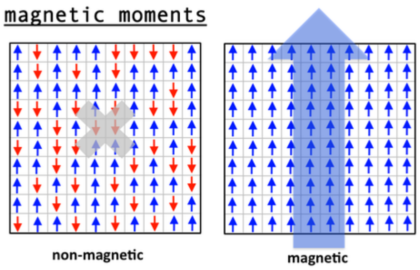
ВМК МГУ

Задание 3. Модель Изинга

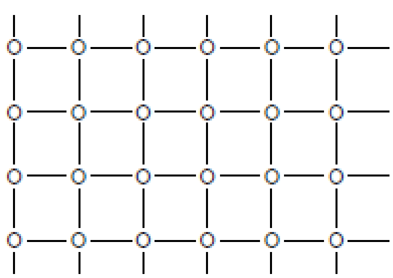
Курс: Байесовские методы в машинном обучении, 2014



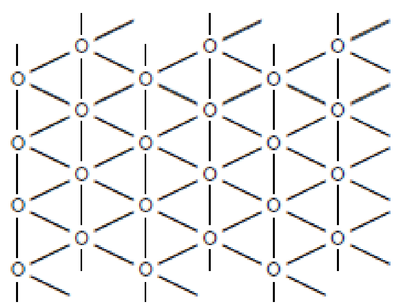
Начало выполнения задания: 28 ноября.
Срок сдачи: **11 декабря (четверг), 23:59.**
Среда для выполнения задания: MATLAB или Python 2.7.

Содержание

1 Модель Изинга



(a) Прямоугольная система соседства



(b) Треугольная система соседства

Модель Изинга — математическая модель статистической физики, предназначенная для описания магнитных свойств вещества. Каждой вершине кристаллической решётки (рассматривается двухмерный случай) сопоставляется число, называемое спином и равное +1 или -1 («поле вверх»/«поле вниз»). Каждому из 2^N возможных вариантов расположения спинов (где N — число атомов решётки) приписывается энергия, состоящая из взаимодействия спинов соседних атомов J и действия внешнего магнитного поля H:

$$E(X) = -\left(J\sum_{(i,j)\in\mathcal{E}} x_i x_j + \sum_{i=1}^{N} H_i x_i\right),$$

где $x_i \in \{-1, +1\}$ — переменные, соответствующие спинам, $\mathcal{E}$ — система соседства (в данном задании рассматриваются две системы соседства: прямоугольная и треугольная), каждое ребро в $\mathcal{E}$ считается один раз. Вероятность нахождения в каждом конкретном состоянии X задается распределением Гиббса:

$$P(X) = \frac{1}{Z}\exp\left(-\beta E(X)\right), \qquad \beta = \frac{1}{kT},$$

где Z — нормировочная константа, T — температура, k — параметр.

Если $J = 1$, то вещество называется ферромагнетиком. Если $J = -1$, то вещество называется антиферромагнетиком.

2 Формулировка задания

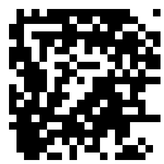


Рис. 1: Пример иллюстрации состояния модели Изинга размера 20 на 20.

1. Провести исследование модели Изинга с помощью схемы Гиббса:
   - Вывести формулы для одномерных условных распределений вида $p(x_i|X_{\setminus i})$;
   - Реализовать с помощью схемы Гиббса процедуру оценки математического ожидания энергии $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$, стандартного отклонения энергии $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$, математического ожидания квадрата общей намагниченности модели $\sqrt{\mathbb{E}(\mu^2)}$, где $\mu = \left(\sum_{i=1}^N x_i\right)/N$ для заданных параметров β и внешнего магнитного поля H. Требования по эффективности реализации: 1000 итераций метода Гиббса для прямоугольной решетки размера 20 на 20 и ста значений параметра β должны выполняться не более 20 секунд. В отчете привести соответствующие замеры времени работы кода;
   - Построить графики зависимости $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$, $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$, $\sqrt{\mathbb{E}(\mu^2)}$ от температуры для треугольной и четырехугольной систем соседства, ферромагнетика и антиферромагнетика (всего 4 модели). Проинтерпретировать полученные результаты, в частности, идентифицировать фазовый переход. В чём проявляется различие между двумя системами соседства? Для построения графиков использовать следующие значения параметров: размер решетки 20 на 20 (N = 400), $k = 1$, 10000 итераций метода Гиббса для оценки статистик, внешнее магнитное поле $H_i = 0$, температуры $T = [0.5, 0.6, \ldots, 9.9, 10]$;
   - Для ферромагнетика с четырехугольной системой соседства отобразить характерные отдельные конфигурации X (см. рис.) в зависимости от температуры (низкая температура, окрестность фазового перехода, высокая температура). Проинтерпретировать результаты;
   - Исследовать влияние константного внешнего магнитного поля на фазовый переход в ферромагнетике с прямоугольной системой соседства. Рассмотреть также внешнее магнитное поле со следующей структурой: на половине решетки H = 1, на другой половине H = -1;
2. Провести исследование модели Изинга с помощью вариационного подхода, где в качестве факторизованного семейства для $q(X)$ выступает независимое распределение по всем компонентам $q(X) = \prod_{i=1}^N q_i(x_i)$:
   - Вывести формулу для пересчета отдельного фактора $q_i(x_i)$, формулу для функционала $\mathcal{L}(q)$, формулы для оценки $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$, $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$, $\sqrt{\mathbb{E}(\mu^2)}$, где мат.ожидания вычисляются по распределению $q(X)$;
   - Реализовать с помощью вариационного подхода процедуру оценки величин $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$, $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$, $\sqrt{\mathbb{E}(\mu^2)}$, а также нижней оценки $\mathcal{L}(q)$ для логарифма нормировочной константы $\log Z$ для заданных параметров β и внешнего магнитного поля H. Требования по эффективности реализации: для решетки размера 20 х 20 сто итераций поиска вариационного приближения для ста значений параметра β должны выполняться не более двух секунд, включая этап оценки всех статистик. В отчете привести соответствующие замеры времени работы кода;
   - Построить графики зависимости $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$, $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$, $\sqrt{\mathbb{E}(\mu^2)}$, $\mathcal{L}(q)$ от температуры для треугольной и четырехугольной систем соседства, ферромагнетика и антиферромагнетика (всего 4 модели). Проинтерпретировать полученные результаты, в частности, идентифицировать фазовый переход. В чём проявляется различие между двумя системами соседства? Для построения графиков использовать следующие значения параметров: размер решетки 20 на 20 (N = 400), $k = 1$, внешнее магнитное поле $H_i = 0$, температуры $T = [0.5, 0.6, \ldots, 9.9, 10]$;

