Spin glasses (vidres de spin)

Manuel de la Rosa i Fernàndez

Introducció

Imaginem que formem part d'una classe on som N alumnes, i que el professor, per fer un determinat treball, vol dividir-nos en dos grups, no necessàriament de la mateixa grandària. En aquesta situació, en la qual ens hem trobat tots alguna vegada, ens preocupa pertànyer a un grup on hi hagi companys amb els quals tinguem una bona relació. Com que som matemàticament curiosos, ens arribem a preguntar si existeix alguna manera de definir els dos grups de forma que es "maximitzés"aquest sentiment de satisfacció i la major quantitat possible de companys estigués a gust, i amb companys amb els quals té bona relació.

Una manera d'intentar resoldre aquest petit problema seria simplificar-lo suposant que el sentiment de simpatia o antipatia entre dos individus és recíproc, i formalitzar la situació de manera que donats dos individus i i j, els podem associar un nombre $J_{i,j}$ que val 1 si són amics i -1 si no ho són. A més, a cada individu i li assignem un valor s_i que serà 1 o -1 segons el grup en el qual quedi enquadrat. Per tant, a partir del conjunt de relacions $J := \{J_{i,i}, 1 \leq i < j \leq N\}$ i la classificació $s := \{s_i, 1 \leq i \leq N\}$, l'objectiu és minimitzar la quantitat de desencís, és a dir, minimitzar

$$H(J, s) = -\sum_{1 \leq i < j \leq N} J_{i,j} s_i s_j.$$

D'aquesta manera, com més elevat és el valor de $H(J, s)$, més parelles d'individus amb sentiments d'antipatia mútua es troben al mateix grup i parelles que es porten bé en diferents grups. Per tant, hi ha un nivell de frustració més gran. Aquesta frustració genera, a més, una major inestabilitat, perquè els diferents individus voldran establir una altra manera de classificar-se.

El càlcul dels valors s_i que minimitzen el desencís és, a priori, un problema complex. Per intentar resoldre'l, podem utilitzar els nostres coneixements de probabilitats i, a partir d'un paràmetre β fixat, definir per a cada classificació s una certa probabilitat

$$G_N(s) = \frac{\exp(-\beta H(J, s))}{Z_N},$$

on

$$Z_N = \sum_s \exp(-\beta H(J, s))$$

és la funció de partició. Ara, determinar la classificació òptima es converteix en un problema equivalent que consisteix a estudiar la mesura de probabilitats G_N. En aquest punt també podem destacar que, escollint el conjunt de relacions J a l'atzar segons una determinada llei de probabilitat, aquest model presenta un desordre fruit d'aquesta elecció.

2010 Mathematics Subject Classification. 82D30

Podem relacionar aquest petit exemple, i els conceptes que hem introduït amb ell, amb la mecànica estadística. En aquesta disciplina, $H(J,s)$ s'interpreta com l'energia associada a una determinada configuració, G_N s'anomena *mesura de Gibbs*, i el paràmetre β és l'invers de la temperatura. Aleshores, podem parlar, en comptes de companys de classe, d'un sistema físic de N partícules que es pot trobar en un nombre finit de configuracions diferents, cadascuna de les quals té associada una determinada energia que depèn de la temperatura del sistema. El nostre objectiu serà, doncs, conèixer la probabilitat de trobar-nos en una determinada configuració després de deixar el sistema a una temperatura determinada durant prou temps. Una introducció al concepte físic dels spin glasses es pot trobar a [5] i [7].

Marc matemàtic dels *spin glasses*

Ara traslladarem tots els conceptes que hem vist en l'anterior exemple al llenguatge matemàtic per tal de modelar aquest problema.

Els *spin glasses* (vidres de spin) són sistemes de N partícules on cadascuna pot prendre dos valors: +1 i -1. Anomenem *espai de configuracions* el conjunt de possibles valors de les N partícules, i es designa per $\Sigma_N = \{-1,+1\}^N$. Una configuració $\sigma = (\sigma_1, ..., \sigma_N)$ és un element de Σ_N, i cada component σ_i de la configuració és un spin.

