

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF - M'SILA

FACULTE DES SCIENCES
DEPARTEMENT PHYSIQUE
N° : Ph/TH/08/2024



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

**Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique**

Par: Saadia REFICE

Intitulé

***ETUDE COMPARATIVE PAR LA DYNAMIQUE DE
METROPOLIS ET LA DYNAMIQUE DES
CLUSTERS DE MONTE CARLO POUR LE MODELE
D'ISING EN 2D***

Soutenu le 24 / 06 /2024 devant le jury composé de:

H'mida LATELLI (Prof.)	Université de M'sila	Président
Abboud METATLA (MC (A))	Université de M'sila	Rapporteur
Siham KALLI (MC (A))	Université de M'sila	Examinatrice

Année universitaire : 2023/2024

REMERCIEMENTS

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

Louange et gratitude à Dieu pour m'avoir permis d'atteindre ce stade scientifique et d'être parmi vous aujourd'hui pour discuter de cette thèse.

J'adresse également mes sincères remerciements aux membres du jury de discussion, qui sont :

Le Prof. **H'mida LATELLI**, qui m'a honoré en acceptant de présider le jury de discussion.

Le Dr.**Siham KALLI**, qui est mon enseignant pour plusieurs modules accompagné le long de mon parcours académique.

Le Dr.**Abboud METATLA**, pour avoir accepté de diriger ce mémoire, pour son suivi attentif et son intérêt. Merci infiniment, honorable homme.

Vous n'avez jamais lésiné sur vos efforts, votre temps et votre aide chaque fois que j'en avais besoin. Votre encadrement de mon mémoire a été essentiel pour sa réalisation et le fait qu'elle soit entre vos mains aujourd'hui pour discussion.

Je n'oublierai jamais non plus mes remerciements à tous les enseignants et amis que j'ai rencontrés au cours de ma carrière universitaire.

Vous méritez tous les éloges et ma gratitude sincère. Que Dieu vous préserve pour continuer à servir le savoir et qu'Il vous récompense pour tout ce que vous offrez aux étudiants...

Saadia

Dédicace

Je dédie ce fruit de mon travail à ceux qui ont été la raison de ma passion pour les sciences et de mon ambition à atteindre les plus hauts sommets : à mon père et ma mère, qui ont été le moteur de mon activité et ont contribué à l'élargissement de mes connaissances.

À mes frères et sœurs, je leur suis extrêmement reconnaissant de m'avoir toujours soutenu.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE	06
CHAPITRE I: MODELE D'ISING A UNE ET DEUX DIMENSION	
I.1. Modele d'Ising	07
I.2. Modèle d'Ising à une dimension	07
I.2.1. La fonction de partition	09
I.2.2. L'aimantation	11
I.2.3. L'énergie moyenne	11
I.2.4. La capacité calorifique	12
I.2.5. L'énergie libre	12
I.2.6. La Susceptibilité	12
I.3. Modèle d'Ising à deux dimensions :	13
I.3.1. La fonction de partition	14
I.3.2. L' Aimantation	15
I.3.3. l'énergie moyenne	15
I.3.4. la capacité calorifique	16
I.3.5. L'énergie libre	16
I.3.5. La Susceptibilité	16
I.4. Approximation du champ moyen	17
I.4.1. L'Hamiltonien de champ moyen	17
I.4.2.1. La fonction de partition	18
I.4.2.2. L'aimantation	18
I.4.2.3. L'énergie moyenne	19
I.4.2.4. La capacité calorifique	20
I.4.2.5. L'énergie libre	21
I.4.2.6. La Susceptibilité	21
CHAPITRE II: SIMULATION MONTE CARLO ET DYNAMIQUE DE METRO POLIS	
II.1. Introduction	22
II.2. Introduction de l'estimateur-échantillonnage de l'espace des phases	22
II.2.1. L'estimateur des moyennes thermodynamiques	22
II.2.2. Echantillonnage aléatoire	23
II.2.3. Echantillonnage d'importance	23
II.2.4. Chaîne de Markov pour échantillonner le système à l'équilibre	23
II.2.4.1. Equation maîtresse	23

