

Projet IA : Le Modèle d'Ising

Intelligence artificielle pour la physique

A. Cremel-Schlemer (3800159)

G. Carvalho (xxxxxxxxx)

M. Panet (28705836)

10 décembre 2023

TABLE DES MATIÈRES

Introduction	2
1 Génération de données	2
2 Pré-traitement des données	5
3 Modèles classiques	6
3.1 Analyse par la magnétisation	6
3.2 Analyse par l'état individuel des spins	6
4 Réseaux de neurones	6
Conclusion	6

INTRODUCTION

Le modèle d'Ising est un modèle de physique statistique introduit par Rudolph Peierls, Wilhelm Lenz et Ernst Ising dans les années 1920. Ce modèle d'une remarquable simplicité lui permet pourtant de mettre en exergue un comportement de transition de phase.

Sous sa formulation historique, le modèle d'Ising permet d'étudier la transition de phase paramagnétique/-ferromagnétique d'un matériau. Certains matériaux possèdent une aimantation intrinsèque; ils sont dits ferromagnétiques. C'est le cas des aimants. Cette propriété provient d'interactions à courte portée entre les spins d'un cristal. Mais, comme l'a découvert en 1895 le physicien Pierre Curie, ces matériaux perdent leur propriété magnétique au-dessus d'une température caractéristique appelée température de Curie T_C . On trouve aussi des matériaux dits paramagnétiques. Ces matériaux ne sont pas magnétiques, mais le deviennent au contact d'un champ magnétique extérieur puissant. En l'absence de champ magnétique extérieur, les spins de ces matériaux sont désordonnés, de sorte qu'en moyenne, le moment magnétique du matériau est nul : le matériau n'est pas magnétique. Sous l'action d'un champ magnétique extérieur, ces moments se polarisent, ce qui rend le matériau magnétique.

L'hamiltonien du modèle d'Ising prend donc en compte ces deux propriétés, puisqu'une partie de cet est relative à l'interaction ferromagnétique à courte portée et l'autre partie est relative à l'interaction de chaque spin du cristal avec un champ magnétique extérieur. Dans la plupart des modèles numériques, on travaille sans champ extérieur.

La relative généralité de ce modèle (interactions locales et interaction individuelle avec une force extérieure) transcende la physique et permet de décrire qualitativement et parfois quantitativement une très grande variété de situations (paramagnétisme, gaz réticulaire, agents économiques, modèles écologiques, utilisation en analyse et traitement de l'image). Il donnera même lieu à un modèle plus général : le modèle de Potts (qui généralise l'aspect binaire du modèle d'Ising lié à la binarité des spins).

À travers notre exposé sur l'intelligence artificielle, nous allons nous intéresser à un jeu de données constitué de 16000 images issues d'une simulation numérique du modèle d'Ising 2D. Chaque image est associée à une température caractéristique allant de 0.25 à 4 (sans unité) et à un label. Le label renseigne sur la phase dans laquelle l'image se trouve. La *phase ferromagnétique* est une phase où les spins sont globalement tous alignés ou forment des îlots de spins alignés ($|M| > 0$). Le label *phase paramagnétique* rends compte du régime où les spins sont globalement désordonnés ($M = 0$).

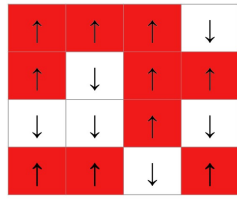
Nous allons explorer différentes méthodes pour voir quelles solutions d'intelligence artificielle nous permettent de trancher, à partir d'une image donnée, si l'on est dans la phase paramagnétique ou ferromagnétique. Nous nous intéresserons aussi à la manière dont sont générées les données du modèle d'Ising. Nous chercherons à voir s'il est possible de prédire la température d'une image de manière fiable et même s'il est possible de générer de nouvelles données sans faire appel à une simulation numérique coûteuse.

1 GÉNÉRATION DE DONNÉES

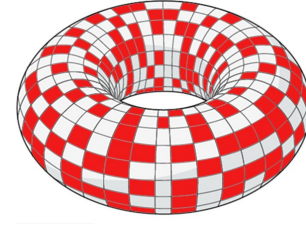
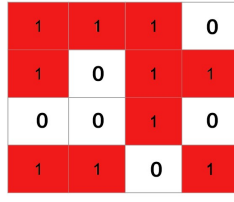
Afin de mieux cerner le problème initial, nous avons recréé la simulation du modèle d'Ising 2D pour des images 40×40 comme celle présente dans le dataset. Le modèle d'Ising 2D est une approche numérique du problème posé en introduction où l'on fait l'hypothèse d'un cristal plat et de maille carrée pour lequel chaque atome est associé à un pixel d'une image.

