

Classification des phases du modèle d'Ising 2D à l'aide d'outils du ML

Coraline Letouzé

7 janvier 2021

Le modèle d'Ising

Modèle de spins sur réseau carré

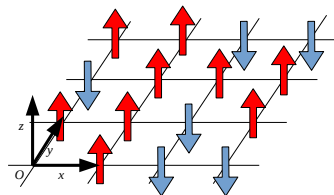
Composantes selon Oz : $\sigma_i \in \{+1; -1\}$

Sans champ magnétique :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$$

$J = +1$: ferromagnétisme

$J = -1$: antiferromagnétisme



Transition de phase : $T_c = 2.27 J/k_B$

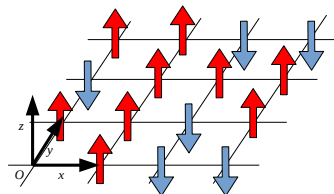
Résolution exacte : Onsager, 1944

Le modèle d'Ising

Conditions aux bords périodiques

→ Symétries :

- ▶ rotations de $\pi/2$
- ▶ parité selon les axes Ox , Oy
- ▶ translations sur le réseau
- ▶ inversion de spin



Les données ferromagnétiques

P. Mehta et al. *A high-bias, low-variance introduction to machine learning for physicists*. Physics reports, 810, 2019

Données : <https://physics.bu.edu/~pankajm/ML-Review-Datasets>

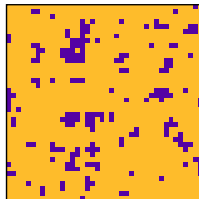
10000 échantillons (40×40) par $T = 0.25, 0.5, \dots 3.75, 4.0$

Ferromagnetic Ising model

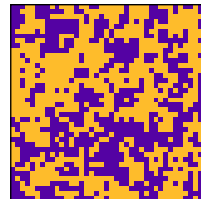
$T=0.50$



$T=2.25$



$T=3.75$



Les données anti-ferromagnétiques

Simulations Monte-Carlo (algorithme de Metropolis)

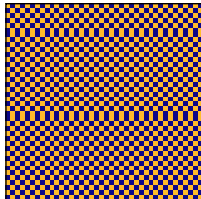
mêmes températures, même taille

20 échantillons par T

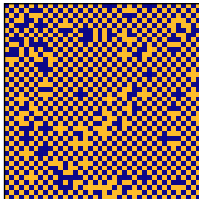
+ data augmentation : (rotation, parités), inversion de spin

Anti-ferromagnetic Ising model

T=0.50



T=2.25



T=3.75



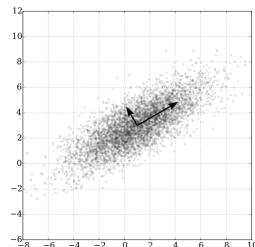
Analyse en composantes principales (PCA)

Changement de base \rightarrow VP de la matrice de covariance

Valeurs propres \propto Variance expliquée

Réduction de dimensionnalité : de 1600 éléments à 1, 2 ou 3.

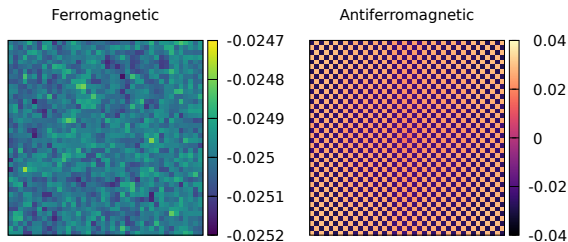
Ferromagnétique	
composante	% variance
1	52.8
2	0.3
3	0.2
Anti-ferromagnétique	
1	35.1
2	3.8
3	3.7



GaussianScatterPCA.svg, Nicoguaru, Wikipedia, 2016. Licence CC BY 4.0.

