Università degli Studi di Padova

Dipartimento di Fisica e Astronomia "Galileo Galilei"
Corso di Laurea in Fisica

Tesi di Laurea Triennale

Titolo

Un approccio di ottimizzazione multiobiettivo alla Meccanica Statistica

Relatore
Prof. Amos Maritan

Laureando
Federico Sonet

Anno Accademico 2021/2022

Introduzione

La maggior parte dei sistemi complessi presentano molteplici vincoli che devono essere soddisfatti simultaneamente, cioè dove il costo e l'efficienza sono confrontati per ottenere il miglior compromesso possibile. I metodi di ottimizzazione cercano questo compromesso ed in particolare il metodo alla Pareto o multi ottimizzazione riesce ad ottimizzare simultaneamente una serie di parametri da cui il sistema dipende.

Un esempio di facile interpretazione è quello per cui si ha una certa somma di denaro per migliorare un appartamento. Si vorrà sicuramente apportare dei miglioramenti di tipo estetico, ma anche funzionale, arredare in un certo modo, e forse apportare modifiche strutturali. Per capire quale sia il miglior compromesso nell'utilizzare tale somma, si può applicare al problema la teoria di Pareto, la cui soluzione sarà proprio il compromesso ottimale.

Questo approccio verrà presentato in maniera assolutamente generale cosicché possa essere utilizzato anche in altri ambiti, per esempio la biologia o modelli di network, ma anche nella teoria di controllo della dinamica complessa. La teoria di Pareto, cioè, viene usata in tutti i sistemi che presentano un certo livello di complessità dovuto alla numerosità dei parametri da ottimizzare. In ognuno di questi ambiti però non emergono proprietà di carattere generale; l'universalità dell'approccio alla Pareto emerge quando esso viene comparato alla fisica delle transizioni di fase.

In molti sistemi la fase disordinata e quella ordinata sono separate da una transizione di fase, e l'ordine viene ottenuto tramite la minimizzazione dell'energia che è un calcolo previsto anche dalla teoria di Pareto. Cioè la cornice teorica farà utilizzo di concetti provenienti dalla termodinamica, anche se poi viene utilizzata in ambiti diversi.

In questo studio, dopo aver presentato la teoria dell'ottimizzazione alla Pareto, la si userà applicandola al modello di Ising. Così facendo si otterrà una soluzione al modello, cioè si troverà la temperatura alla quale avviene la transizione di fase.

1 Ottimizzazione alla Pareto

1.1 Concetti matematici

L'ottimizzazione multi-obiettivo getta le sue basi in alcuni concetti matematici di fondamentale importanza.

Quando si parla di problemi di ottimizzazione multi-obiettivo (MOO), si sta studiando un problema in cui si cerca di minimizzare $\{f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), ..., f_k(\mathbf{x})\}$, con $\mathbf{x} \in S \subset \mathbb{R}^n$. La famiglia di funzioni o funzioni target da minimizzare non sono altro che l'insieme di caratteristiche matematiche che costituiscono il problema. Queste formano il vettore[1] $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), ..., f_k(\mathbf{x}))$ dove si hanno $k \geq 2$ funzioni $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$; esso viene anche denominato vettore oggetto $\mathbf{z} = (z_1, z_2, ..., z_k)$. Mentre il vettore $\mathbf{x} = (x_1, x_2, ..., x_n)$, chiamato vettore di decisione oppure possibile soluzione, appartiene alla regione $S \subset \mathbb{R}^n$. L'immagine di tale regione $\mathbf{f}(S) = Z \subset \mathbb{R}^k$ è lo spazio target.

L'obiettivo è quello di trovare, tra tutti i possibili vettori $\mathbf{x} \in S$, quelli che minimizzano tutte le f_i simultaneamente. L'ottimizzazione alla Pareto, quindi, si definisce come segue.

Definizione 1.1. Un vettore di decisione $\mathbf{x} \in S$ è Pareto ottimale se domina qualsiasi altro vettore di decisione $\mathbf{y} \in S$, cioè se è tale che $f_i(\mathbf{x}) \leq f_i(\mathbf{y})$ per ogni $i = 1, ..., k$ e esiste almeno un indice j per cui $f_j(\mathbf{x}) < f_j(\mathbf{y})$.

Esiste anche una definizione di vettore debolmente pareto ottimale, che sostituisce i $\leq$ con $<$.

Tra tutte le possibili soluzioni, quindi, ce ne saranno alcune che saranno Pareto ottimali, nel senso della definizione appena enunciata. Nell'immagine della regione S si va a delineare quella che viene chiamata frontiera di Pareto (o set ottimale di Pareto), formato da tutte quelle $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ con $\mathbf{x}$ vettore di decisione Pareto ottimale. È quella parte della regione Z che minimizza tutte le f_i simultaneamente. Questa frontiera può assumere qualsiasi forma, può essere convessa come no, avere punti angolosi o finire in maniera brusca o addirittura essere non connessa; più avanti si vedrà come tale forma influenza le soluzioni del problema. In Figura 1 si può comprendere meglio il passaggio dalla regione S a quella Z, grazie alla funzione vettoriale $\mathbf{f}(\mathbf{x})$.

