

Rilevamento delle Fasi nel Modello di Ising tramite Machine Learning

Progetto ML

February 15, 2026

Contents

1 Introduzione

Il Machine Learning (ML) è un campo di studio che consente ai computer di apprendere dai dati senza essere esplicitamente programmati. In questo progetto, applichiamo tecniche di ML a un problema classico della fisica statistica: il ****Modello di Ising****.

Il Modello di Ising descrive il ferromagnetismo in materiali statistici. Il sistema è composto da variabili discrete di spin $s_i \in \{-1, +1\}$ disposte su un reticolo. L'obiettivo è classificare lo stato del sistema in una delle due fasi termodinamiche:

- **Fase Ordinata (Ferromagnetica):** $T < T_c$, dove gli spin tendono ad allinearsi.
- **Fase Disordinata (Paramagnetica):** $T > T_c$, dove l'agitazione termica domina e gli spin sono casuali.

Per un reticolo 2D quadrato, la temperatura critica teorica è $T_c \approx 2.269$.

2 Data Engineering

Come discusso nel capitolo sul Data Engineering, la qualità dei dati è fondamentale per il successo di un modello di ML. Abbiamo implementato una pipeline robusta per generare, corrompere e pulire i dati.

2.1 Generazione dei Dati (Ising Simulation)

Utilizziamo l'algoritmo ****Metropolis-Hastings**** per campionare configurazioni di equilibrio dalla distribuzione di Boltzmann. Per affrontare il problema del *Critical Slowing Down* (la tendenza del sistema a evolvere lentamente vicino alla temperatura critica), abbiamo implementato una ****Termalizzazione Adattiva****:

```
1 if 2.0 < T < 2.5:  
2     steps = 5000 # Piu' passi vicino alla T critica per garantire  
    equilibrio  
3 else:  
4     steps = 1000 # Meno passi lontano dalla criticita'
```

Listing 1: Termalizzazione Adattiva in data-generator.py

Il dataset è bilanciato e consiste in:

- 1000 matrici a bassa temperatura ($T < 2.0$, Classe 0).
- 1000 matrici ad alta temperatura ($T > 2.5$, Classe 1).
- 500 matrici vicino alla temperatura critica ($T \approx 2.27$) per il test.

2.2 Simulazione Sensori e Corruzione Dati

Simuliamo un ambiente reale in cui i sensori possono fallire. Introduciamo due tipi di difetti:

1. **Missing Values (MCAR):** Il 5% dei pixel viene perso (impostato a 'NaN'). Assumiamo che i dati manchino in modo completamente casuale (*Missing Completely At Random*).
2. **Outliers:** Il 2% dei pixel registra valori errati (es. 50), fisicamente impossibili dato che lo spin deve essere ± 1 .

2.3 Data Cleaning

Nel modulo `data_cleaning.py`, implementiamo strategie per ripristinare i dati:

Gestione Outlier: Rileviamo valori anomali utilizzando una soglia fisica. Poiché $|s_i| = 1$, qualsiasi valore con $|x| > 1.5$ viene considerato un errore del sensore e marcato come mancante ('NaN') per essere successivamente imputato.

Imputazione (Imputation): Per i valori mancanti, utilizziamo una strategia di imputazione basata sulla moda (*Most Frequent*).

```
1 # Da data_cleaning.py
2 imputer = SimpleImputer(strategy='most_frequent')
3 flat_imputed = imputer.fit_transform(flat_data)
```

Questa scelta è giustificata dalla natura discreta degli spin: se la maggioranza dei campioni ha valore +1, è probabile che anche il dato mancante sia +1.

3 Feature Engineering

Esploriamo due approcci distinti per rappresentare i reticolati di Ising, come descritto nelle pratiche di Feature Engineering.

3.1 Approccio 1: Physics-Based (Domain Knowledge)

Sfruttiamo la conoscenza del dominio fisico per estrarre feature globali informative. Calcoliamo due osservabili termodinamiche fondamentali:

1. **Magnetizzazione Media (M):** Parametro d'ordine del sistema.

$$M = \frac{1}{N} \left| \sum_i s_i \right|$$

2. **Energia Media (E):** Hamiltoniana del sistema (interazione tra primi vicini).

$$E = -\frac{1}{2N} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$$

Queste feature riducono la dimensionalità da $16 \times 16 = 256$ a sole 2 dimensioni, rendendo il modello estremamente interpretabile.