Chaque spin est représenté soit par un 0, soit par un 1. Le 1 pour un spin Up, le 0 pour un spin Down. Pour améliorer la validité du modèle, des conditions aux bords périodiques sont utilisées. Concrètement cela revient à traiter la surface d'un tore qu'on aurait dépliée (cf. Figure 1.1).

Le Hamiltonien du problème est donnée par l'équation :



(a) Les spins sont soit Up = 1, soit Down = 0



(b) Conditions aux bords périodiques

FIGURE 1.1 – Représentation du modèle d'Ising 2D

$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

où $\sigma_i = \pm 1$. Celà dit, comme nous travaillons avec des 0 et des 1, il y a quelques manipulations à réaliser sur l'Hamiltonien. On fait de plus abstraction de la deuxième partie de l'hamiltonien qui traite du paramagnétisme.

Il nous reste donc qu'à traiter :

$$H = -J \sum_{i,j} (2\sigma_i - 1)(2\sigma_j - 1)$$

Que signifie cet Hamiltonien? C'est un Hamiltonien de couplage entre spin. À priori, pour respecter la physique du système qu'on cherche à étudier, ce couplage ne se réalise qu'à courte portée, et donc que entre spin "plus proche voisin" puisqu'il s'agit d'une interaction d'échange à courte portée. Par ailleurs, on choisie de travailler avec des constantes dimensionnées de sorte que : $\frac{J}{k_B} = 1$

On va maintenant se rapprocher d'un des spins de notre modèle. Situé au centre, ses plus proches voisins forment une croix suisse autour de lui. On calcule son Hamiltonien local :

$$H_{local} = E_{ij} = (2\sigma_i - 1) \sum_j (2\sigma_j - 1) = (2\sigma_i - 1) \times [2 \times (R + L + U + D) - 4]$$

avec :

↑	↑	↑	1	1 = U	1
↑	↓	↑	1 = L	0 = σ_i	1 = R
↓	↓	↑	1	1 = D	1

FIGURE 1.2 – Hamiltonien local

Partons d'un système idéal où tous les spins sont alignées. En raison de l'agitation thermique un spin aléatoire du cristal inverse son sens. La variation d'énergie associé à ce changement est donnée par :

$$\Delta E = E_f - E_i$$

Et la probabilité qu'un tel changement s'opère est proportionnelle au poids de Boltzmann :

$$P(\Delta E) \propto e^{-\beta \Delta E} = e^{-\beta \Delta E}$$

L'idée est la suivante : l'ordinateur va piocher une case au hasard calculer le ΔE associé. Ce ΔE ne peut prendre que 5 valeurs possibles :

n voisin de sens opposé	ΔE
0	8
1	4
2	0
3	-4
4	-8

Dans le cas ou $\Delta E \in \{0, -4, -8\}$ l'énergie est minimisée donc le changement s'opère naturellement, l'ordinateur change le pixel d'état. Dans le cas inverse, c'est à dire $\Delta E \in \{4, 8\}$ un nombre aléatoire x tiré selon une distribution uniforme entre 0 et 1 et est comparé à $e^{-\beta\Delta E}$. Si $x < e^{-\beta\Delta E}$ alors l'ordinateur change le pixel d'état. Sinon il ne le fait pas.

On remarque que plus T est important plus la probabilité de transition est importante.

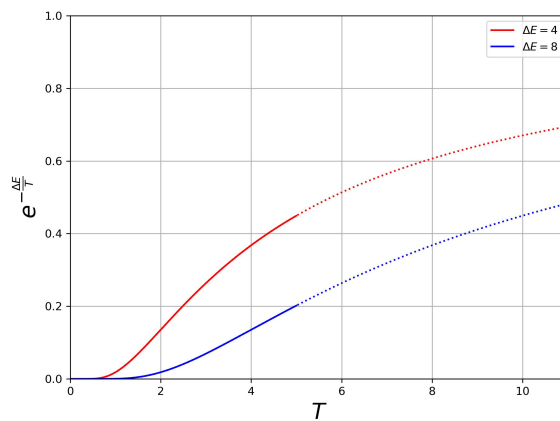


FIGURE 1.3 – probabilité de transition en fonction de la température

On peut donc alors lancer la simulation, pour une température fixé on réalise un certains nombre de tentative de changement de spin. Le système va alors se relaxer jusqu'à un équilibre où la moyenne des spins qui composent l'image est stable tentative successive de changement de l'état d'un spin de l'image.