È opportuno ora comprendere se una soluzione può essere considerata tale per tutto il set, quindi globale, oppure se è una soltanto locale. Nel farlo bisogna definire il concetto di funzione e insieme convessi.

Definizione 1.2. Una funzione $f_i : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ è convessa se per tutte le $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2 \in \mathbb{R}^n$ vale che

$$f_i(\beta\mathbf{x}^1 + (1-\beta)\mathbf{x}^2) \leq \beta f_i(\mathbf{x}^1) + (1-\beta) f_i(\mathbf{x}^2)$$

per tutte le $0 \leq \beta \leq 1$.

Un insieme $S \subset \mathbb{R}^n$ è convesso se $\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^2 \in S$ implica che $\beta\mathbf{x}^1 + (1-\beta)\mathbf{x}^2 \in S$ per tutte le $0 \leq \beta \leq 1$

Segue naturalmente la definizione di problema di ottimizzazione multi-obiettivo (MOO) convesso

[1] In questo testo ogni vettore verrà scritto con la notazione in grassetto, mentre le componenti sono scritte in corsivo

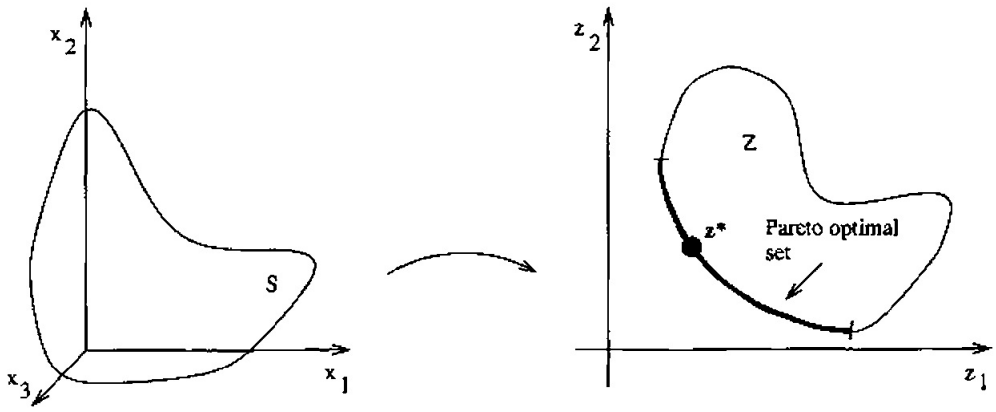


Figura 1: Qui si può vedere come la funzione $\mathbf{f}(\mathbf{x})$ mappa lo spazio S in Z.

Definizione 1.3. Un MOO è convesso se tutte le funzioni e gli insiemi che lo definiscono sono convessi.

Ora si può riprendere il concetto di vettore localmente Pareto ottimale.

Definizione 1.4. Un vettore di decisione $\mathbf{x} \in S$ è localmente Pareto ottimale se esiste $\delta > 0$ tale che $\mathbf{x}$ è Pareto ottimale in $S \cap B(\mathbf{x}, \delta)$.

Naturalmente ogni soluzione che sia globalmente Pareto ottimale è anche localmente ottimale. L'inverso vale soltanto per i MOO convessi.

Teorema 1.1. *Sia un MOO convesso, allora ogni soluzione localmente Pareto ottimale è anche globalmente Pareto ottimale.*

Dimostrazione. Prendiamo un vettore $\mathbf{x}^* \in S$ che sia localmente Pareto ottimale, allora $\exists\ \delta > 0$ e una palla $B(\mathbf{x}^*, \delta)$ centrata in $\mathbf{x}^*$ tale che non c'è nessun altro vettore $\mathbf{x} \in S \cap B(\mathbf{x}^*, \delta)$ per cui $f_i(\mathbf{x}) \leq f_i(\mathbf{x}^*)$ per tutte le $i = 1, ..., k$ e per almeno un indice j è $f_j(\mathbf{x}) < f_j(\mathbf{x}^*)$.

Ora per assurdo assumiamo che $\mathbf{x}^*$ non sia globalmente Pareto ottimale, cioè che $\exists\ \mathbf{x}_0 \in S$ tale che

$$f_i(\mathbf{x}_0) \leq f_i(\mathbf{x}^*) \text{ per tutti gli indici } i = 1, ..., k \text{ e per qualche } j\ f_j(\mathbf{x}_0) < f_j(\mathbf{x}^*) \quad (1)$$

Ora si definisca $\hat{\mathbf{x}} = \beta\mathbf{x}_0 + (1-\beta)\mathbf{x}^*$, dove $0 < \beta < 1$ viene scelto tale che $\hat{\mathbf{x}} \in B(\mathbf{x}^*, \delta)$. La convessità di S implica che $\hat{\mathbf{x}} \in S$.

