VETOR

Redes Neurais na Identificação de Transições de Fase☆

Neural Networks for Identifying Phase Transitions

Ana Gabriela S. Freitas[1,†], Kalai S. C. Guimarães[1], Zochil G. Arenas[1], Roberto Santana [2]

[1]*Instituto de Matemática e Estatística, UERJ - Rio de Janeiro, Brasil*
[2]*Grupo de Sistemas Inteligentes ISG, Universidade do País Basco UPV/EHU, Espanha*
[†]**Autor correspondente:** anagfreitas93@gmail.com

Resumo

No presente trabalho, foi realizada uma introdução ao uso de técnicas de aprendizado de máquinas para identificar as fases de um sistema magnético e a transição entre estas fases. Para isso, foi utilizado o Modelo de Ising bidimensional e foi implementada uma rede *Perceptron* de uma única camada. Os resultados obtidos apontaram uma boa acurácia na detecção da temperatura da transição de fase neste modelo, confirmando a viabilidade do emprego destas técnicas no estudo das transições de fase.

Palavras-chave

Transições de Fase • Aprendizado de Máquina • Modelo de Ising

Abstract

In the present work, an introduction was provided to the use of machine learning techniques for identifying the phases of a magnetic system and the transition between these phases. For this, the two-dimensional Ising Model was used, and a single-layer Perceptron network was implemented. The results obtained indicated good accuracy in detecting the phase transition temperature in this model, confirming the feasibility of employing these techniques in the study of phase transitions.

Keywords

Phase Transitions • Machine Learning • Ising Model

1 Introdução

O estudo das transições de fase em sistemas físicos representa um dos pilares fundamentais da física estatística e da teoria dos fenômenos críticos. As transições de fase representam mudanças abruptas no comportamento de um sistema físico à medida em que são variados certos parâmetros, como temperatura, pressão ou campo magnético [1]. Tradicionalmente, as transições de fase são desencadeadas por variações controladas desses parâmetros externos. No entanto, em sistemas sujeitos a ruído, como aqueles modelados por equações diferenciais estocásticas, a intensidade do ruído pode desempenhar o papel de um parâmetro crítico que induz transições de fase.

Neste contexto, chama-se de ruído o processo estocástico que caracteriza a incerteza associada à dinâmica estocástica modelada. Eventualmente, o ruído pode amplificar flutuações microscópicas no sistema, levando a comportamentos macroscópicos não triviais. Isso pode resultar na emergência de novos estados de ordem/desordem que

☆Este artigo é uma versão estendida do trabalho apresentado no XXVII ENMC Encontro Nacional de Modelagem Computacional e XV ECTM Encontro de Ciência e Tecnologia de Materiais, ocorridos em Ilhéus – BA, de 1 a 4 de outubro de 2024.

não seriam observados na ausência de ruído. Em sistemas estocásticos, este fenômeno é conhecido como transições de fase induzidas por ruído (*Noise-Induced Phase Transitions* (NIPT), pelas siglas em inglês) [2, 3]. Além de ser uma área de pesquisa atual e desafiadora, o estudo destas transições tem aplicações em diversas áreas, como física estatística, biologia, economia e ciência da computação.

Recentemente, as técnicas de aprendizado de máquina (*Machine Learning* (ML), pelas siglas em inglês), extensivamente usadas em muitas áreas de pesquisa, têm despertado grande interesse como uma ferramenta promissora para identificar transições de fase em sistemas físicos [4, 5, 6]. Estas técnicas oferecem uma abordagem inovadora e complementar aos métodos tradicionais de análise, permitindo a extração de padrões complexos e não-lineares a partir de conjuntos de dados experimentais ou simulações computacionais.

Neste trabalho, faz-se uma introdução ao uso de técnicas de ML para identificar as fases de um sistema e tentar determinar a transição entre estas fases. Inicialmente, será utilizado o modelo de Ising, muito bem conhecido, para estudar as vantagens e limitações desta abordagem. Será empregado o Método de Monte Carlo para gerar as configurações de *spins*, usadas como dados para treinar as redes ou arquiteturas estudadas. A seguir, apresenta-se uma fundamentação teórica referente ao problema de interesse. Após, na Seção 3, detalham-se a estratégia utilizada para identificar transições de fase com métodos de aprendizado de máquinas e os resultados obtidos. Por fim, são indicadas as conclusões e referências bibliográficas.

2 Fundamentação Teórica

De forma geral, temos interesse em estudar transições de fase induzidas por ruído para um modelo físico descrito por uma equação diferencial estocástica com ruído multiplicativo usando técnicas de aprendizado de máquinas. Foi escolhido o modelo de Ising para realizar os primeiros testes, por ser um modelo muito estudado e bastante próximo do modelo estocástico que se planeja estudar. O modelo de Ising descreve um sistema físico simplificado, composto por um conjunto de *spins* (ou momentos magnéticos) localizados em posições discretas em uma rede regular.