- Для ферромагнетика с четырехугольной системой соседства отобразить найденное распределение $q(X)$ (в шкале серого) в зависимости от температуры (низкая температура, окрестность фазового перехода, высокая температура). Проинтерпретировать результаты;
- Исследовать влияние константного внешнего магнитного поля на фазовый переход в ферромагнетике с прямоугольной системой соседства. Рассмотреть также внешнее магнитное поле со следующей структурой: на половине решетки H = 1, на другой половине H = -1;

3. Сравнить результаты схемы Гиббса с результатами вариационного подхода. Рассмотреть ферромагнетик с прямоугольной системой соседства. Привести графики математического ожидания и дисперсии энергии, корня из математического ожидания квадрата намагниченности в одних осях для двух подходов.

4. Написать отчет в формате PDF с описанием всех проведенных исследований.

3 Рекомендации по выполнению задания

1. Для схемы Гиббса и вариационного подхода:
   - Рекомендуется реализовывать алгоритмы вывода с векторными операциями по параметру β, т.е. проводить вычисления для всех температур сразу;
   - На этапе тестирования процедур рекомендуется проводить эксперименты на неквадратной решетке и со случайным внешним магнитным полем H;
2. Для схемы Гиббса:
   - Для оценки статистик распределения с помощью схемы Гиббса следует отбрасывать конфигурации X, полученные на первой трети итераций;
   - В качестве примеров конфигураций X лучше брать ситуации с последних итераций схемы Гиббса;
   - Одной из возможных проверок на корректность оценки статистик по сгенерированному набору конфигураций X является следующая: сделать большое число итераций по схеме Гиббса, рассмотреть несколько различных подмножеств сгенерированных конфигураций, по каждому из подмножеств оценить статистики. При правильной реализации статистики, оцененные по разным подмножествам конфигураций, должны быть близки между собой;
3. Для вариационного подхода:
   - Рекомендуется запускать вариационную оптимизацию из нескольких начальных приближений для q: случайные, все вероятности одинаковые и близки к единице, шахматная доска и т.д. При этом для текущей температуры наилучшим вариационным приближением признается такое, при котором значение нижней границы $\mathcal{L}(q)$ является максимальным;
   - Одной из проверок на корректность оптимизации в рамках вариационного подхода является монотонное возрастание в итерациях значения нижней границы $\mathcal{L}(q)$;
   - Одной из возможных проверок на корректность вычисления различных статистик по приближению q является использование метода Монте Карло, при котором из распределения q генерируется набор конфигураций X^j, по которым затем оцениваются необходимые статистики.

4 Оформление задания

Выполненное задание следует отправить письмом по адресу bayesml@gmail.com с заголовком письма

«[БММО14] Задание 3, Фамилия Имя».

Убедительная просьба присылать выполненное задание только один раз с окончательным вариантом. Также большая просьба строго придерживаться заданных прототипов реализуемых функций.

Присланный вариант задания должен содержать в себе:

- Текстовый файл в формате PDF, содержащий описание проведенных исследований;
- Все исходные коды с необходимыми комментариями.

Для проверки корректности прототипов реализованных функций рекомендуется воспользоваться специальной процедурой: `https://www.dropbox.com/s/j65s3w63hgyn5sj/check_prototypes.zip?dl=1`. Задания, для которых данная процедура будет выходить с ошибкой, проверяться не будут!

4.1 Прототипы для MATLAB

Каждая требуемая функция должна быть реализована в отдельном m-файле.