II.2. 4 .2. Taux d'acceptation	25
II.3. Algorithmes de simulation	25
II.3.1. Algorithme de Metro polis	25
II.3.2. Implémentation de l'algorithme Metro polis	26
II.4. Algorithme de Métro polis pour le modèle d'ising	27
<u>CHAPITRE III: SIMULATIONS MONTE CARLO ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG</u>	
III.1. Algorithmes des clusters pour le modèle d'Ising	28
III.2. Algorithme de Swendsen Wang	28
<u>CHAPITRE IV: RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSIONCONCLUSION</u>	
IV.1. Caractéristiques des systèmes à simuler	32
IV.2. Présentation des résultats et discussions	32
CONCLUSION	35

INTRODUCTION GENERALE

Le modèle d'Ising est un modèle de physique statistique , il a été le sujet des milliers d'articles depuis son introduction en 1920 . Il est utilisée pour modéliser les phénomènes dans lesquels des effets collectifs sont produits par des interactions locales entre particules à deux états, en particulier, les phénomènes ferromagnétiques dans les matériaux. En 1944 Lars Onsager a donné une analyse détaillée du modèle d'Ising bidimensionnel en prouvant l'existence d'une transition de phase dans la limite thermodynamique .

Les solutions exactes du modèle d'Ising n'existent que pour une chaîne (1-D) et (2-D) sans champ magnétique, d'où il faut faire recours aux techniques de simulations numériques pour résoudre le modèle hors ces deux cas. Parmi les techniques des calculs numériques, la méthode de Monte Carlo (MC) est la plus utilisée, elle est conçu pour effectuer le calcul des grandeurs thermodynamiques des modèle physiques: l'énergie interne, l'aimantation, la capacité calorifique, la susceptibilité magnétique. Cette technique est très utilisée dans l'étude des phénomènes critiques et les transitions de phase afin de déterminer la température de transition et bien analyser les résultats obtenus .

Historiquement , le premier l'algorithme utilisé dans les simulations MC est celui de Metropolis . Depuis 1987 la Méthode MC est doté d'un nouveau algorithme c'est l'algorithme des clusters (de Swendsen et Wang) qui tire ces idées des modèles des clusters d'Ising et de Potts .

Ce mémoire est consacré à une étude comparative du modèle d'Ising en 2-D entre la dynamique de Métropolis et celle des clusters de Swendsen-Wang, où le premier chapitre est consacré à l'approche théorique du modèle en 1-D et 2-D dans le cadre de l'ensemble canonique , le deuxième et le troisième chapitres sont un rappel sur les techniques des simulations par la méthode MC via l'algorithme de Métropolis et celle des clusters de Swendsen-Wang , dans le quatrième chapitre nous donnerons les résultats des simulations et leurs discussions , et nous terminerons la mémoire par une conclusion .

Chapitre I :

MODELE D'ISING A UNE ET DEUX DIMENSION

I.1. Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est un modèle de physique statistique utilisé pour modéliser différents phénomènes dans lesquels des particules (molécules) à deux états interagissent localement . Le modèle d'Ising pour le ferromagnétisme est un modèle sur réseau de moments magnétiques , dans lequel les ions des métaux de transition sont toujours orientés selon le même axe spatial et ne peuvent prendre que deux valeurs de spins : $\sigma = +1$ (*haut spin (HS)*) ou $\sigma = -1$ (*bas spin (BS)*) . Ce modèle nous permettra de simuler la transition de phase du ferromagnétisme au paramagnétisme autour de la température de Curie d'un matériau fictif , le ferromagnétisme étant causé par les moments magnétiques de spins des électrons . [01]

I.2. Modèle d'Ising à une dimension

- Cas général ($h \neq 0$ et $J \neq 0$) et solution exacte

À une dimension , le modèle d'Ising est exactement soluble par la méthode de la matrice de transfert. Cette solution montre que l'énergie libre est analytique pour toute température , ce qui signifie que ce modèle ne possède pas de transition de phase . [02]

On considère un réseau régulier dont chaque site est défini par une variable scalaire de spin : $\sigma = \pm 1$