No contexto do uso de técnicas de aprendizado de máquina, a referência [4] traz uma abordagem paradigmática, ao empregar grandes conjuntos de dados de configurações de *spins*, amostradas com o Método de Monte Carlo, para classificar e identificar as fases segundo a temperatura do sistema. Para isto, foram utilizadas redes neurais totalmente conectadas para identificar transições de fase em modelos de *spins*, começando com o exemplo prototípico do modelo de Ising ferromagnético na rede quadrada. Neste trabalho, foi seguida esta estratégia e planeja-se a sua extensão para várias estruturas de redes neurais. A implementação foi realizada em *Python* [1].

2.1 O Modelo de Ising e a Matemática da Transição de Fase

A existência de diversas fases em um sistema físico é um conceito bastante familiar. A transformação da água no estado sólido para líquido ou do líquido para o gasoso é um exemplo comum em nosso cotidiano. Em sistemas complexos, é comum observar vários padrões de comportamento ou fases qualitativas distintas. Cada fase representa uma organização interna diferente e a transição entre duas fases indica uma mudança no comportamento do sistema. A matemática envolvida na transição de fase descreve como as propriedades físicas do sistema mudam à medida que ocorre a transição de uma fase para outra. Embora a transição de fases seja um fenômeno comum e muitas vezes observável, o seu estudo é muito desafiador, seja pela complexidade do comportamento do sistema no momento da mudança ou pela dificuldade para identificar os parâmetros importantes e/ou realizar os cálculos necessários.

O modelo de Ising é um dos modelos mais estudados na física estatística [7], especialmente na área de transições de fase e sistemas magnéticos. Um dos propósitos deste modelo é explicar como interações de curto alcance entre, por exemplo, moléculas em um cristal, geram comportamentos correlacionados de longo alcance [1]. Este modelo tem aplicações em outras áreas, como química, biologia e, inclusive, ecologia e ciências sociais, para estudar o aparecimento de comportamentos colectivos a partir de interações individuais.

O modelo de Ising tem como ponto de partida uma estrutura em forma de rede em d dimensões, que pode ser idealizada como um conjunto finito de sítios regularmente espaçados. No caso unidimensional $d = 1$, tem-se uma simples sequência linear de N sítios que podem ser identificados numericamente de 1 a N. Cada segmento que conecta os sítios da rede é denominado ligação e os sítios da rede que estão conectados por uma ligação são considerados vizinhos mais próximos. De forma geral, com exceção dos sítios da rede situados na borda da grade, cada sítio da rede em uma grade d-dimensional tem $2d$ vizinhos mais próximos. Em dimensão 1, não há transição de fase. Neste trabalho, foca-se no modelo em dimensão $d = 2$.

Cada sítio da rede corresponde a uma variável de *spin* σ_i $(i = 1, 2, \dots, N)$, a qual só pode assumir dois valores, $\sigma_i = \pm 1$. Assim, neste modelo, cada *spin* pode ter apenas dois estados possíveis. No modelo do ferromagnetismo, os

[1] A programação do método foi baseada no código, originalmente na linguagem de programação *Julia*, disponível em `https://juliaphysics.github.io/PhysicsTutorials.jl/tutorials/machine_learning/ml_ising/ml_ising.html`, utilizando o ambiente de desenvolvimento *Spyder* do *Anaconda*

sítios da rede são pensados como sendo ocupados por átomos de um material magnético, nos estados para "cima" (+1) ou para "baixo" (−1), representando a orientação magnética em relação a um campo externo. Uma atribuição de valores para cada sítio da rede $(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_N)$ é chamada de configuração do sistema.

A energia total é representada pelo hamiltoniano do sistema, que descreve a sua dinâmica. De forma geral, no caso do modelo de Ising, a definição do hamiltoniano é feita considerando que apenas os vizinhos mais próximos e a interação com um campo magnético externo contribuem para a energia do sistema. Dessa forma, o hamiltoniano do modelo de Ising clássico em um campo magnético externo B é escrito na seguinte forma:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - B \sum_i \sigma_i \ , \tag{1}$$

onde J é uma constante que mede a intensidade da interação *spin-spin*, σ_i são os *spins* individuais em cada um dos sítios da rede e $\langle i, j \rangle$ indica uma soma para todos os pares de primeiros vizinhos [7].