Per la convessità della funzione e considerando (1), otteniamo

$$f_i(\hat{\mathbf{x}}) \leq \beta f_i(\mathbf{x}_0) + (1-\beta) f_i(\mathbf{x}^*) \leq \beta f_i(\mathbf{x}^*) + (1-\beta) f_i(\mathbf{x}^*) = f_i(\mathbf{x}^*)$$

per tutte le $i = 1, ..., k$. Ora dato che $\mathbf{x}^*$ è localmente Pareto ottimale e $\hat{\mathbf{x}} \in B(\mathbf{x}^*, \delta)$, si deve avere per forza che $f_i(\hat{\mathbf{x}}) = f_i(\mathbf{x}^*)$ per tutte le i.

Per cui $f_i(\mathbf{x}^*) \leq \beta f_i(\mathbf{x}_0) + (1-\beta) f_i(\mathbf{x}^*)$, risolvendo e dividendo per $\beta > 0$, si ottiene $f_i(\mathbf{x}^*) \leq f_i(\mathbf{x}_0)$ per tutte le i. Ma per l'affermazione (1) ci deve essere $f_j(\mathbf{x}^*) > f_j(\mathbf{x}_0)$ per qualche j, il che è un assurdo. Allora, $\mathbf{x}^*$ è globalmente Pareto ottimale. $\square$

Questo risultato sarà utile per capire come le funzioni e gli insiemi influenzano il fronte di Pareto e come da essi si possono ricavare soluzioni di validità globale.

Esistono molti altri tipi di ottimizzazione che prendono le mosse da quello alla Pareto, ma in questo contesto non verranno affrontati e per ciò che segue sarà sufficiente ciò che è stato mostrato in questa sezione.

1.2 Metodo pesato (weighting method)

Un problema di ottimizzazione multi-obiettivo può essere risolto tramite numerosi metodi diversi tra loro, scelti a seconda del tipo di problema o di ciò che ne si vuole estrapolare. Effettivamente un problema MOO non è di facile approccio, in quanto può non esistere una forma analitica che descriva bene la frontiera di Pareto o ancora, se anche ci fosse potrebbe risultarne difficile la minimizzazione.

Fortunatamente, come si vedrà più avanti, una forma analitica nel caso del modello di Ising esiste, per cui basterà scegliere quale metodo può essere utilizzato per risolverlo. Uno di quelli più classici è il metodo pesato (weighting method) che consiste nel convertire il problema MOO in famiglie di problemi a singola ottimizzazione (SOO).

L'obiettivo di un MOO è quello di minimizzare le funzioni target rispetto al vettore di decisione, ma con questo metodo si considera invece la funzione

$$\Omega(\mathbf{x}, \Lambda) = \sum_i \lambda_i f_i(\mathbf{x})$$

dove si sono pesate le f_i con dei parametri esterni $\Lambda \equiv \{\lambda_i; i = 1, ..., k\}$. In questo modo si produce una funzione che viene chiamata *funzione energia* Ω la cui minimizzazione fornisce la soluzione del corrispondente SOO, cioè per ogni famiglia di λ_i corrisponde un problema di ottimizzazione a singolo obiettivo.

Questi parametri sono scelti in modo tale che $\sum_i \lambda_i = 1$ con $\lambda_i \geq 0$ per tutte le $i = 1, ..., k$. Si può dimostrare che una soluzione del problema MOO trovata con il metodo pesato è debolmente Pareto ottimale, ma comunque si può trovare anche un risultato più forte.

Teorema 1.2. *Se i coefficienti sono $\lambda_i > 0$ per ogni $i = 1, .., k$ allora il vettore soluzione del problema pesato è Pareto ottimale.*

Dimostrazione. Si prenda un vettore $\mathbf{x}^* \in S$ soluzione del problema pesato, ovvero che minimizzi Ω. Ora per assurdo si assuma che lo stesso vettore non sia Pareto ottimale. Quindi vuol dire che esiste un $\mathbf{x} \in S$ tale che $f_i(\mathbf{x}) \leq f_i(\mathbf{x}^*)$ per tutte le $i = 1, ..., k$ e per almeno un j si ha $f_j(\mathbf{x}) < f_j(\mathbf{x}^*)$. Ma visto che $\lambda_i > 0$ per ogni $i = 1, ..., k$ allora si ottiene $\sum_i \lambda_i f_i(\mathbf{x}) < \sum_i \lambda_i f_i(\mathbf{x}^*)$. Ma ciò contraddice il fatto che $\mathbf{x}^*$ sia soluzione del problema pesato. Per cui $\mathbf{x}^*$ deve anche essere Pareto ottimale. □