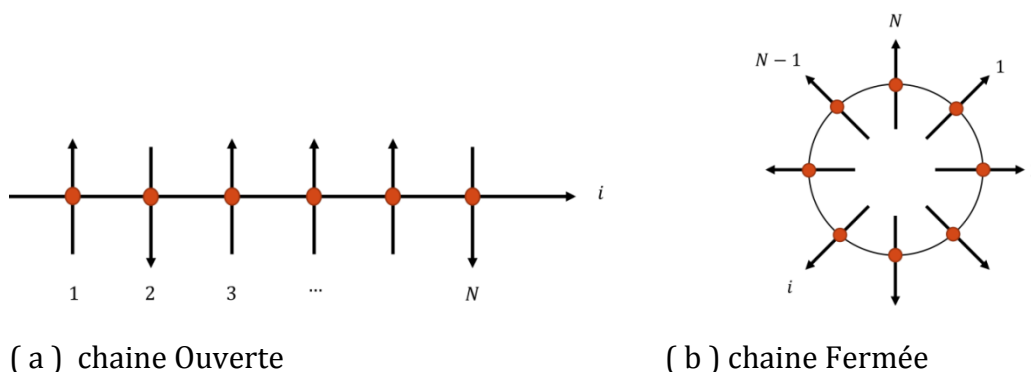


Figure I. 1: Représentation graphique d'une chaîne d'Ising .

▪ **L' Hamiltonien du système**

L'Hamiltonien d'une chaîne d'Ising sous l'effet d'un champ magnétique s'écrit sous la forme :

$$H\left\{\left(\sigma_i\right)\right\}=-J \sum_{\langle i j\rangle} \sigma_i \sigma_j-h \sum_i \sigma_i \quad (I.01)$$

h : le champ magnétique extérieur.

J : le couplage ferromagnétique

$\sum_i \sigma_i = M$: c'est la somme sur tous spins.

$\sum_{\langle i j\rangle} \sigma_i \sigma_j$: la somme sur les paires de sites les plus proches voisins (p p v).

$\sigma_{N+i} = \sigma_i$, on observe que l'Hamiltonien va constituer deux termes :

On peut calculer exactes mentles quantités physiques du modèle le long d'une chaîne fermée .

Le problème à une seule dimension nous permettra d'obtenir quelques résultats exacts. On peut calculer analytiquement :

- La fonction de partition Z .
- L'énergie interne U .

Pour une boucle fermée de (N) spin son a :

$$H=-J \sum_{K=1}^N \sigma_i \sigma_{i+1}-h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (I.02)$$

Avec :

$\sigma_i = \sigma_{i+N}$ pour satisfaire aux conditions périodiques . On peut symétriser le terme du champ magnétique .

Le premier terme représente l'interaction entre spins :

$$H_1=-J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (I.03)$$

Le deuxième terme :

$$H_2=-h \sum_i \sigma_i \quad (I.04)$$

Le dernier terme s'écrit sous la forme :

$$H_2=-\frac{h}{2} \sum_i\left(\sigma_i+\sigma_{i+1}\right) \quad (I.05)$$

Donc le résultat final est :

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (\text{I.06})$$

I.2.1. Fonction de partition

Dans le cadre de la statistique de l'ensemble canonique, la fonction de partition est donnée par l'expression :

$$Z = \text{Tr}(e^{-\beta H}) = \sum_i e^{-\beta E_i} \quad (\text{I.07})$$

$\beta = 1/k_B T$, T : la température

$K_B = 1.380658 \times 10^{-23} \text{ J / K}$: constante de Boltzmann .

Fonction de partition exacte :

On définit La fonction de partition pour N spin σ_i par :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} e^{-\beta H} \quad (\text{I.08})$$

Pour extraire les grandeurs thermodynamiques, il faut déterminer la fonction de partition canonique. Elle est donnée par les 2^N termes :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \exp \left[\beta \sum_{i=1}^N \left(J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right) \right] \quad (\text{I.09})$$

$$Z = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \dots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left[\beta \left(J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right) \right] \quad (\text{I.10})$$