Na teoria clássica de transições de fase, ou seja, para sistemas em equilíbrio termodinâmico, uma grandeza importante a ser estabelecida é o parâmetro de ordem. O parâmetro de ordem caracteriza as fases do sistema através do seu valor, sendo nulo numa fase desordenada e não nulo, na fase ordenada. No modelo de Ising, a fase ordenada é referente àquela na qual "todos" os *spins* estão orientados numa mesma direção. Neste caso, o parâmetro de ordem é a magnetização e corresponde à média dos valores de *spin* de uma dada configuração. Contudo, resulta importante notar que o modelo de Ising permite estudar uma diversidade de situações físicas para além do magnetismo, o qual, unido à simplicidade do modelo, lhe outorga um caráter universal para a compreensão de alguns aspectos do comportamento crítico.

3 Materiais e Métodos

As técnicas de *Machine Learning* (ML) têm o potencial de serem empregadas na compreensão e predição das transições de fase em sistemas complexos. Ao treinar algoritmos de ML com dados simulados ou experimentais, é possível identificar padrões, mesmo que sutis, que precedem tais transições. Esses padrões podem escapar de análises convencionais, porém os modelos de ML podem detectar correlações complexas [5].

Neste trabalho, descreve-se o processo de simulação do Modelo de Ising em uma rede bidimensional de tamanho $L \times L$ na ausência de campo magnético externo, que é o único caso para a qual se conhece a solução exata. Para este modelo, a temperatura crítica da transição de fase foi calculada de forma exata [8].

Nesta condição, o modelo de Ising é descrito pelo hamiltoniano

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \tag{2}$$

que representa o valor da energia de uma configuração particular de *spins*. Cada configuração tem uma certa probabilidade de ocorrência para uma dada temperatura T. Esta probabilidade é determinada pela distribuição de Boltzmann, proporcional ao termo $e^{-\beta\mathcal{H}}$, no qual $\beta = (k_B T)^{-1}$, sendo k_B a constante de Boltzmann. Como $\mathcal{H}$, dado pela Eq. (2), assim como J, tem unidades de energia, e $\beta\mathcal{H}$ é uma constante adimensional, no que segue, estará se assumindo que a temperatura T é dada em unidades de J/k_B. Dado o caráter geral do estudo que está sendo desenvolvido, sem correspondência direta com um material particular, não será especificada uma unidade de energia. Por exemplo, para materiais magnéticos como ferro ou níquel, o eV talvez seria a unidade de energia mais adequada e o valor da energia de interação seria específico para cada material. Por simplicidade, neste trabalho considera-se um valor para a energia de interação J de modo que a temperatura crítica seja $T_c \approx 2,269\ J/k_B$.

A transição de fase é caracterizada por uma quebra espontânea de simetria, na qual abaixo da temperatura crítica T_c, o sistema desenvolve uma magnetização espontânea (fase ferromagnética), mesmo na ausência de um campo magnético externo. Acima da temperatura crítica, o sistema se encontra numa fase paramagnética. Para classificar as fases do sistema (ferromagnética e paramagnética) a partir das configurações de *spins* geradas, foram utilizadas técnicas de aprendizado de máquina. A primeira fase do estudo envolveu a geração do conjunto de dados usando o método de Monte Carlo. Estes dados são configurações de *spins* obtidas para diferentes valores de temperatura (T), acima e abaixo da temperatura crítica (T_c). A ideia do método de Monte Carlo neste caso é, a cada passo, variar o estado de apenas um *spin* (de −1 a 1, por exemplo) e calcular a energia da nova configuração através da equação (2). Para cada valor de T, foram geradas 2000 configurações. Em cada caso, iniciamos com uma configuração inicial pseudoaleatória e aplicamos o critério de Metropolis para aceitar ou não a mudança de estado do *spin*, usando a distribuição de Boltzmann. Este critério é definido pela expressão:

$$p = min\{1, e^{-\beta\Delta\mathcal{H}}\}, \tag{3}$$

onde $\Delta\mathcal{H} = \mathcal{H}' - \mathcal{H}$ representa a diferença de energia entre a nova configuração $\mathcal{H}'$ e a configuração anterior $\mathcal{H}$. Na implementação do método, foram consideradas condições de contorno periódicas. O fluxograma apresentado na

Fig. 1 ilustra detalhadamente os passos descritos, desde a geração do conjunto de dados usando o método de Monte Carlo até a aplicação do critério de Metropolis para cada temperatura considerada.

