

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ ЭНТРОПИИ В ПРОСТРАНСТВЕННО НЕОДНОРОДНЫХ СТАТИСТИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

MODELING OF ENTROPY BEHAVIOR IN SPATIALLY INHOMOGENEOUS STATISTICAL SYSTEMS

E. Zarkova

Summary. The paper considers the method of modelling entropy and information flows in spatially inhomogeneous statistical systems. It is shown that defects in the structure of models have a significant impact on the entropy of the system. The application of this modelling method to describe the processes occurring in stochastic neural networks is discussed. It shows how the ideas of criticality can serve as a foundation for the construction of computational systems.

Keywords: entropy, Monte Carlo method, critical behavior, defects, Ising model, neural networks.

Зарькова Елизавета Михайловна

Аспирант, Московский государственный университет

имени М.В. Ломоносова;

инженер-исследователь,

Институт элементоорганических соединений

имени А.Н. Несмеянова Российская академия наук

zarkova.em16@physics.msu.ru

Аннотация. В работе рассмотрен метод моделирования энтропии и информационных потоков в пространственно-неоднородных статистических системах. Показано, что дефекты структуры моделей оказывают значительное влияние на энтропию системы. Обсуждается применение данного метода моделирования для описания процессов, происходящих в стохастических нейронных сетях. Это показывает, как идеи критичности могут служить фундаментом для построения вычислительных систем.

Ключевые слова: энтропия, метод Монте-Карло, критическое поведение, дефекты, модель Изинга, нейронные сети.

Введение

Статистическая физика и теория информации представляют основу для понимания поведения статистических систем, в частности искусственных стохастических нейронных сетей, построенных на основе решеточных спиновых систем. К таким нейронным сетям относятся, например, нейронная сеть Хопфилда, а также предложенная Д. Хинтоном нейронная сеть Больцмана [1]. За достижения в этой области Хопфилд и Хинтон были удостоены Нобелевской премии по физике в 2024 году. Эти работы указывают на глубокую связь между современной нейронаукой и статистической теорией спиновых систем. Также было показано, что критическое поведение, характерное для решеточных статистических систем, также наблюдается в динамике неокортекса мозга, что указывает на крайне общий характер возникающих в таких системах процессах [2–4]. Так динамика в неокортексе может быть тщательно проанализирована с использованием методов статистической физики. В частности, применение неравновесной статистической механики показало, что нервная ткань функционирует вблизи критической точки между упорядоченным и неупорядоченным состояниями — явление, имеющее важные последствия для обработки информации.

Важнейшим явлением в стохастических системах является возникновение критического поведения. На-

пример, критическая динамика наблюдается в целом ряде систем, таких, как модели лесных пожаров, модели распространения эпидемий, модели в сейсмологии, нейронной активности в мозге и нервных тканях [5–7]. В этих моделях проявляется критическая динамика, приводящая к появлению лавин всплесков, распределение которых по величине следует степенному закону своими размерами и продолжительностями. Это критическое поведение возникает, когда генерация и затухание пиковой активности становятся сбалансированными, создавая переход из области среднего поля (где флуктуации незначительны) в область, сильно подверженную флуктуациям. Эта точка равновесия представляет собой особое состояние, при котором система приобретает уникальные свойства.

Литературный обзор

Из-за высокой плотности и большой пространственной протяженности нейронных взаимодействий в неокортексе существует область «среднего поля», в которой влияние флуктуаций минимально. В этом режиме данная модель обеспечивает хорошее описание поведения системы без необходимости учитывать подробные корреляции между нейронами. Однако по мере приближения системы к некоторой критической величине флуктуации становятся все более важными, и аппроксимация среднего поля выходит из строя.

Переход между этими режимами характеризуется законами масштабирования, которые наблюдались в различных экспериментах, включая измерения на препаратах срезов неокортикальной коры животных под наркозом и даже тканей, пораженных эпилепсией [3]. Эти законы масштабирования показывают, насколько чувствительна система к небольшим возмущениям вблизи критической точки, когда крошечные входные данные могут вызвать каскады активности по всей сети.