Метод Гиббса для оценки статистик распределений
`[E, D, M, S] = gibbsIsing4(H, J, betaAll, num_iter)` — прямоугольная система соседства
`[E, D, M, S] = gibbsIsing6(H, J, betaAll, num_iter)` — треугольная система соседства
Вход:

- `H` — внешнее магнитное поле, матрица размера vS x hS;
- `J` — параметр модели, равен 1 или -1;
- `betaAll` — вектор значений параметра β (`numpy.array`, вектор-строка длины β_0);
- `num_iter` — количество итераций схемы Гиббса;

Выход:

- `E` — значения мат.ожиданий энергии на один спин $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$ для каждой температуры, вектор-строка длины β_0;
- `D` — значения стандартных отклонений энергии на один спин $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$ для каждой температуры, вектор-строка длины β_0;
- `M` — значения средней магнетизации на один спин $\sqrt{\mathbb{E}\mu^2}$ для каждой температуры, вектор-строка длины β_0;
- `S` — примеры конфигураций X для всех температур, массив размера vS x hS x β_0.

Вариационный подход
`[E, D, M, L] = varIsing4(H, J, betaAll, opt_params)` — прямоугольная система соседства
`[E, D, M, L] = varIsing6(H, J, betaAll, opt_params)` — треугольная система соседства
Вход:

- `H` — внешнее магнитное поле, матрица размера vS x hS;
- `J` — параметр модели, равен 1 или -1;
- `betaAll` — вектор значений параметра β (вектор-строка длины β_0);
- `opt_params` — (необязательный параметр) параметры оптимизационного процесса, структура со следующими полями:
  - `max_iter` — максимальное количество итераций, по умолчанию = 300;
  - `tol_crit` — необходимая точность по значению нижней границы, по умолчанию = 10^{-4};
  - `num_start` — количество различных начальных приближений, по умолчанию = 1;

Выход:

- `E` — значения мат.ожиданий энергии на один спин $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$ для каждой температуры, вектор-строка длины β_0;
- `D` — значения стандартных отклонений энергии на один спин $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$ для каждой температуры, вектор-строка длины β_0;
- `M` — значения средней магнетизации на один спин $\sqrt{\mathbb{E}\mu^2}$ для каждой температуры, вектор-строка длины β_0;
- `L` — нижние границы для логарифмов нормировочных констант для каждой температуры, вектор-строка длины β_0.

4.2 Прототипы для Python 2.7

Все требуемые функции должны располагаться в модуле под названием ising.py

Метод Гиббса для оценки статистик распределений
`gibbsIsing4(H, J, betaAll, num_iter)` — прямоугольная система соседства
`gibbsIsing6(H, J, betaAll, num_iter)` — треугольная система соседства
Вход:

- `H` — внешнее магнитное поле, `numpy.array`, матрица размера vS x hS;
- `J` — параметр модели, равен 1 или -1;
- `betaAll` — вектор значений параметра β (вектор-строка длины β_0);
- `num_iter` — количество итераций схемы Гиббса;

Функция должна возвращать словарь с ключами `'E'`, `'D'`, `'M'`, `'S'`:

- `E` — значения мат.ожиданий энергии на один спин $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$ для каждой температуры, `numpy.array`, вектор-строка длины β_0;
- `D` — значения стандартных отклонений энергии на один спин $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$ для каждой температуры, `numpy.array`, вектор-строка длины β_0;
- `M` — значения средней магнетизации на один спин $\sqrt{\mathbb{E}\mu^2}$ для каждой температуры, `numpy.array`, вектор-строка длины β_0;
- `S` — примеры конфигураций X для всех температур, `numpy.array` размера vS x hS x β_0.

Вариационный подход
`varIsing4(H, J, betaAll, max_iter=300, tol_crit=1e-4, num_start=1)` — прямоугольная система соседства
`varIsing6(H, J, betaAll, max_iter=300, tol_crit=1e-4, num_start=1)` — треугольная система соседства
Вход:

- `H` — внешнее магнитное поле, `numpy.array`, матрица размера vS x hS;
- `J` — параметр модели, равен 1 или -1;
- `betaAll` — вектор значений параметра β (`numpy.array`, вектор-строка длины β_0);
- `max_iter` — максимальное количество итераций;
- `tol_crit` — необходимая точность по значению нижней границы;
- `num_start` — количество различных начальных приближений;

Функция должна возвращать словарь с ключами `'E'`, `'D'`, `'M'`, `'L'`:

- `E` — значения мат.ожиданий энергии на один спин $\frac{1}{N}\mathbb{E}E$ для каждой температуры, `numpy.array`, вектор-строка длины β_0;
- `D` — значения стандартных отклонений энергии на один спин $\frac{1}{N}\sqrt{\mathbb{D}E}$ для каждой температуры, `numpy.array`, вектор-строка длины β_0;
- `M` — значения средней магнетизации на один спин $\sqrt{\mathbb{E}\mu^2}$ для каждой температуры, `numpy.array`, вектор-строка длины β_0;
- `L` — нижние границы для логарифмов нормировочных констант для каждой температуры, `numpy.array`, вектор-строка длины β_0.