Notons $K = \beta J$ et décomposons $\exp(-\beta H)$ de la façon suivante :

$$\exp(-\beta H) = \left(e^{K \sigma_1 \sigma_2 + \beta h \sigma_1} \right) \left(e^{K \sigma_2 \sigma_3 + \beta h \sigma_2} \right) \dots \left(e^{K \sigma_N \sigma_1 + \beta h \sigma_N} \right) \quad (\text{I.11})$$

$$\exp(-\beta H) = T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \dots T_{\sigma_N \sigma_1} \quad (\text{I.13})$$

On remarque que cette fonction de partition peut s'écrire sous la forme d'un produit de N matrices T

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | T | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | T | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | T | \sigma_1 \rangle \quad (\text{I.13})$$

La matrice de transfert T est donnée par

$$T = \begin{bmatrix} \exp[\beta(J+h)] & \exp[-\beta J] \\ \exp[-\beta J] & \exp[\beta(J-h)] \end{bmatrix} \quad (\text{I.14})$$

La fonction de partition Z peut être reformulée sous la forme d'un produit de N matrices T :

$$Z = \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_N} T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \dots T_{\sigma_N \sigma_1} = \sum_{\sigma_1} (T^N)_{\sigma_1 \sigma_1} = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | T^N | \sigma_1 \rangle \quad (\text{I.15})$$

C'est -à-dire :

$$Z = \text{Tr}(T^N) \quad (\text{I.16})$$

Les $T_{\sigma_i \sigma_j}$ peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice puisque chaque σ_i peut prendre exactement deux valeurs $+1$ ou -1 . Cette matrice T est définie de la façon suivante

- $\sigma_i = \sigma_j = 1 \rightarrow \langle 1 | T | 1 \rangle = e^{[\beta(J+h)]}$
- $\sigma_i = \sigma_j = -1 \rightarrow \langle -1 | T | -1 \rangle = e^{[\beta(J-h)]}$
- $\sigma_i = 1; \sigma_j = -1 \rightarrow \langle 1 | T | -1 \rangle = e^{[-\beta J]}$
- $\sigma_i = -1; \sigma_j = 1 \rightarrow \langle -1 | T | 1 \rangle = e^{[-\beta J]}$

La trace d'une matrice est invariante par changement de repère orthonormé . Donc on peut diagonaliser la matrice T (2×2)

$$T = \begin{pmatrix} T_{+1+1} & T_{+1-1} \\ T_{-1+1} & T_{-1-1} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} e^{[\beta(J+h)]} & e^{\beta h} \\ e^{\beta h} & e^{[\beta(J-h)]} \end{bmatrix} \quad (\text{I.17})$$

La diagonalisation de T implique : $\det(T - \lambda I) = 0$ et I est la matrice unité

$$T - \lambda I = \begin{bmatrix} e^{-\beta(J+h)} - \lambda & e^{\beta J} \\ e^{\beta J} & e^{\beta(-J+h)} - \lambda \end{bmatrix} \quad (\text{I.18})$$

Donc la fonction de partition prendre la forme :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | T^N | \sigma_1 \rangle = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (\text{I.19})$$

$$\lambda^2 - 2\lambda e^{\beta J} \cosh(\beta h) + 2 \sinh(2\beta J) = 0 \quad (\text{I.20})$$

Cette l'équation de deuxième degré :

$$\lambda_{\pm} = e^{(\beta J)} \left[\cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{(-4\beta J)}} \right] \quad (\text{I.21})$$

Donc on obtient :

$$Z = e^{(\beta J N)} \left\{ \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{(-4\beta J)}} \right]^N + \left[\cosh(\beta h) - \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{(-4\beta J)}} \right]^N \right\} \quad (\text{I.22})$$

On observe que $\lambda_+ \succ \lambda_-$. Pour un champ magnétique h nul, λ_+ se réduit à $2 \cosh(\beta J)$.

I.2.2. L'aimantation

L'aimantation par spin m vaut :

$$m = \frac{M}{N} \quad (\text{I.23})$$

O na :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \quad (\text{I.24})$$

La relation de l'aimantation est :

$$m = \frac{k_B T}{\lambda_+} \frac{\partial \lambda_+}{\partial h} \quad (\text{I.25})$$

$$m = \frac{\sin(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-4\beta J)}} \quad (\text{I.26})$$

Pour produire une magnétisation à température finie, il est obligatoire d'avoir un champ h non nul, donc il n'existe pas une transition de phase sous une seule dimension.