В то время как статистическая механика описывает коллективную динамику нейронных систем, теория информации предоставляет инструменты для точной количественной оценки того, сколько информации эти системы передают и насколько эффективно они это делают.

Нервная система представляет зависящие от времени сигналы — последовательности всплесков. Поскольку все они по существу идентичны, информация должна передаваться в первую очередь в зависимости от их времени пуска. При анализе подобных систем мы можем измерить общую энтропию всей системы, и, как в дальнейшем выяснится, также каждого ее элемента, а следовательно, сделать выводы о направлении и изменении потока энтропии внутри моделируемой системы.

Нейронные системы, работающие вблизи критических точек, обладают рядом преимуществ при обработке информации, которые могут объяснить, почему они оптимальны для функционирования в этом режиме. При критичности [7, 8]:

1. Динамический диапазон (чувствительность к входным сигналам различной величины) максимален;
2. Оптимизирована передача информации между нейронами;
3. Система может сохранять память о прошлых состояниях, оставаясь при этом отзывчивой к новым входным данным;
4. Нейронные лавины обеспечивают эффективный механизм распространения информации по сети.

Эти свойства проявляются как естественные следствия баланса между возбуждением и торможением, которые характеризуют критическую нейронную динамику. Когда система работает слишком далеко от критичности — либо в высокоупорядоченном (докритическом или низкотемпературном), либо в сильно неупорядоченном (сверхкритическом или высокотемпературном) состоянии — ее возможности по обработке информации становятся ограниченными.

Математическая модель

Было показано, что более простые сетевые архитектуры могут быть вполне адекватны для моделирования

нейронных систем, что снижает вычислительные затраты и сложность обучения, а также дают представление о взаимосвязи между физическими системами и их представлением в нейронных сетях [8].

Для построения теоретической модели была выбрана двумерная модель Изинга с пространственными неоднородностями [9]. Она состоит из бинарных переменных $\phi_x = \pm 1$ (спинов), расположенных на квадратной решетке, с взаимодействиями ближайших соседей с константой взаимодействия J . Распределение вероятностей соответствует распределению Больцмана:

$$p_i = \frac{e^{-\beta E_i}}{Z}. \quad (1)$$

Здесь E_i — энергия i -ого состояния, β — обратная температура, а Z — статистическая сумма, равная $Z = \sum e^{-\beta E_i}$, где J — энергия взаимодействия. Энергия же всей системы равна:

$$E = -J \sum_{x,\mu} \phi_x \phi_{x+\mu}, \quad (2)$$

или же:

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}. \quad (3)$$

Но самое важное, что эта система демонстрирует фазовый переход при критическом значении константы связи $k = J\beta \approx 0,44$.

Из формул:

$$F = E - \frac{S}{\beta}, \quad (4)$$

где S — энтропия

$$E = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta}, \quad (5)$$

Получаем:

$$S|_{\beta_1}^{\beta_2} = \beta E(\beta)|_{\beta_1}^{\beta_2} - \int_{\beta_1}^{\beta_2} E(\beta') d\beta'. \quad (6)$$

Полученная формула имеет важное значение по нескольким причинам:

1. Она позволяет численно посчитать энтропию системы, зная, как значения энергии системы E при различных β ;
2. Наиболее удобно рассматривать это уравнение из высокотемпературного приближения ($\beta \rightarrow 0$). Тогда:

$$\Delta S = S - S_0 = \beta E - \int_0^{\beta} E(\beta') d\beta', \quad (6.1)$$

где S_0 — значение энтропии при ($\beta \rightarrow 0$), соответствующее ее максимальному значению.

- Из того, что энергия системы, равная сумме энергий всех компонент системы, входит в формулу линейно, следует, что энтропия также является аддитивной величиной. То есть энтропию можно рассматривать в конкретных узлах решетки.

Аналитические результаты

Статистическая сумма для высокотемпературного приближения:

$$Z = 2^V (\cosh \kappa)^{2V} \sum_{\kappa} (1 + V(\tanh \kappa)^4 + 2V(\tanh \kappa)^6 + \dots)^{2V}, \quad (7)$$

где V — количество узлов решетки.