3.2 Approccio 2: Raw Data (Data-Driven)

In questo approccio, non facciamo assunzioni fisiche. Appiattiamo l'intera matrice del reticolo in un vettore di feature:

$$\text{Shape : } (N, 16, 16) \rightarrow (N, 256)$$

Questo permette al modello di apprendere autonomamente pattern spaziali complessi, sebbene a costo di una maggiore complessità computazionale e minore interpretabilità ("Black Box").

4 Model Development

Abbiamo selezionato i modelli in base alla natura delle feature, seguendo i principi di selezione del modello (Occam's Razor, Trade-off Bias-Variance).

4.1 Modelli Selezionati

- **Logistic Regression** (per Feature Fisiche): Dato che la transizione di fase è ben definita nello spazio (Magnetizzazione, Energia), un modello lineare semplice è sufficiente ed efficace.
- **Random Forest** (per Raw Data): Per gestire la complessità dei 256 pixel grezzi e le loro interazioni non lineari, utilizziamo un modello basato su alberi (Random Forest) con 100 estimatori.

5 Risultati Sperimentali e Valutazione

5.1 Accuratezza e Critical Slowing Down

Valutiamo i modelli non solo con l'accuratezza globale, ma analizzando le prestazioni in funzione della temperatura. Come atteso, osserviamo una **Critical U-Shape**:

- Lontano da T_c , l'accuratezza è vicina al 100%.
- Vicino a $T_c \approx 2.27$, l'accuratezza cala drasticamente. Questo riflette la fisica del sistema: al punto critico, le fluttuazioni sono massime e le due fasi sono difficilmente distinguibili.

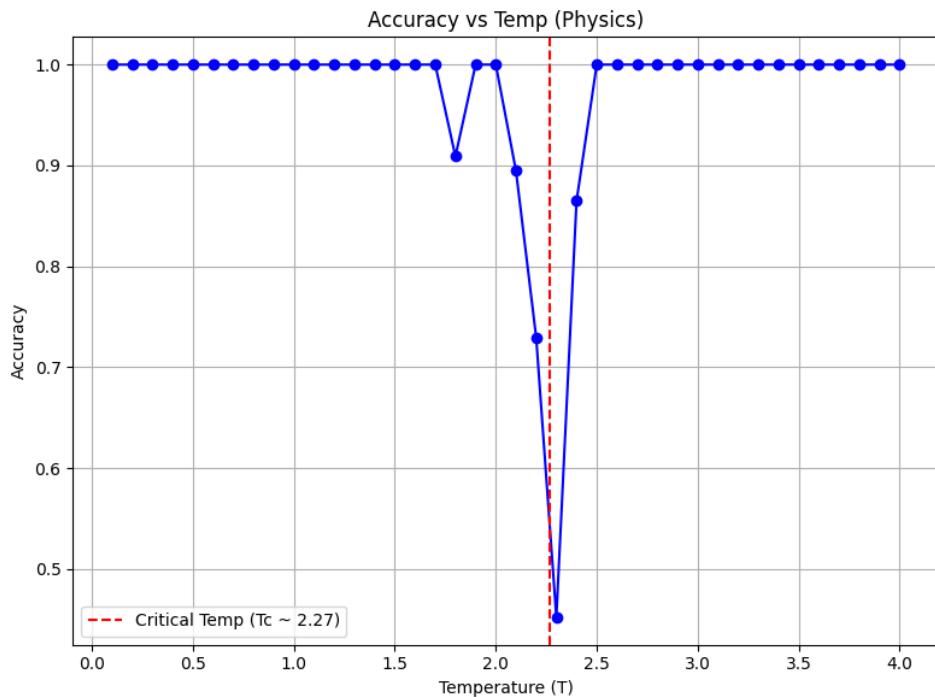


Figure 1: Accuratezza vs Temperatura (Modello Physics-Based).