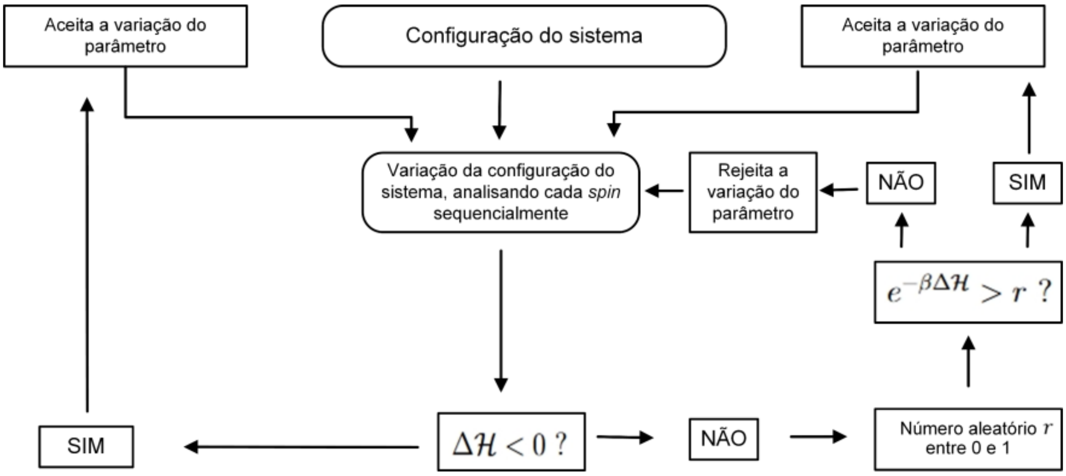


Figura 1: Fluxograma da simulação do Modelo de Ising utilizando o Método de Monte Carlo.

Para identificar a transição de fase como uma função da temperatura, foram gerados os dados para vários valores de T, incluído o valor de T_c. Dessa forma, a rede neural utilizada foi treinada e testada com um banco de dados composto por configurações de *spins* geradas pelo método de Monte Carlo para os seguintes valores de temperatura: $T = \{1,210; 1,431; 1,750; 1,967; 2,085; 2,121; 2,195; 2,232; 2,269; 2,298; 2,374; 2,480; 2,584; 2,725; 2,835; 3,157; 3,380\}$.

Foram estabelecidas duas classes: uma classe 0, que identifica o estado ferromagnético, gerada seguindo o critério $T_i < T_c$, com $i = 1, \ldots, 16$, e uma classe 1, identificando o estado paramagnético, que agrupa as configurações com $T_i > T_c$. Assim, o problema de classificação consiste em distinguir, a partir das configurações nas duas classes, qual é a classe de uma configuração dada. As configurações foram simuladas em uma rede 8×8, com cada sítio possuindo um *spin* que pode tomar o valor +1 ou −1.

Estas configurações de *spins* são as entradas para a rede neural, sendo cada configuração uma matriz de tamanho $L \times L$ (no nosso caso, 8×8), que será "achatada" em um vetor de comprimento $L^2 = 64$. Ou seja, as configurações bidimensionais são reorganizadas em um formato unidimensional, onde os elementos da matriz são dispostos sequencialmente em um vetor, desconsiderando a informação original de dimensionalidade. A arquitetura de rede neural utilizada encontra-se ilustrada na Figura 2. Para iniciar a construção do modelo, foi usada uma abordagem inicial simples com uma rede neural do tipo *Perceptron*, que possui apenas uma camada oculta composta por 7 neurônios. Esta escolha foi feita após testar diferentes quantidades de neurônios, observando-se que com um número maior de neurônios, o desempenho da rede não apresentou melhorias significativas. Dessa forma, foram selecionados 7 neurônios, oferecendo um bom equilíbrio entre a simplicidade da arquitetura e a eficiência do modelo.

Para cada temperatura, foram realizadas 10^5 varreduras (*sweeps*) e as configurações de *spins* foram registradas a cada 50 varreduras, resultando em um conjunto abrangente de dados para análise. Em seguida, as configurações de *spins* foram processadas para criar conjuntos de dados para treinamento e teste da rede neural. A metodologia proposta é representada na Fig. 3.

Como pré-processamento dos dados, as configurações foram normalizadas. Em seguida, cada configuração de *spins* foi concatenada horizontalmente em um vetor unidimensional e foi aplicada uma simetria Z_2 de inversão de *spins* (todos os spins são invertidos coletivamente sem alterar a energia do sistema) para duplicar o conjunto de dados. Após o pré-processamento, a amostra foi dividida aleatoriamente em dois grupos independentes: o conjunto de treinamento, composto por 80% das configurações, e o conjunto de teste, com o 20% restante. Foi utilizado o *random state* = 42, sendo este o número do lote do conjunto gerado aleatoriamente em qualquer operação, que pode ser usado sempre que for necessário gerar o mesmo conjunto novamente. Este valor é comumente utilizado na comunidade científica, inspirado no lendário *Guia do Mochileiro das Galáxias*.