Разложим гиперболические функции в ряд Тейлора до 4-го порядка по κ :

$$Z = 2^V \left(1 + \frac{\kappa^2}{2} + \frac{\kappa^4}{4!} \right)^{2V} \sum_{\kappa} \left(1 + V \left(\kappa - \frac{\kappa^3}{3} \right)^4 + \dots \right). \quad (8)$$

Тогда, используя формулу (3), получим:

$$E \sim -J \left(6\kappa - \frac{11}{12}\kappa^3 \right), \quad (9)$$

и с учетом формулы (6.1), получим, что изменение энтропии системы зависит от κ следующим образом:

$$\Delta S \sim -3\kappa^2 + \frac{11}{16}\kappa^4 \quad (10)$$

Результаты численного моделирования

Моделирование проводилось с помощью метода Монте-Карло. Были рассмотрены спиновые решетки разного размера для оценки величины объемного эффекта. При анализе использовался стандартный алгоритм тепловой бани [10].

В начале представим результаты пространственно-однородной системы. Методом Монте-Карло были вычислены значения внутренней энергии при различной температуре $t = 1/\beta$. С помощью формулы (6.1) численно посчитаем изменение энтропии системы и сравним результаты численного моделирования с аналитическими результатами, представленными в предыдущем параграфе. На Рис. 1 показано хорошее согласие результатов численного моделирования с аналитическим прогнозом. Видно, что небольшое расхождение наблюдается только в окрестности критической точки. Это позволяет надеяться, что предложенный алгоритм расчета плотности энтропии дает хорошую оценку и может быть применен и к интересующему случаю пространственно-

однородной системы.

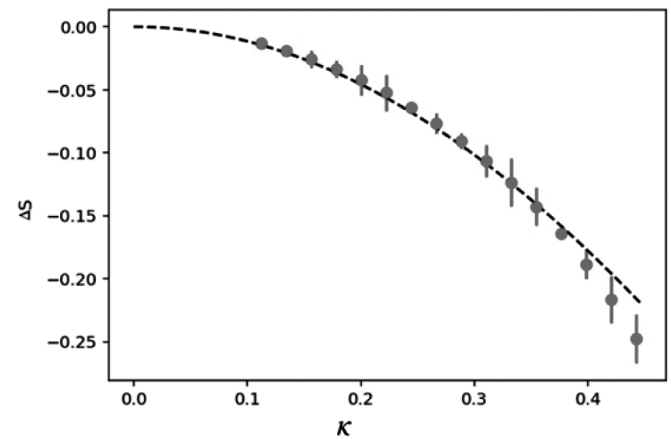


Рис. 1. Сравнение численного моделирования энтропии (серые точки) с аналитическими результатами (черная пунктирная кривая)

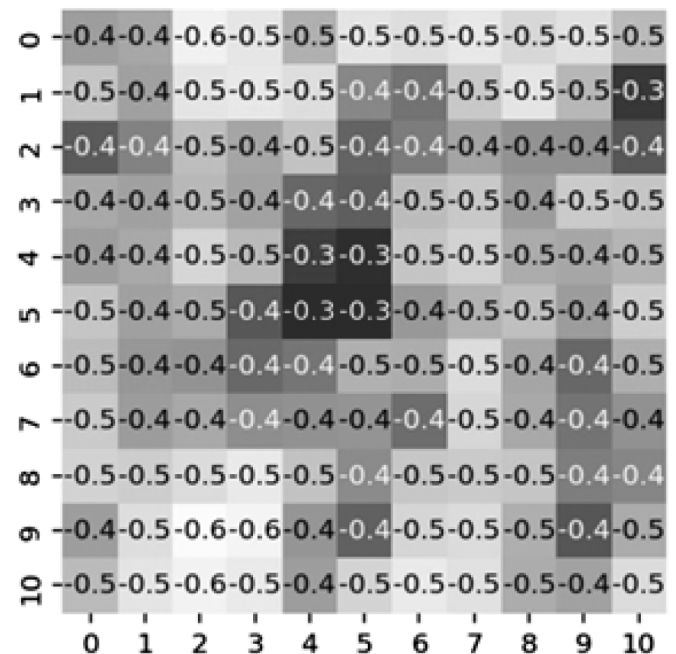


Рис. 2. Результаты численного моделирования энтропии в каждой точке системы с пространственным дефектом структуры (дефект расположен в точке с координатами (5,5))