Cada configuració σ té associada una energia $H_N(\sigma)$ a partir d'una funció H_N real, anomenada *hamiltonià del sistema*, i definida a Σ_N. Cal destacar que aquesta funció d'energia determinarà el tipus de model de *spin glasses*. De fet, el primer que cal observar és que a causa del desordre que volem modelitzar, l'energia no és una funció, sinó que és una variable aleatòria. D'aquesta manera, obtenim una variable aleatòria H_N que fa el paper que feia $H(J,s)$ en l'exemple inicial. Amb la mateixa intenció que hem vist en aquell exemple, assignem a cada configuració σ una quantitat, anomenada *factor de Boltzmann*, donada per $\exp(-\beta H_N(\sigma))$, on $\beta \geq 0$ és un paràmetre que representa l'invers de la temperatura. Aleshores, a partir dels factors de Boltzmann definim una probabilitat sobre Σ_N, anomenada *mesura de Gibbs*, com

$$G_N(\sigma) = \frac{1}{Z_N} \exp(-\beta H_N(\sigma)),$$

on

$$Z_N = \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp(-\beta H_N(\sigma))$$

és la funció partició (o factor de normalització).

La mesura de Gibbs que ara hem introduït és un concepte utilitzat en la mecànica estadística. Des d'un punt de vista físic podem interpretar-la com la probabilitat de trobar-nos en una configuració σ quan s'ha arribat a l'equilibri després d'un bany tèrmic prou llarg de temperatura $T = 1/\beta$. És habitual treballar models a temperatura alta (és a dir, amb β petit), perquè l'estudi de models amb β elevada és força complicat.

Hem de tenir en compte que, quan a principi dels anys setanta del segle passat, Vincent D. Canella, John A. Mydosh i Joseph J. Budnick van començar a estudiar els *spin glasses*, ho van fer per modelar estats de la matèria a partir de les propietats magnètiques dels seus àtoms. Per aquest motiu, cap a l'any 1975 van aparèixer diferents propostes de models. De fet, els científics van proposar, d'una banda, models que tenien en compte la localització geomètrica de les partícules (on els àtoms interaccionen bàsicament amb els que tenen al seu voltant), anomenats *models reals*, i de l'altra, models on s'oblida aquesta localització perquè s'accepta que tots els àtoms interaccionen d'alguna manera entre ells, anomenats *models en mitjana* (*mean fields*). La majoria d'estudis actuals recullen els models en mitjana, a causa de la complexitat que presenta l'estudi dels models reals.

Cal observar, finalment, que en aquesta modelització matemàtica la mesura de Gibbs presenta dos nivells d'aleatorietat, la qual cosa ens permetrà treballar dos tipus d'esperança. Parlarem d'esperança respecte a l'espai de configuracions Σ_N, i d'esperança respecte a l'aleatorietat associada al hamiltonià H_N.

Diferents models

Tres dels models més senzills de *spin glasses* que existeixen són el model d'energia aleatòria (REM), el model Sherrington-Kirkpatrick, i el model Sherrington-Kirkpatrick amb camp extern. Això no vol dir que siguin els únics. Hi ha molts altres models que no presentem aquí, com poden ser el model de Curie-Weiss, el model de p-spins, el de p-spins amb camp extern, el model del perceptró, el model de Hopfield... etc. Ara veurem una petita introducció als tres més senzills.

L'any 1980 B. Derrida va introduir el model d'energia aleatòria (REM). En aquest model, la família $\{H_N(\sigma)\}_{\sigma\in\Sigma_N}$ està formada per variables aleatòries gaussianes centrades, independents i idènticament distribuïdes amb variància $N/2$, és a dir, $H_N(\sigma) \sim \mathcal{N}(0, N/2)$. Aquest és un model sense gaire interès real, ja que la no-correlació entre les configuracions indica una situació sense interacció entre les partícules. Ara bé, la seva simplicitat el fa matemàticament molt útil, perquè permet un estudi complet del seu comportament, i ajuda a comprendre altres models més complicats.