Novamente, com o objetivo de melhorar a consistência dos dados, foram repetidas as simulações mais 10 vezes. O treinamento da rede foi baseado no fato de que mesmo que não se saiba o valor preciso da temperatura crítica, em altas temperaturas o sistema deverá ser desordenado (paramagnético) e, da mesma forma, para baixas temperaturas deverá estar ordenado (ferromagnético). Para ensinar o modelo foram utilizadas apenas as configurações das temperaturas limites (menor e maior). Foi usada a função de ativação ReLU (*Rectified Linear Unit*), que é amplamente empregada devido à sua capacidade de introduzir não-linearidades no modelo, permitindo que ele aprenda uma variedade maior de padrões. Além disso, a camada de saída foi configurada com 2 neurônios, o que resulta adequado

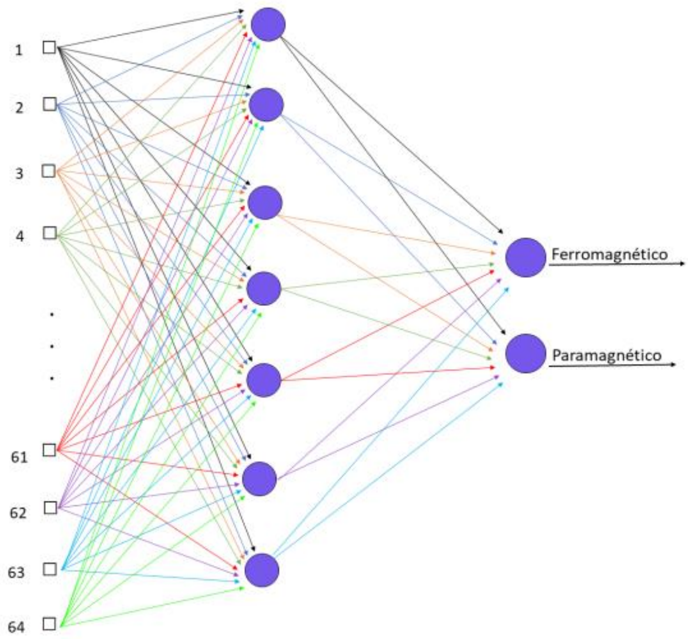


Figura 2: Arquitetura da Rede Neural.

para o nosso problema específico de classificação (fases ferromagnética ou paramagnética).

Durante o processo de treinamento, foi implementado o mecanismo de *early stopping*, que determina automaticamente a quantidade ideal de épocas para evitar o sobreajuste. Esse método monitora a perda no conjunto de validação e interrompe o treinamento caso a perda não melhore por 10 épocas consecutivas, garantindo que o treinamento pare no ponto ideal. Adicionalmente, foi configurado um tamanho de lote (*batch size*) de 32 para o treinamento, o que balanceia a eficiência computacional e a estabilidade da atualização dos pesos, e utilizou-se a técnica de *dropout* com uma probabilidade de $0,4$ na camada oculta para evitar o sobreajuste, melhorando a generalização do modelo.

Para a otimização dos pesos do modelo, foi utilizado o otimizador Adam (*Adaptive Moment Estimation*) com uma taxa de aprendizado de $0,0001$. O Adam é escolhido por sua eficiência computacional e menor necessidade de ajuste de hiperparâmetros, combinando as vantagens dos métodos de AdaGrad e RMSProp para garantir uma convergência mais rápida e estável.

O modelo foi implementado em *Python*, utilizando o Anaconda como gerenciador de pacotes e o *Spyder* como ambiente de desenvolvimento integrado (IDE).

4 Resultados e Discussões

Foram realizadas 30 simulações para o modelo proposto, pois um número de *sweeps* superior a 10^5 torna o código extremamente lento, com cada simulação levando várias horas para ser concluída. Dessa forma, rodar um número maior de simulações exigiria um tempo de processamento excessivamente longo, considerando a máquina utilizada. Para avaliar o desempenho do modelo em diferentes faixas de temperatura, foi calculada a acurácia individualmente para cada temperatura intermediária. Esse cálculo revela a capacidade do modelo de distinguir entre as fases ferromagnética e paramagnética em cada intervalo de temperatura, especialmente próximo à temperatura crítica, onde a classificação se torna mais difícil. A análise indica as faixas de temperatura em que o modelo tem alto desempenho e aquelas em que encontra dificuldades, principalmente nas proximidades da transição de fase.

Na Tabela 1, apresentam-se os valores de acurácia das temperaturas intermediárias para as simulações de melhor e pior desempenho entre as 30 realizadas, ilustrando o impacto das variações nas simulações para cada temperatura analisada. Como a variação entre as simulações foi pequena, não foram calculadas a média ou a mediana, pois seus valores seriam muito próximos. Em vez disso, optamos por destacar as simulações de melhor e pior desempenho para evidenciar as diferenças observadas.