На Рис.2 представлены данные численного моделирования системы с пространственным дефектом структуры (дефект расположен в точке с координатами (5,5)). Цветом представлена плотность энтропии в системе. Видно, что в центральной части (в окрестности дефекта) плотность энтропии значительно выше, чем с краю. Это, очевидно, связано с тем, что узлы решетки имеют меньше связей в окрестности дефекта типа вакансии, и, таким образом, их состояние значительно более неопределенное. Также видно, что влияние дефекта распространяется достаточно широко. Это связано, очевидно, с близостью нашей системы к критической точке.

Заключение

Основной вывод работы заключается в том, что в статистических системах плотность энтропии существенно зависит от пространственных неоднородностей. Особенно остро эта зависимость проявляется в окрестности критической точки. Этот вывод важен, в частности, для построения нейронных сетей, использующих изменение локальной плотности энтропии и информационные потоки в процессе обучения, самообучения и самоорганизации. Из приведенного анализа видно, эти процессы наиболее интенсивно будут идти в окрестности критической точки моделей.

Также было показано на данном примере, что объединение методов статистической механики и теории информации могут раскрыть общие принципы работы как искусственных нейронных систем, так, возможно, и мозга. Такие системы могут функционировать как критические системы, оптимизирующие процесс обработки

информации на основе анализа энтропии и информационных потоков, вызванных пространственной неоднородностью системы. Также приведенный синтез подчеркивает важную роль математического и численного моделирования в выявлении динамики, близкой к критическим точкам, где в системах, таких как нейронные сети, поддерживается баланс между порядком и хаосом. Численные методы, такие как моделирование методом Монте-Карло или анализ стохастических дифференциальных уравнений, позволяют количественно оценить, как колебания вблизи критических состояний обеспечивают высокую чувствительность к входным данным при сохранении стабильности внутренних представлений.

Таким образом, синтез математического моделирования, численных методов и междисциплинарных подходов открывает путь к созданию более эффективных алгоритмов, углублению понимания работы мозга и разработке инновационных вычислительных парадигм на стыке физики и искусственного интеллекта.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Основы теории сложных систем / М.-Ижевск: Институт компьютерных исследований. 2007. 620 с.
2. Тархов Д.А. Нейронные сети. Модели и алгоритмы / М.: Радиотехника. 2005–2006. 256 с.
3. Писарчик А.Н., Храмов А.Е. Стохастические процессы в нейронной сети головного мозга и их влияние на восприятие и принятие решений // Успехи физических наук. 2023. Т. 193. № 12. С. 1298–1324
4. Куций Н.Н., Подкорытов А.А. Перспективы применения нейронных сетей для адаптации стохастических моделей // В сборнике: Перспективы развития технологии переработки углеводородных и минеральных ресурсов. Материалы XII Всероссийской научно-практической конференции с международным участием. 2022. С. 224–226.
5. Феофанов М.А. Принцип самоорганизованной критичности // В сборнике: Современная наука и молодые учёные. сборник статей Международной научно-практической конференции. 2020. С. 13–16.
6. Гараева А.Я., Сидорова А.Э., Твердислов В.А., Левашова Н.Т. Модель предпосылок видообразования в представлениях теорий перколяций и самоорганизованной критичности // Биофизика. 2020. Т. 65. № 5. С. 932–948.
7. Мазуров М.Е. Физика режимов с самоорганизованной критичностью на кромке устойчивости // Известия Российской академии наук. Серия физическая. 2022. Т. 86. № 2. С. 298–304.
8. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование аналоговой самообучающейся нейронной сети на основе мемристивных элементов с учетом стохастической динамики переключения // Российские нанотехнологии. 2021. Т. 16. № 6. С. 799–809.
9. Мейлихов Е.З. Трагическая и счастливая жизнь Эрнста Изинга // Природа. 2006 г. №7. С.237–242
10. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло и смежные вопросы / М.: Мир. 1975 217 с.

© Зарькова Елизавета Михайловна (zarkova.em16@physics.msu.ru)

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»