Teorema 1.3. *Se $\boldsymbol{x}^* \in S$ è una soluzione Pareto ottimale di un problema MOO convesso, allora esiste un $\Lambda = \{\lambda_i, i = 1, ..., k\}$ con $\sum_i \lambda_i = 1$ e $\lambda_i \geq 0$ per ogni $i = 1, ..., k$ per cui lo stesso vettore $\boldsymbol{x}^*$ è anche soluzione del problema pesato.*

Dimostrazione. Per la dimostrazione di questo teorema servirebbe affrontare un secondo metodo di risoluzione di un problema MOO alla Pareto. Per cui si rimanda al testo [1]. □

Con il metodo pesato si crea quindi una *superficie isoenergetica*, denominata $\tau_\lambda(\Omega)$, di dimensione $k-1$ che, procedendo con la minimizzazione di Ω, viene spinta fino a diventare tangente alla frontiera, evidenziando così la soluzione cercata. In Figura 2 si può osservare tale processo nel caso $k = 2$.

La terminologia usata non è casuale. Infatti, come si vedrà in seguito, tutta la teoria appena discussa può essere certamente utilizzata in tantissimi contesti diversi, ma uno di quelli più esemplari è la termodinamica. Si possono, cioè, descrivere le transizioni di fasi tramite l'ottimizzazione alla Pareto: esse vengono rappresentate tramite la superficie di Gibbs che è proprio la frontiera di Pareto cercata. Per questo si è scelto di chiamare alcune grandezze con nomi di matrice termodinamica. Da qui in avanti si capirà ancora meglio tale scelta.

1.3 Forma della frontiera

È già stato evidenziato che la forma della frontiera, quindi anche il tipo di problema che può essere convesso o altro, influenza le soluzioni.

Per riuscire ad averne una descrizione efficace si definiscono i parametri d'ordine $\{\theta_i\}$ che rappresentano le caratteristiche del problema che variano in risposta ai parametri $\{\lambda_i\}$. Essi devono rendere diverse transizioni di fase distinguibili e non devono fare emergere comportamenti banali dall'ottmizzazione.

Ci si può assicurare che queste due condizioni valgano se due vettori diversi $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in S$ vengono mappati nello stesso vettore soluzione $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{y})$ allora anche $\theta_i(\mathbf{x}) = \theta_i(\mathbf{y})$ e se la funzione $\vec{\theta}(\mathbf{x}) = (\theta_1(\mathbf{x}), ..., \theta_k(\mathbf{x}))$ non presenta non analiticità, ovvero se è abbastanza regolare.

Nel caso in cui $k = 2$ si riduce la complessità del problema senza perdere di generalità. Per questo si definisce

$$\Omega = \lambda f_1 + (1-\lambda) f_2$$

Mentre la superficie isoenergetica diventa:

$$\tau_\lambda(\Omega) = \left\{ (f_1, f_2) \ \mid \ f_2 = \frac{\Omega}{1-\lambda} - \frac{\lambda}{1-\lambda} f_1 \right\}$$

Così facendo, per tutti i problemi di tipo convessi, la soluzione si avrà quando la retta $\tau_\lambda(\Omega)$ incontra la frontiera di Pareto, e la corrispondenza tra il problema MOO e la fiamiglia di SOO si ha quando la pendenza della retta copre tutto l'intervallo $(-\infty, 0)$, come in Figura 2. Esistono però molti tipi di frontiere di tipo convesso, come rappresentato nelle Figure 3a, 3b, 3c. In questi casi si vede come il parametro d'ordine varia in funzione del paramertro λ. Nel caso della figura 3c, per esempio, la frontiera presenta un punto di non derivabilità, per cui la pendenza della retta tangente passa in maniera brusca da un valore ad un altro. Chiamando $d \equiv -\lambda/(1-\lambda)$, si ottengono i valori limite d^* nel caso delle Figure 3a e 3b e i d^+ e d^- nel caso della Figura 3c.

Allora se una frontiera di tipo convesso che finisce o inizia bruscamente o presenta un punto angoloso, si può parlare di transizioni di fase del secondo ordine, rappresentate dal $\theta(\lambda)$ che rimane costante per un intervallo ed è continuo. Da qui si capisce che se la derivata della frontiera è ben definita, allora non esistono transizioni di fase, mentre se esistono comportamenti del tipo appena descritto, ci si trova in presenza di una transizione.