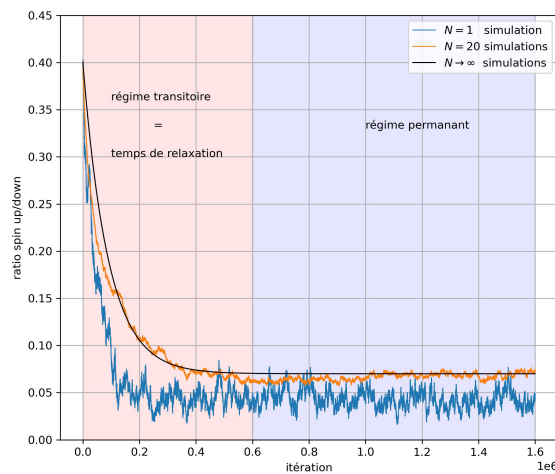


FIGURE 1.4 – Évolution du ratio spin up spin down pour $T = 2$ et 1,6 million itération

2 PRÉ-TRAITEMENT DES DONNÉES

Maintenant que nous avons généré nos données, nous devons nous faire une idée de la forme de nos données afin de pouvoir les traiter de la meilleure façon possible. Les données fournies au départ sont des vecteurs de taille 1600 contenant des 1 et des 0. Ces vecteurs représentent des configurations de spins se trouvant sur une grille 2D de taille 40×40 . Le dataset original est composé de 10000 configurations de spins pour 16 températures différentes comprises entre 0.25 et 4.00 avec un pas de 0.25. Avec ces configurations, un label est associé à chaque configuration. Ce label est une valeur binaire qui nous indique la phase dans laquelle se trouve le système. De plus, nous avons généré ... Comme on peut le voir sur la figure 2.1a, nos données forment un ensemble bruité mais il apparaît une symétrie par rapport à l'axe horizontal. En effet, à basse température, les spins sont majoritairement alignés de la même façon mais de manière aléatoire en + ou -. Cette symétrie de nos données peut poser un problème à nos modèles qui auront dû apprendre à faire la différence entre deux configurations opposées mais équivalentes. Pour éviter ce problème, nous allons symétriser nos données en inversant les spins de toutes les configurations qui ont une moyenne de spin négative. Ainsi, on se retrouve avec des données symétriques par rapport à l'axe horizontal comme on peut le voir sur la figure 2.1b.

Anatole :
Complète
cette ligne
ou sup-
primer si
superflu

Vérifier la
manière
de symé-
triser

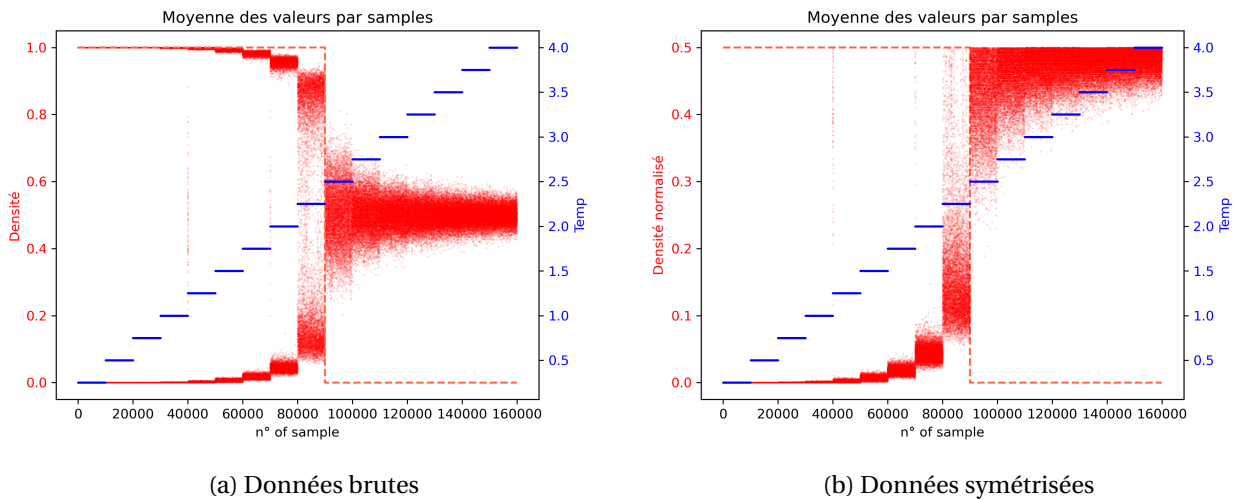


FIGURE 2.1

Dans la partie suivante, nous allons entraîner certains modèles spécifiques sur la densité de spin symétrisée. Dans ce cas, nous allons aussi normaliser afin de rendre les modèles plus performants. Pour cela, nous allons utiliser la méthode *StandardScaler* de la librairie *sklearn* qui permet de centrer et réduire les données. Cette méthode soustrait la moyenne et divise par l'écart-type. Ainsi, on se retrouve avec des données centrées en 0 et de variance 1.