D. Sherrington i S. Kirkpatrick van introduir l'any 1975 el seu model de *spin glasses*, en el qual el hamiltonià és de la forma

$$-H_N(\sigma) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{1\le i<j\le N} g_{ij}\sigma_i\sigma_j,$$

on $\{g_{ij}, 1 \le i < j \le N\}$ és una família de variables aleatòries independents idènticament distribuïdes amb llei $\mathcal{N}(0,1)$. En aquest model, a diferència de l'anterior, si tenim dues configuracions diferents σ^1 i σ^2, les seves energies no són independents. De fet, amb un petit càlcul veiem que

$$\begin{aligned} E\left(H_N(\sigma^1)H_N(\sigma^2)\right) &= \frac{1}{N} \sum_{1\le i<j\le N} \sigma_i^1\sigma_j^1\sigma_i^2\sigma_j^2 \\ &= \frac{N}{2}\left(\frac{1}{N}\sum_{1\le i\le N}\sigma_i^1\sigma_i^2\right)^2 - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

En el càlcul d'aquesta covariància apareix un concepte fonamental en l'estudi dels *spin glasses*, la superposició (*overlap*) entre dues configuracions σ^1 i σ^2 que es defineix com

$$R_{1,2} = R_{1,2}(\sigma^1, \sigma^2) = \frac{1}{N} \sum_{1\le i\le N} \sigma_i^1\sigma_i^2.$$

Observem que com més semblants són les dues configuracions σ^1 i σ^2, més propera a 1 estarà la superposició.

Aquest model es va generalitzar introduint al seu hamiltonià un terme que representa l'acció d'un camp extern. Aquesta idea dona lloc al model Sherrington-Kirkpatrick amb camp extern, el hamiltonià del qual és de la forma

$$-H_{N,\beta}(\sigma) = \frac{\beta}{\sqrt{N}} \sum_{1 \leq i < j \leq N} g_{ij}\sigma_i\sigma_j + h \sum_{1 \leq i \leq N} \sigma_i,$$

on, com en el model anterior, $\{g_{ij}, 1 \leq i < j \leq N\}$ és una família de variables aleatòries independents idènticament distribuïdes amb llei $\mathcal{N}(0,1)$, i el terme afegit, amb $h \geq 0$, representa l'acció d'un camp extern tal com comentàvem abans. Òbviament, en el cas $h = 0$ recuperem el model anterior.

Què s'estudia d'aquests models?

Com ja hem comentat a la introducció, la manera de tractar els sistemes de *spin glasses* és estudiant la mesura de Gibbs. Ara bé, aquest estudi es pot fer des de diferents punts de vista.

En la presentació del model Sherrington-Kirkpatrick hem definit la superposició entre dues configuracions σ^1 i σ^2 com

$$R_{1,2} = R_{1,2}(\sigma^1, \sigma^2) = \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i \leq N} \sigma_i^1 \sigma_i^2.$$

A més, hem vist la relació entre $R_{1,2}$ i la correlació de la família de variables $\{H_N(\sigma)\}_{\sigma \in \Sigma_N}$. Aquestes correlacions són les que defineixen les propietats dels diferents models, motiu pel qual una bona manera de conèixer un model és estudiant la llei de la superposició. Una de les maneres de realitzar aquest estudi és examinar el comportament dels seus moments exponencials. De fet, es demostra que en el model Sherrington-Kirkpatrick amb camp extern la superposició convergeix de manera quadràtica cap a l'única solució q de l'equació

$$q = E \tanh^2(\beta z \sqrt{q} + h).$$

Aquesta demostració requereix la introducció de dos mètodes de treball en *spin glasses*, com són el mètode de la cavitat (*cavity method*) i el mètode del camí bo (*smart path method*). El desenvolupament de tot aquest material teòric es pot veure amb detall a [9] i [10].