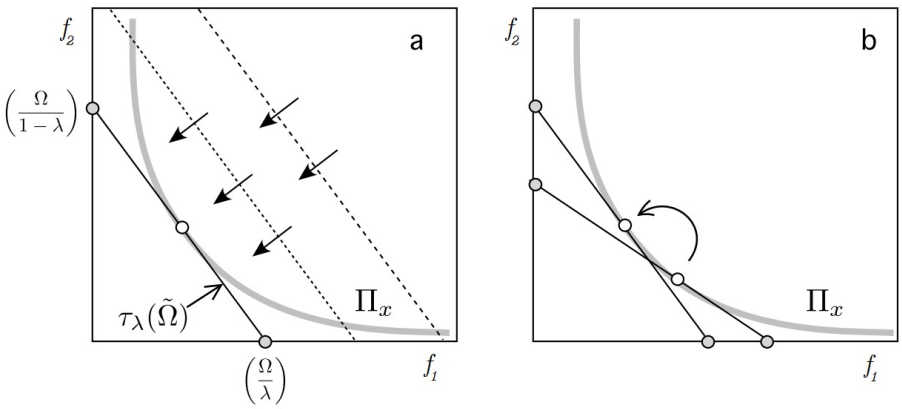


Figura 2: In **a** si vede come il metodo pesato si comporta con la frontiera di Pareto. La superficie $\tau_\lambda(\Omega)$, che nel caso $k = 2$ è una retta, si spinge fino a diventare tangente alla frontiera stessa, evidenziando così una soluzione. In **b** invece viene mostrato come cambiando il parametro di controllo λ, e quindi anche il SOO corrispondente, si possono trovare diverse soluzioni al problema MOO.

Esistono anche transizioni del primo ordine, o discontinue, rappresentate da frontiere di tipo concavo. In queste il parametro d'ordine $\theta(\lambda)$ è invece discontinuo, a differenza del caso appena visto. Anche qui si possono presentare diversi casi, che però non verranno affrontati.

Grazie al metodo pesato, con un fronte convesso si trova sempre una soluzione al problema a singola ottimizzazione considerato, grazie al Teorema 1.3. A sua volta, la scelta della famiglia di $\{\lambda_i\}$ fornisce una soluzione anche al MOO corrispondente. Lavorando sulla stessa frontiera, quindi sullo stesso MOO, ma cambiando il SOO, cioè i parametri $\{\lambda_i\}$, si trova sempre una soluzione.

La scelta sta poi nelle mani di quello che viene chiamato il *decision maker* [2], cioè colui o colei che avrà il compito di dare la giusta interpretazione alle soluzioni trovate grazie al metodo utilizzato.

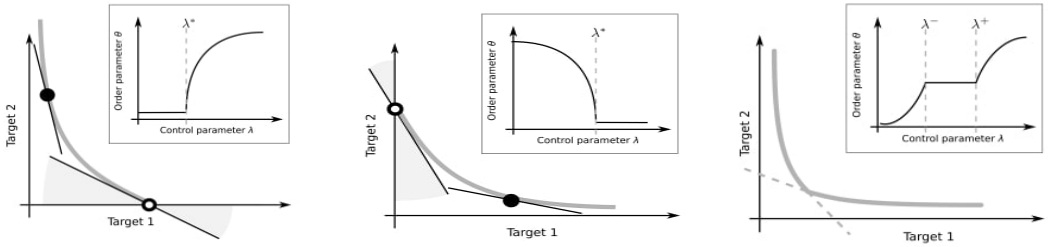
2 Modello di Ising

2.1 Una breve introduzione

Per capire come l'applicazione dell'ottimizzazione alla Pareto possa essere usata per risolvere il modello di Ising, è opportuno partire con una breve introduzione a tale modello. Qui si cercherà di spiegarne gli aspetti base per arrivare infine a descriverne l'hamiltoniana e quindi la funzione di partizione. Essa poi sarà utile a costruire la curva che sarà il fronte di Pareto su cui si andrà a lavorare.

Il modello di Ising venne introdotto per spiegare le fasi ferromagnetiche e paramagnetiche della materia, con le particelle negli stati *spin up* oppure *spin down*. Ma può essere usato anche per studiare un gas di reticolo come approssimazione di particelle interagenti nel sistema gran canonico, dove né l'energia né il numero di

[2] Il decision maker spesso crea una funzione, chiamata *value function*, che gli permette di capire quale sia il percorso migliore nella risoluzione del problema. In questo caso tale funzione è proprio la funzione energia Ω (o la sua controparte negativa).



(a) (b) (c)

Figura 3: In **3a** la frontiera di Pareto copre l'intervallo $d \in (-\infty, d^*)$ e termina bruscamente nella parte bassa a destra. Nell'inserto si vede come il parametro d'ordine θ varia in funzione del parametro di controllo λ: in $\lambda < \lambda^*$, con $\lambda^* = -d^*/(1-d^*)$, θ rimane costante e qualsiasi soluzione nel intervallo è ottimale alla Pareto. In $\lambda = \lambda^*$ c'è un cambio repentino nella $\frac{d\theta}{d\lambda}$, sempre mantenendo $\theta(\lambda)$ rimane continua. Questo dimostra che la transizione di fase rappresentata da una frontiera convessa è continua, anche se possono esserci discontinuità nella $\frac{d\theta}{d\lambda}$. Anche in **3b** e in **3c** si presentno situazioni simili.

particelle è conservato. Costruiamo l'hamiltoniana come segue:

$$H_N(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) = \sum_{1=1}^{N} \frac{p_i^2}{2m} + V_N(\mathbb{Q})$$

Dove N è il numero di particelle presenti e $\mathbb{Q}$ e $\mathbb{P}$ sono le variabili posizione e momento rispettivamente; cioè $\mathbb{Q} = (q_{1,x}, q_{1,y}, q_{1,z}, q_{2,x}, ...)$ e $\mathbb{P} = (p_{1,x}, p_{1,y}, p_{1,z}, p_{2,x}, ...)$ se le dimensioni con cui si ha a che fare sono $d = 3$, ma si può facilmente generalizzare a diverse dimensioni. Mentre $V_N(\mathbb{Q})$ è il potenziale d'interazione tra le particelle.