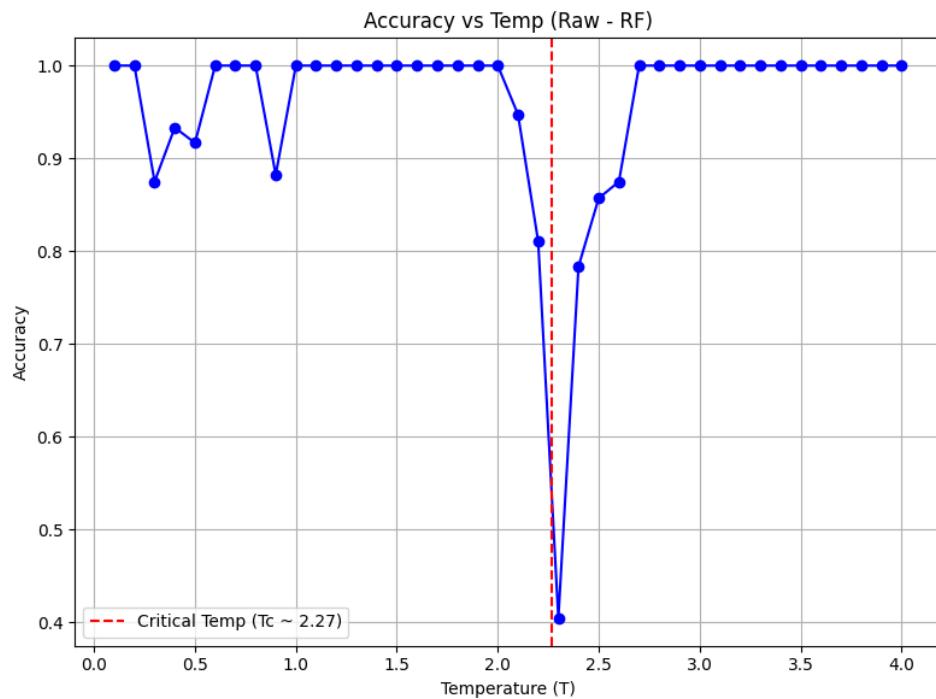


Figure 2: Accuratezza vs Temperatura (Modello Raw Data).

5.2 Matrice di Confusione

La matrice di confusione ci aiuta a visualizzare i Falsi Positivi/Negativi, fondamentali per capire se il modello è sbilanciato verso una delle due fasi.

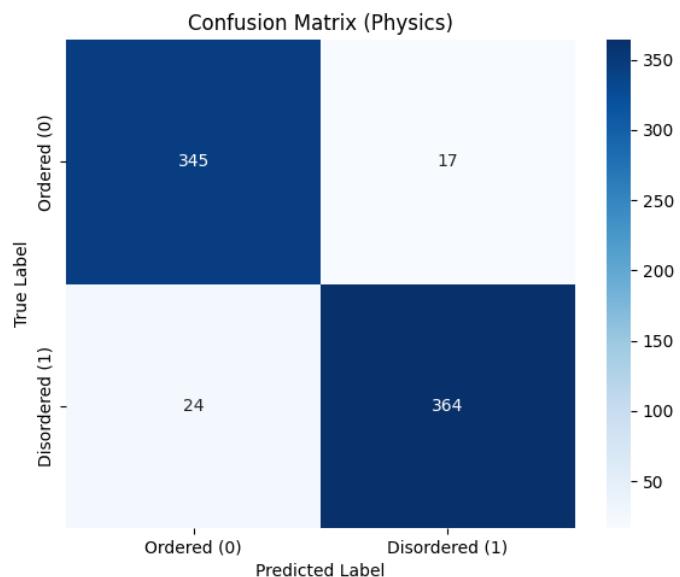


Figure 3: Matrice di Confusione (Modello Physics-Based).

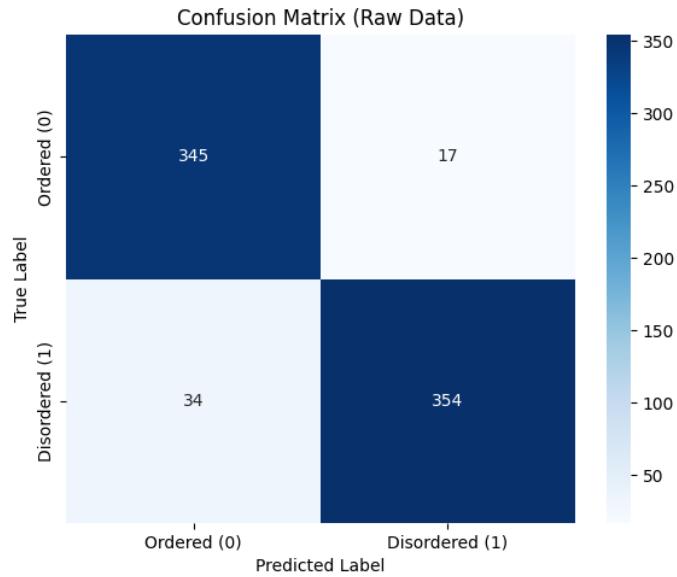


Figure 4: Matrice di Confusione (Modello Raw Data).

6 Applicazione Interattiva

Il progetto include una Web App sviluppata con **Streamlit** (`app.py`) per l'inferenza real-time. Funzionalità principali:

- Simulazione live di reticolni di Ising a temperatura variabile.
- Calcolo dinamico di Magnetizzazione ed Energia.
- Visualizzazione delle predizioni del modello ML vs Temperatura teorica.