A análise da acurácia em função da temperatura mostra que o modelo obtém alto desempenho de classificação em faixas de temperatura afastadas da temperatura crítica ($T_c = 2,269\ J/k_B$). Em temperaturas significativamente abaixo e acima da T_c a acurácia se mantém elevada, refletindo a homogeneidade do comportamento do sistema

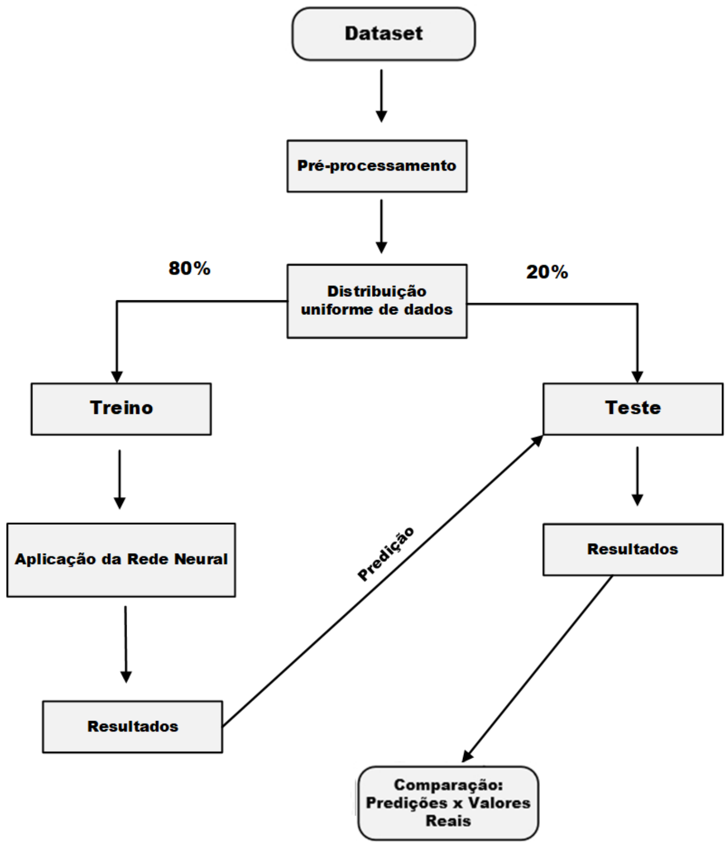


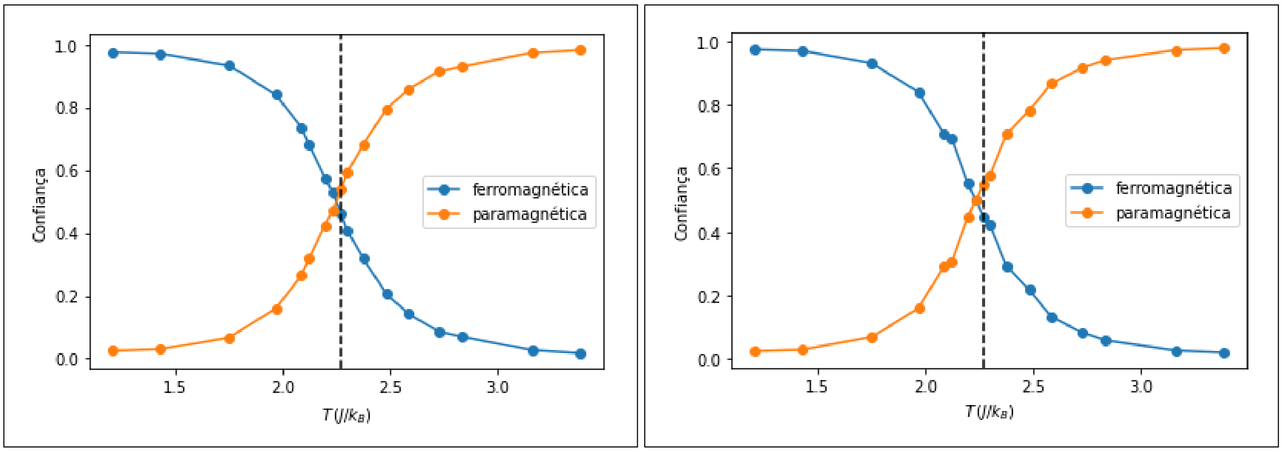
Figura 3: Fluxograma da Metodologia Proposta.

Tabela 1: Acurácia para as temperaturas intermediárias nas simulações de melhor e pior desempenho do modelo.