Per un calcolo approssimato della funzione di partizione gran canonica consideriamo come un reticolo composto da V siti o nodi, che vanno a formare il volume del reticolo (nel caso di dimensione $d = 3$, ma esso può essere usato anche con altre dimensioni; come lunghezza $d = 1$, superficie $d = 2$, ecc.). La spaziatura a tra i siti è costante ed in ogni sito può trovarsi al massimo una sola particella.

In questo modello, ogni nodo del reticolo può trovarsi in uno di due possibili stati: nodo con particella oppure nodo vuoto. Per questo viene considerata la variabile dicotoma σ_x cosicché:

$$\sigma_x = \begin{cases} 1 & \text{se una particella occupa il nodo } x \\ -1 & \text{se il nodo } x \text{ è vuoto} \end{cases}$$

Con questa variabile si riesce ad approssimare il potenziale con termini di interazione a due corpi nel modo seguente

$$V_N(\mathbb{Q}) = -\epsilon_0 \sum_{<x,y>} \left(\frac{1+\sigma_x}{2}\right)\left(\frac{1+\sigma_y}{2}\right)$$

con ϵ_0 il minimo del potenziale di interazione tra le due particelle considerate, come rappresentato in figura. Cioè ogni particella nella posizione x interagisce soltanto con le particelle prime vicine nella posizione y, tale che $|x - y| = a$.

Ora considerando che tale potenziale presente nell'hamiltoniana, andrà inserito nella funzione di partizione, è utile anche capire come calcolare quest'ultima. Sappiamo che:

$$Z = e^{\beta PV} = \sum_N \frac{1}{N!} \int \prod_i \frac{d^3 q_i d^3 p_i}{h^3} \ \ exp\Big\{ -\beta\big[H_N(\mathbb{Q}, \mathbb{P}) - \mu N\big]\Big\}$$

Integrando sui momenti si ottiene una costante che si può portare fuori; inoltre, andando ad inserire il potenziale già nominato in precedenza, si ottiene infine una funzione di partizione nella forma:

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \cdots \sum_{\sigma_V=\pm 1} exp\Big\{ k \sum_{<x,y>} \sigma_x \sigma_y + h \sum_x \sigma_x \Big\} \tag{2}$$

dove $k = \beta J$, dipende dalla temperatura e dal minimo del potenziale (infatti $J = \epsilon_0/4$), mentre $h = \beta b$ svolge la funzione di un potenziale chimico e dipende dalla temperatura e dal campo magnetico esterno b. Si può notare che la somma viene fatta su tutti i nodi del reticolo: essa viene fuori dall'integrazione sulle posizioni.

Inoltre, nelle interazione tra primi vicini, l'esponenziale $e^{k \sum \sigma_x \sigma_y}$ assume due possibili valori: e^k se i primi vicini hanno gli spin allineati o e^{-k} se invece sono disallineati.

Da (2) possiamo estrapolare l'hamiltoniana ridotta:

$$H(\sigma|J, b) = -J \sum_{<x,y>} \sigma_x \sigma_y \ - b \sum_x \sigma_x \tag{3}$$

Questa viene divisa in due contributi:

$$H(\sigma|J, b) = H_0(\sigma) + H_1(\sigma)$$

con

$$\begin{aligned} H_0(\sigma) &= -J \sum_{<x,y>} \sigma_x \sigma_y \\ H_1(\sigma) &= -b \sum_x \sigma_x \end{aligned} \tag{4}$$

Quindi la più semplice hamiltoniana per il modello di Ising è rappresentata da H_0 e verrà usata per la trattazione successiva.

Ora però è necessario comprendere come la termodinamica rientra nel riquadro dei problemi di ottimizzazione multiobiettivo.

2.2 Termodinamica come MOO

Si è detto che la termodinamica può rientrare in questa cornice teorica, tanto che la terminologia utilizzata deriva proprio da essa. Bisognerà quindi individuare lo spazio in cui viene definita la frontiera di Pareto, ovvero capire da dove deriva il problema di ottimizzazione multiobiettivo, nel caso in cui si consideri un sistema termodinamico.