Résultats de la PCA

Weights of the first component



poids égaux :
magnétisation

poids en damier :
magnétisation alternée

paramètres d'ordre des transitions

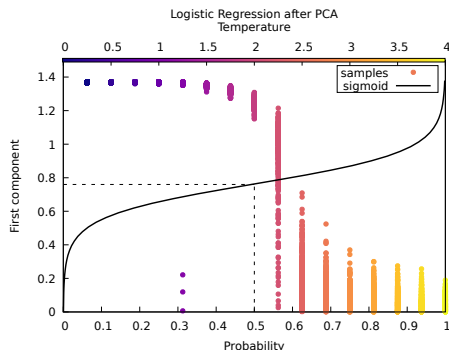
PCA et régression logistique

Régression logistique :

$$f_{\omega,i}(x) = \frac{1}{1 + e^{i+\omega x}}$$

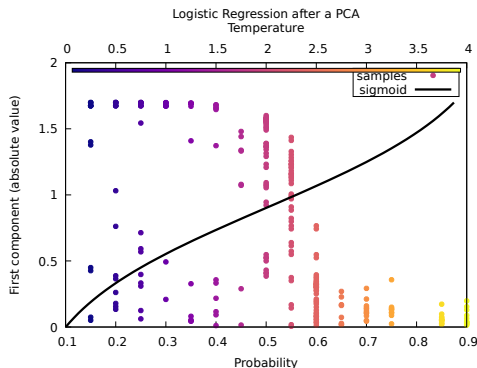
Résultats :

i	11.01
ω_1	-14.29
ω_2	-0.88
ω_3	0.24
Val set	100.0 %
Test set	96.3 %



$$|PC1|_C \approx 0.77 \rightarrow \langle T \rangle = 2.25$$

Application aux données antiferromagnétiques

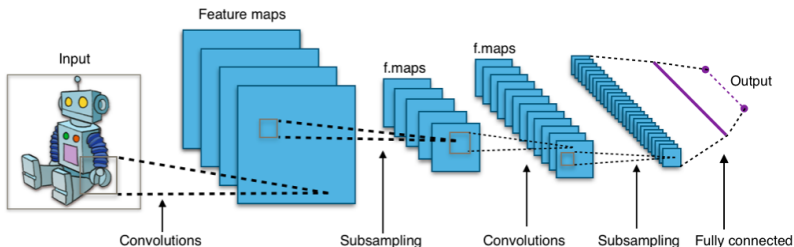


Précision avec 3 PC
(40% de variance)

Validation	Test
95.83 %	91.67 %

Réseau de neurones convolutif (CNN)

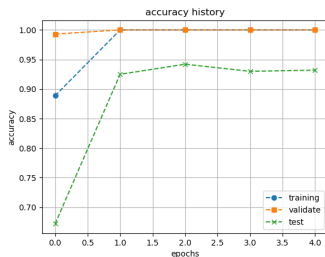
Un réseau de neurones artificiels pour l'analyse d'images



Aphex34. *Typical CNN*, Wikipedia, 2015. Licence CC BY-SA 4.0

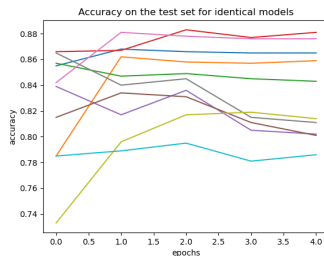
Application aux données ferromagnétiques

2 epochs pour apprendre les données d'entraînement



Erreurs à $T = 2.25$ seulement

Optimisation ?



Prédiction de température

Architecture : [8, 16, 16]

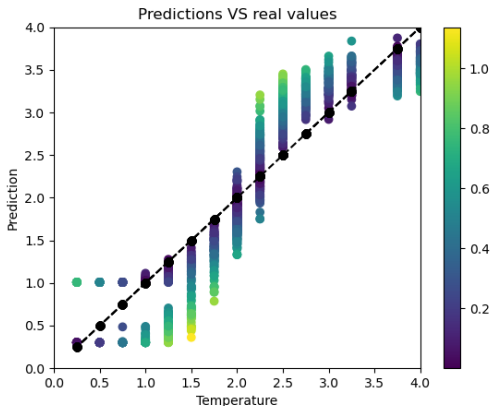
Loss : MSE

Output : activation 'linear'

Epochs : 3

	MSE	MAE
Val	0.19	0.37
Test	0.17	0.35

→ une classe d'écart



Conclusion

- ▶ PCA :
 - ▶ paramètre d'ordre
 - ▶ + RégLog (classification) : très efficace (96%)
 - ▶ + DNN (prédiction de T) : médiocre?
- ▶ CNN :
 - ▶ (classification) : Moyen ($\approx 85\%$)
 - ▶ (prédiction de T) : $MAE \approx 0.4$