Afin d'appliquer exactement la même transformation sur les données de test, nous allons créer un pipeline qui va appliquer la méthode de symétrisation puis la méthode de normalisation. Ainsi, on pourra appliquer le pipeline sur les données de test sans avoir à les modifier. Finalement, certains modèles seront plus réceptifs à des données présentées sous forme de vecteur de taille 1600, d'autre sous forme de matrice de taille 40×40 . Pour éviter de devoir modifier les données à chaque fois, nous allons créer un pipeline qui va transformer les données en matrice si nécessaire et appliquer les autres méthodes de pré-traitement expliquées ci-dessus.

3 MODÈLES CLASSIQUES

3.1 Analyse par la magnétisation

Notre première approche de ce problème est de considérer la magnétisation comme une fonction de la température. Cette approche nous permet de réduire grandement la complexité du problème. En effet, nous n'avons plus qu'une seule variable à considérer : l'état moyen des spins. Dans cette partie, nous allons donc essayer de prédire la température à partir de la magnétisation. Il suffit ensuite de comparer la valeur prédite à la valeur de la température critique pour déterminer la phase du système.

Avant tous, nous allons établir un modèle naïf qui va nous servir de référence. Ce modèle va simplement renvoyer la valeur moyenne de la température du jeu de données. Ainsi, on pourra comparer les performances de nos modèles avec ce modèle naïf. On obtient une erreur quadratique moyenne de 1.32.

Du fait du bruit de nos données et du faible nombre de températures distinctes, nous devons porter une attention particulière au sur-apprentissage de nos modèles. Prenant en compte le grand nombre de données, nous sommes partis sur un modèle de forêt aléatoire. Ce modèle est très robuste et permet de limiter le sur-apprentissage. De plus, il est très rapide à entraîner et à tester. Au niveau des hyperparamètres, nous avons limité la profondeur des arbres à 5 et nous avons aussi composé la forêt de 100 arbres. De plus, la méthode de *Bootstrap* est activée. Cette méthode permet de créer des sous-ensembles de données de la taille de l'ensemble de données originale. Ainsi, on peut entraîner plusieurs arbres sur des données différentes et les combiner pour obtenir un modèle plus robuste. On peut donc limiter le sur-apprentissage tout en gardant un modèle performant. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 3.1. La figure 3.1 possède deux objets : La densité de points de la moyenne des spins symétrisée par température calculé en utilisant la méthode de *kde* et la prédiction du modèle de forêt aléatoire.

Avec une MSE de 0.108, on obtient un modèle qui est 12 fois plus performant que le modèle naïf. Cependant, on peut voir que le modèle a du mal à distinguer les hautes températures. En effet, les valeurs prédites par ce modèle sont toujours inférieures à 3.5.

Compléter avec explication de la partie d'Anatole

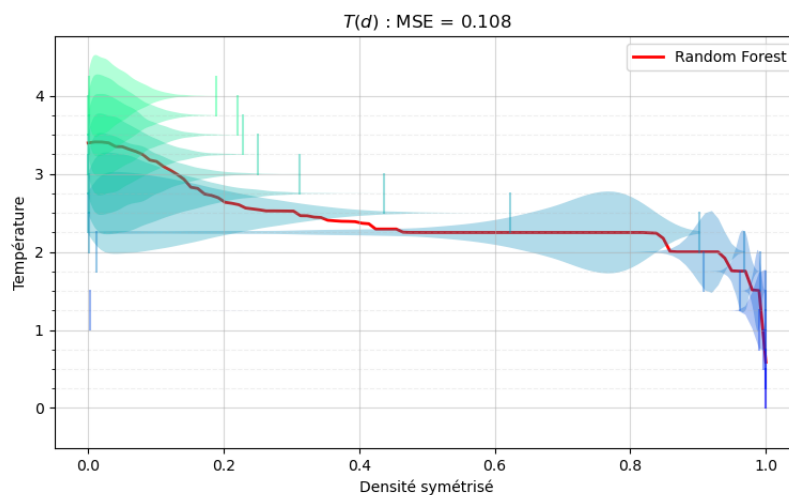


FIGURE 3.1 – Résultats du modèle de forêt aléatoire

3.2 Analyse par l'état individuel des spins

4 RÉSEAUX DE NEURONES

CONCLUSION