Quindi si inizia considerando un sistema fisico qualsiasi s_j con energia E_j di uno spazio arbitrario e astratto $s_j \in \Sigma$. Se ogni configurazione o stato si presenta con una

certa probabilità $P_i(s_j)$ allora si crea un ensemble P ($P_i \in P$) con una distribuzione di probabilità

$$\sum_j P_i(s_j) = 1$$

sullo spazio Σ. Ora si possono definire le funzioni di energia interna ed entropia:

$$U(P_i, \Sigma) = \sum_j P_i(s_j) E_j \tag{5}$$

$$S(P_i, \Sigma) = \sum_j P_i(s_j) log(P_i(s_j)) \tag{6}$$

In realtà queste funzioni vengono definite anche se non assumono significato fisico. Infatti esse mappano $P_i \in P$ nel piano $U - S$ dove la dominanza nel senso di Pareto è ben definita, e quindi dove si può trovare quel sottoinsieme $\Pi \subset P$ che massimizza S e minimizza U contemporaneamente. Questo perché all'equilibrio termodinamico si arriva proprio cercando di minimizzare U o massimizzando S; anche se una delle due quantità non viene minimizzata, si può comunque creare un MOO riferito allo specifico sistema termodinamico dato che la teoria funziona anche con la massimizzazione.

Così facendo, si riesce anche a definire la funzione lineare Ω che pesa U ed S in maniera lineare e che minimizzata restituisce la soluzione per il problema SOO corrispondente

$$min\big\{\Omega(U, S; \lambda_U, \lambda_S \equiv \lambda_U U + \lambda_S S\big\}$$

da cui

$$min\big\{\hat{\Omega} \equiv \frac{\Omega}{\lambda_U} = U + \frac{\lambda_S}{\lambda_U} S\big\} \tag{7}$$

Ma ora vale la pena entrare ancora più nello specifico, assumendo di lavorare con un ensemble ben preciso, così da fornire un significato fisico alla trattazione. Infatti, all'equilibrio termodinamico, le distribuzioni che permettono di massimizzare S tenendo fisso U corrispondono all'ensemble microcanonico e possono essere mappate nel piano $U - S$ attraverso le equazioni (5) e (6): per ogni scelta di U, massimizzando S si ottiene il punto della frontiera di Pareto del corrispondete MOO (descritto sopra).

Ancora, dalle leggi della termodinamica si può arrivare a definire

$$F = U - TS = U - S/\beta \tag{8}$$

l'energia libera di un sistema che viene minimizzata all'equilibrio, passando cioè dal microcanonico al canonico. F è proprio la funzione che pesa U e S cioè $\hat{\Omega} \equiv F$ con $\lambda_S/\lambda_U = -T = -1/\beta$. Così si capisce anche che i valori $(\lambda_S/\lambda_U)^{*,\pm}$ trovati nella sezione 1.3 corrispondono alle temperature a cui avvengono le transizioni di fase.

Visto che nel caso termodinamico c'è una quantità che deve essere massimizzata, allora le ipotesi del Teorema 1.2 vengono soddisfatte considerando la minimizzazione di $-S$. Per cui una soluzione che minimizzi F sarà anche Pareto ottimale. Ancora però non si può dire nulla sull'esistenza di una soluzione, in quanto non si conosce ancora la forma e la natura delle funzioni e della frontiera stessa.

La corrispondente superficie isoenergetica è definita da

$$\tau_\beta(F) = \big\{(U, S) | S = \beta U - \beta F\big\}$$

che viene spinta fino a diventare tangente alla frontiera, senza cambiarne la pendenza.

Con l'ensemble microcanonico, grazie alle equazioni (5) e (6), nel piano $U - S$ si definisce una curva del tipo $S(\bar{U})$ che è proprio la frontiera di Pareto cercata. Ogni punto al di fuori della frontiera si può dimostrare essere non Pareto ottimale. Così si riesce a definire il problema MOO associato, mentre il collasso che porta un MOO al SOO è fornito dall'ensemble canonico, dove l'energia libera viene minimizzata.

Ora si hanno tutti gli elementi per capire come applicare la teoria di Pareto al caso del modello di Ising

2.3 Modello di Ising come MOO

Si parte dalla più semplice hamiltoniana già trovata in (4) cioè $H = -J \sum_{<x,y>} \sigma_y \sigma_x$, dove si considera nullo qualsiasi eventuale campo esterno. Poi chiamando p la probabilità di trovare lo stato del campo medio[3] nello stato con particella nel nodo x, si riesce a definire semplicemente le funzioni termodinamiche

$$\begin{aligned} S &= -p\ log(p) - (1-p)\ log(1-p) \\ U &= -Jd(2p-1)^2 \end{aligned} \tag{9}$$

dove d è il numero di primi vicini. Risolvendo per p si ottiene la funzione

$$\bar{S}(U) = -\frac{1}{2}\big(1 + f(U)\big) log\left(\frac{1+f(U)}{1-f(U)}\right) - log\left(\frac{1-f(U)}{2}\right) \tag{10}$$

con

$$f(U) = \sqrt{\frac{-U}{Jd}} \tag{11}$$

Grazie all'equazione (10) si ottiene S come funzione di U. Come si è detto, se esiste una funzione del tipo $\bar{S}(U)$, allora essa forma la frontiera di Pareto cercata. Si è dimostrato quindi che il modello di Ising, o meglio una sua semplificazione, corrisponde proprio ad un problema di ottimizzazione multi obiettivo.

