelas entre pares, esta imposibilidad es lo que se considera un "sistema frustrado". Los sistemas frustrados son el principio de nuevas áreas de la física que incluyen los líquidos de espín y que son de interés reciente.

De manera similar a la anterior, en la figura 5 se observan las soluciones comparadas con lo que presenta la literatura. Acá vemos que existen 4 soluciones que son equivalentes, con topologías similares pero donde los espines que no logran cumplir una interacción nula entre pares son distintos. Este material resulta ser antiferromagnético pues cuenta con igual número de espines paralelos y antiparalelos.

En la figura 6 se presenta el proceso de optimización para una iteración de los algoritmos para 3 configuraciones. Acá se observa que respecto a las iteraciones máximas de cada caso,

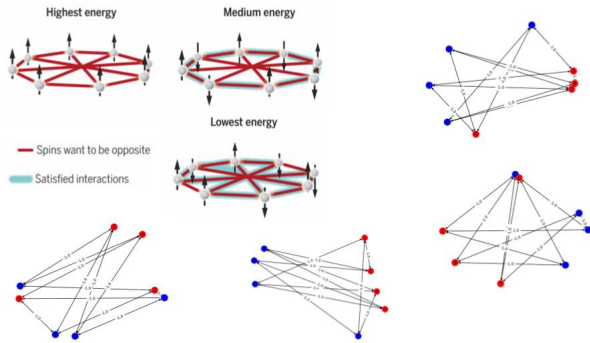


Figure 5. A la izquierda arriba se muestra una imagen de la literatura con la solución del sistema para $N=8$. Alrededor se muestran las soluciones encontradas por el agente.

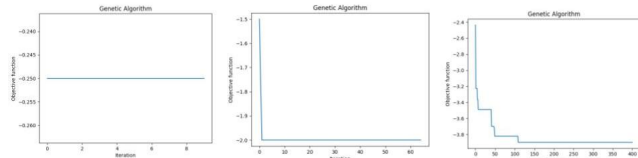


Figure 6. Proceso de optimización para $N=3, 8$ y 20

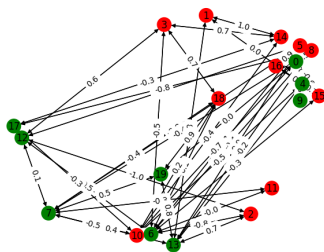


Figure 7. Solución a la configuración aleatoria

el algoritmo parece converger rápidamente y muestra necesitar tantas iteraciones como las planteadas. Ahora que se han explorado casos conocidos, consideremos un caso desconocido actualmente en el que consideramos un sistema aleatorio. Para la configuración d. el resultado se muestra en la figura 7, así mismo el resultado del agente muestra que para esta configuración en particular, 11 de los espines son antiparalelos $s = -1$ y 9 son paralelos $s = 1$. Físicamente, esto significa que debemos esperar que este "material aleatorio" tenga una muy baja magnetización, acercándose al comportamiento esperado por un material antiferromagnético (en el que todos los espines estarían antiparalelos).

3 Conclusiones

En el presente trabajo se planteó una forma de solucionar el problema del estado base de un hamiltoniano de Ising donde los espines son las variables, usando algoritmos genéticos. Se consideró el problema de la multiplicidad y se mostró que el algoritmo reproduce resultados esperados para $N=3, 4$ y espines. A continuación se realizó una evaluación de un caso descono-

cido permitiendo clasificar al "material de prueba" como antiferromagnético. En términos computacionales, el tiempo de computo parece escalar ineficientemente con N por lo que en su estado actual, no parece que el algoritmo pueda usarse sobre sistemas grandes. Sin embargo, es notable que el número de iteraciones usadas puede reducirse y posiblemente también el número de veces que se corren los algoritmos genéticos, actualmente $5N$, puede reducirse para mejorar la aplicación del problema.

Para futuros trabajos, sería de interés académico probar casos donde se apliquen campos magnéticos (donde se use el segundo término de 1) y se exploren las transiciones de fase a partir del algoritmo. También resultaría interesante considerar modelos donde se tenga en cuenta la temperatura y el carácter estadístico de la perturbación de estados.

References

- Balents L., 2010, *Nature*, 464, 199
- Lokhov A. Y., Vuffray M., Misra S., Chertkov M., 2018, *Science Advances*, 4, e1700791
- Simon S. H., 2017, *The Oxford solid state basics*. Oxford University Press
- Solgi R., , geneticalgorithm 1.0.2, <https://github.com/rmsolgi/geneticalgorithm>
- Wood Charlie s., 2021, *The cartoon picture of magnets that has transformed science*, <https://www.quantamagazine.org/the-cartoon-picture-of-magnets-that-has-transformed-science-2020>