Un altre aspecte important per conèixer la mesura de Gibbs és l'estudi del factor de normalització Z_N, el qual hem definit en la secció del marc matemàtic dels *spin glasses*. Utilitzant el concepte físic de l'energia lliure, que es defineix com

$$p_N(\beta) = \frac{1}{N} E(\log Z_N(\beta)),$$

podem estudiar les fluctuacions d'aquest factor de normalització. De fet, l'estudi de l'energia lliure ens permet afirmar que, d'una banda, en el model d'energia aleatòria es verifica que

$$\lim_{N\to\infty} p_N(\beta) = \frac{\beta^2}{4} + \log 2, \qquad si\ \beta \leq 2\sqrt{\log 2}$$
$$\lim_{N\to\infty} p_N(\beta) = \beta\sqrt{\log 2}, \qquad si\ \beta \geq 2\sqrt{\log 2},$$

mentre que de l'altra, en el model Sherrington-Kirkpatrick amb camp extern existeix β_0 tal que, per a tot $\beta \leq \beta_0$, i per a tot $h \geq 0$, tenim que

$$\lim_{N\to\infty} p_N(\beta, h) = \frac{\beta^2}{4}(1-q)^2 + \log 2 + E \log\cosh\left(\beta z\sqrt{q} + h\right),$$

on $z \sim \mathcal{N}(0,1)$ és una variable aleatòria independent de la resta de variables, i q és l'única solució de l'equació

$$q = E\tanh^2(\beta z\sqrt{q} + h)$$

a $[0,1]$. Demostrar aquests resultats no és difícil, però requereix el coneixement dels conceptes d'un curs de probabilitats, especialment de les propietats de les variables aleatòries. A [8], [9], i [10] es poden trobar les demostracions i els càlculs que porten a aquests resultats.

Una altra manera d'estudiar la mesura de Gibbs és comparant-la amb una mesura producte, tant de forma local com de forma global. Els estudis local i global d'aquesta mesura producte presenten resultats diferents. A [9] es pot trobar l'estudi de la mesura de Gibbs segons aquest punt de vista.

Referències

[1] Albeverio, S.; Schachermayer, W.; i Talagrand, M. *Lectures on Probability Theory and Statistics*, Springer, 2000.

[2] Austin, T. *Mean field models for spin glasses*, Notes for IAS workshop, Springer, 2012.

[3] Bardina, X.; Márquez-Carreras, D.; Rovira, C.; i Tindel, S. *The p-spin interaction model with external field*, Potential Analysis 21, pàg. 311-362, 2004.

[4] Bolthausen, E.; i Bovier, A. *Spin glasses*, Lectures Notes in Mathematics, Springer, 2007.

[5] Bovier, A.; i Picco, P. *Mathematical Aspects of Spin Glasses and Neural Networks*, Progress in Probability, Birkhäuser, 1998.

[6] Guerra, F. *Spin glasses*, arXiv:cond-mat/0507581v1 [cond-mat.dis.nn], juliol de 2005.

[7] Márquez-Carreras, D. *The magnetization at high temperature for a p-spin interaction model with external field*, Applicationes Mathematicae, 34, pàg. 97-111, 2007.

[8] Márquez-Carreras, D.; i Rovira, C. *Cristalls de spin*, Butlletí de la Societat Catalana de Matemàtiques, Vol. 20, núm. 1, pàg. 37-51, 2005.

[9] Talagrand, M. *Spin glasses: A Challenge for Mathematicians. Cavity and Mean field Models*, Springer-Verlag, Vol. 46, 2003.

[10] Talagrand, M. *Mean field models for Spin glasses*, A Series of Modern Surveys in Mathematics, Springer, 2011.

Manuel de la Rosa i Fernàndez
mrosafer7@alumnes.ub.edu