Vale la pena ora studiare tale funzione per capirne le caratteristiche. Infatti, prima di tutto di può notare che esiste solo per $U \in (-Jd, 0]$ ed in tale intervallo:

$$\frac{d\bar{S}}{dU} = -\frac{1}{2} f'(U) log\left(\frac{1+f(U)}{1-f(U)}\right) \tag{12}$$

che è positiva, cioè la funzione è monotona crescente. Questo garantisce che i punti non vengono dominati da altri punti quando U viene minimizzata e S massimizzata, per cui deve trattarsi della frontiera di Pareto cercata.

Dato che tale derivata è ben definita in tutto il tratto interno $U \in (-Jd, 0)$ ed è monotomicamente decrescente, allora non si hanno transizioni in tale intervallo, né di primo né di secondo ordine. Per cui è interessante vedere cosa succede agli estremi $U = -Jd$ e $U = 0$ dove si possono trovare quelle del secondo ordine. Quindi con qualche calcolo:

$$\begin{aligned} \lim_{U \to 0^-} \frac{d\bar{S}}{dU} &= \lim_{U \to 0^-} \frac{1}{4Jd} \sqrt{\frac{Jd}{-U}} log\left(\frac{1+\sqrt{-U/Jd}}{1-\sqrt{-U/Jd}}\right) \\ &= \frac{1}{2Jd} \end{aligned} \tag{13}$$

[3]Non si è trattata l'approssimazione di campo medio del modello di Ising, che richiederebbe un'ulteriore approfondimento.

e:

$$\lim_{U \to (-Jd)^+} \frac{d\bar{S}}{dU} = +\infty \tag{14}$$

Allora si capisce che quando $U \to (-Jd)^+$ la pendenza della derivata tende all'infinito, che per la superficie $\tau_\beta(F) = \{(U, S) | S = \beta U - \beta F\}$ si raggiunge solo se $\beta \to \infty$ cioè a temperatura nulla, e qui non succede nulla di speciale.

Mentre per l'altro estremo, si raggiunge una pendenza che non è nulla, cioè un'interruzione brusca della frontiera. Ciò rappresenta una transizione del secondo ordine, come in Figura 3a, e tale pendenza viene raggiunta proprio per $\beta = \frac{1}{2Jd}$. Andando ad diminuire ancora la β, il sistema non cambia, cioè la soluzione rimane la stessa, quella più entropica possibile. Quindi per $\beta \in (1/2Jd, +\infty)$ la pendenza della retta scivola sulla frontiera senza problemi, non presentando nessun tipo di transizione; mentre per $\beta \in (0, 1/2Jd]$ si ha un'unica soluzione che persiste, e quindi una transizione del secondo ordine, in quanto qualsiasi parametro d'ordine $\theta(\beta)$ rimane costante al variare di β.

Si è capito che il modello di Ising con l'approssimazione di campo medio presenta una transizione del secondo ordine esattamente a $\beta = \frac{1}{2Jd}$.

3 Conclusione

Dopo aver presentato la cornice teorica dell'ottimizzazione alla Pareto, accostandola alla fisica delle transizioni di fase, si è cercato di applicarla al modello di Ising. La transizione si fase del modello di Ising avviene alla temperatura trovata, cioè si passa dalla fase disordinata a quella ordinata quando si raggiunge tale temperatura.

In questo modo si riesce a risolvere il modello, che può essere applicato a diversi sistemi, in maniera lineare semplicemente considerando la pendenza della tangente al grafico $S(U)$.

Sarebbe opportuno capire meglio il tipo di transizione considerata, che in questo caso è una del secondo ordine, dove il parametro di controllo β varia con continuità. Per questo si rimanda ad una trattazione più dettagliata nel testo [2], in cui vengono spiegate le differenze tra transizioni del primo e del secondo ordine, e che cosa comportano per la frontiera di Pareto e le conseguenti soluzioni.

Riferimenti bibliografici

[1] Miettinen Kaisa M., *Non Linear Multiobjective Optimization*, Kluwer Academic Publishers, pp.5-15, pp. 78-81 (1998)

[2] Ricard Solé, Luís F. Seoane, A multiobjective optimization approach to statistical mechanics, *arXiv:1310.6372 [cond-mat.stat-mech]* (2015)

[3] Patrick Ngatchou, Anahita Zarei, M. A. El-Sharkawi, Pareto multiobjective optimization, *Proceedings of the 13th International Conference on, Intelligent Systems Application to Power Systems, IEEE* (2006)