T (J/k_B)	Melhor Desempenho	Pior Desempenho
1,431	0,9995	0,9995
1,750	0,9875	0,9340
1,967	0,8855	0,8715
2,085	0,8000	0,7505
2,121	0,7450	0,7540
2,195	0,6550	0,6145
2,232	0,6450	0,6030
2,269	0,5850	0,5720
2,298	0,4660	0,4475
2,374	0,5380	0,5510
2,480	0,6745	0,6725
2,584	0,7555	0,7655
2,725	0,8505	0,8490
2,835	0,8905	0,8965
3,157	0,9535	0,9555

nesses intervalos. Nessas regiões, o sistema apresenta fases bem definidas, o que facilita a tarefa de classificação do modelo, uma vez que as configurações são mais estáveis e menos sujeitas a variações aleatórias. No entanto, ao se aproximar da temperatura crítica, observamos uma queda na acurácia do modelo. Essa diminuição não indica necessariamente uma limitação do modelo, mas reflete a complexidade inerente ao comportamento do sistema próximo à transição de fase. Em torno de T_c, o sistema exibe uma mistura entre fases ordenada e desordenada, gerando configurações menos homogêneas e, portanto, mais desafiadoras para a classificação. Esse fenômeno é característico de sistemas que passam por uma transição de fase, onde a variabilidade e a desordem aumentam, tornando as classificações menos precisas nessa faixa de temperatura.

Utilizando as probabilidades associadas a cada predição feita pela rede no conjunto de teste, procurou-se identificar a transição de fase. Em temperaturas mais baixas, espera-se uma alta probabilidade de o sistema apresentar comportamento ferromagnético; já em temperaturas mais altas, a probabilidade tende a se inverter, apontando para um estado paramagnético. A temperatura na qual a rede apresentou máxima indecisão foi comparada com a temperatura de Onsager para a transição de fase, servindo como um ponto de validação importante do modelo. Efetivamente, na faixa de temperatura próxima da temperatura crítica, T_c, as propriedades físicas do sistema não permitem identificar claramente as fases presentes, facilitando a confusão. O resultado deste procedimento pode ser visto na Fig.4, onde é possível observar que o "ponto de confusão" máximo da rede está muito próximo da temperatura crítica.



(a) (b)

Figura 4: Predição das fases ferromagnética (cor azul) e paramagnética (cor laranja) em função da temperatura do sistema (eixo horizontal). (4a) a rede com melhor desempenho e (4b) a rede com pior desempenho. A linha pontilhada indica a $T_c \approx 2,27\ J/k_B$. Valores próximos de $0,5$ no eixo vertical se correspondem com a falta de informação ou confusão máxima da rede.

A Figura 4 ajuda a identificar visualmente a transição de fase através da mudança nas probabilidades previstas pela rede neural. Quando a temperatura se aproxima ao valor da temperatura crítica na etapa de aquecimento, espera-se que a confiança na classe ferromagnética diminua e a confiança na classe paramagnética aumente (ou vice-versa), indicando a transição de fase.

Para estabelecer os parâmetros ideais na geração de um modelo capaz de classificar corretamente a transição de fase, foi também utilizada a matriz de confusão como abordagem complementar de avaliação. Esta ferramenta permite comparar a classificação real com a predita de maneira eficaz. O tamanho da matriz de confusão depende da quantidade de opções de classificação. Como o classificador tem apenas duas opções, a fase é ferromagnética ou paramagnética, a matriz de confusão tem dimensão 2×2. Todas as previsões corretas encontram-se localizadas na diagonal principal da matriz de confusão, enquanto os erros de classificação estão representados pelos valores fora dela. É possível verificar nas Figs. 5a e 5b, que o modelo realizou uma boa classificação em ambos os casos. No caso com o melhor desempenho, o modelo obteve uma precisão de aproximadamente $76,20\%$, com 3.395 classificações incorretas para o estado paramagnético e 3.743 para o ferromagnético. Já no caso com o pior desempenho, a precisão foi de aproximadamente $74,91\%$, com 3.802 erros de classificação para o estado paramagnético e 3.725 para o ferromagnético. Esses resultados indicam que, mesmo no cenário com desempenho inferior, o modelo manteve uma alta taxa de acerto nas previsões, com erros de classificação relativamente baixos em comparação com o total de amostras, reforçando a precisão e a estabilidade do modelo nas diferentes simulações.

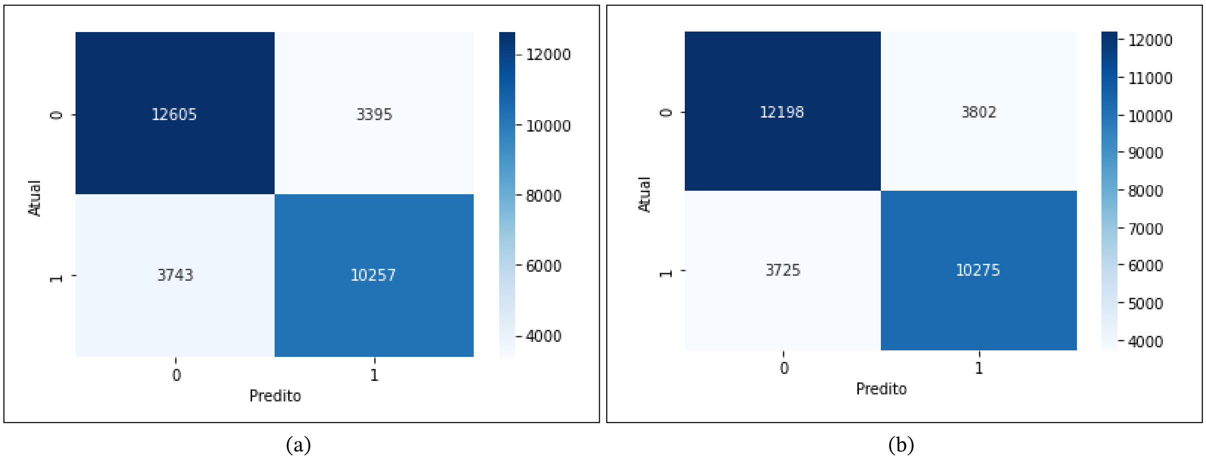


Figura 5: Matriz de confusão da rede neural: (5a) melhor desempenho (5b) pior desempenho.

5 Considerações Finais

Neste trabalho, foi feita uma introdução ao uso de técnicas de Machine Learning visando a identificar as fases (ferromagnética ou paramagnética) de um sistema magnético, descrito pelo Modelo de Ising na ausência de campo magnético externo. Através do Método de Monte Carlo foram geradas configurações de *spins*, usadas como dados para treinar a rede. Foi usada uma rede *Perceptron* de uma única camada composta por 7 neurônios. Com esta estratégia, foi possível evidenciar o desempenho promissor do modelo proposto na predição da transição de fase. A arquitetura escolhida oferece uma perspectiva única e valiosas contribuições para o trabalho, permitindo não apenas avançar na capacidade de caracterização da transição, mas também entender melhor a complexidade associada a este fenômeno em sistemas magnéticos. Como trabalho futuro, planeja-se estudar transições de fase induzidas por ruído em um sistema de osciladores acoplados numa rede unidimensional utilizando abordagens de aprendizado de máquina. Para esse caso, será necessário fazer algumas adaptações e avaliar as melhores estratégias para enfrentar uma abordagem nova e mais complexa. Uma diferença importante com o modelo de Ising aqui trabalhado encontra-se na geração dos dados do problema, que será mais complexa e custosa computacionalmente. Entretanto, a abordagem e resultados ora apresentados serão de excelente utilidade para o novo objetivo.

Agradecimentos

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001. A.G.S.F. e K.S.C.G são bolsistas de Doutorado e de Iniciação Científica da FAPERJ, respectivamente.

Referências

[1] B. A. Cipra, "An Introduction to the Ising Model," *American Mathematical Monthly*, vol. 94, pp. 937–959, 1987. Disponível em: https://doi.org/10.1080/00029890.1987.12000742

[2] Z. G. Arenas, D. G. Barci, e M. V. Moreno, "Path integral approach to nonequilibrium potentials in multiplicative Langevin dynamics," *Europhysics Letters*, vol. 113, p. 10009, 2016. Disponível em: https://doi.org/10.1209/0295-5075/113/10009

[3] O. Carrillo, M. Ibañes, J. García-Ojalvo, J. Casademunt, e J. M. Sancho, "Intrinsic noise-induced phase transitions: Beyond the noise interpretation," *Physical Review E*, vol. 67, no. 4, p. 046110, 2003. Disponível em: https://doi.org/10.1103/PhysRevE.67.046110

[4] J. Carrasquilla e R. Melko, "Machine learning phases of matter," *Nature Physics*, vol. 13, pp. 431–434, 2017. Disponível em: https://doi.org/10.1038/nphys4035

[5] L. Saitta, A. Giordana, e A. Cornuéjols, *Phase Transitions in Machine Learning*. Cambridge University Press, 2011. Disponível em: https://doi.org/10.1017/CBO9780511975509

[6] K. Shiina, H. Mori, Y. Okabe, e H. K. Lee, “Machine-Learning Studies on Spin Models,” *Scientific Reports*, vol. 10, p. 2177, 2020. Disponível em: https://doi.org/10.1038/s41598-020-58263-5

[7] D. A. Stariolo e S. A. Cannas, *Mecânica Estatística e Fenômenos Críticos: uma introdução*. Editora Livraria da Física, 2023.

[8] L. Onsager, “Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition,” *Physical Review*, vol. 65, pp. 117–149, Feb 1944. Disponível em: https://doi.org/10.1103/PhysRev.65.117