I.2.3. L'énergie moyenne

L'énergie moyenne d'un système à l'équilibre dans le cadre de la statistique de l'ensemble canonique est donnée par :

$$\bar{E} = \langle H \rangle = \text{Tr}(P_s H) \quad (\text{I.27})$$

$$\bar{E} = \sum_s E_s P_s = \sum_s \frac{E_s e^{-\beta E_s}}{Z} \quad (\text{I.28})$$

P_s : la probabilité canonique de l'état microscopique

$$\bar{E} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (\text{I.29})$$

I.2.4. La capacité calorifique

La capacité calorifique est donnée par la relation :

$$C_v = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right) = \left(\frac{\partial}{\partial T} \right) \left(- \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \right) \quad (\text{I.30})$$

Qui prendre la forme finale :

$$C_v = \frac{1}{k_B T^2} \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right) \quad (\text{I.31})$$

I.2.5. L'énergie libre

L'énergie libre d'un système s'écrit :

$$F = -k_B T \ln Z \quad (\text{I.32})$$

Puisque on a :

$$Z = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right) \right] \quad (\text{I.33})$$

$$Z \approx \lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right) \approx \lambda_+^N; \quad \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \rightarrow 0 \quad (\text{I.34})$$

On peut calculer l'énergie libre par spin dans la limite thermodynamique lorsque le nombre de spins tend vers l'infini. Dans cette limite , l'énergie libre par site est :

$$\frac{F}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{-1}{\beta N} \ln Z_N \quad (\text{I.35})$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(T, h) = \ln \lambda_+ + \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \approx \ln \lambda_+ \quad (\text{I.36})$$

$$F = -N k_B T \ln \lambda_+ \quad (\text{I.37})$$

L'expression finale est :

$$F = -k_B T \ln \lambda_+ = -k_B T \ln \left[\exp(\beta J) \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-4\beta J)} \right] \right] \quad (\text{I.38})$$

I.2.6. La susceptibilité

Pour un champ nul la susceptibilité est donnée par :

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_{h=0} \quad (\text{I.39})$$

Donc , on a :

$$\chi = \left(- \frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \right) \quad (\text{I.40})$$

$$\chi = N \beta \exp(2K) \quad (\text{I.41})$$

I.3. Modèle d'Ising en deux dimensions

Considérons un réseau en 2D avec un total de N sites . A chaque site du réseau, est associé une variable de spin σ ; avec les valeurs $\sigma = \pm 1$, les spins peuvent interagir avec leurs voisins les plus proches , et la force d'interaction peut être décrite par une constante de couplage J (Figure 02) , en plus , si on met le système sous l'influence d'un champ magnétique externe h l'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H \{(\sigma_i)\} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (I.42)$$

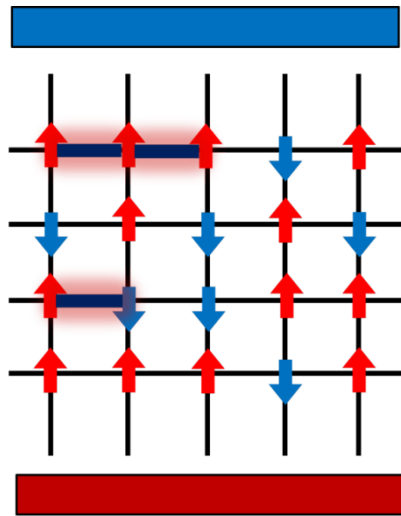


Figure I. 02 : Réseau en 2D avec des spin en interaction , rouge (HS) et bleue(BS) .

On considère un système de $N = L^2$ spins sur un réseau carré où L présente le nombre des sites de réseau dans chaque direction . Chaque spin σ_i n'interagit qu'avec ses 4 voisins les plus proches et pareillement avec un champ magnétique h .

L'Hamiltonien du système s'écrit sous la forme suivante [03] :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (I.43)$$

où $J_{\langle i,j \rangle}$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins , et J le paramètre d'interaction .

La méthode de matrice de transfert telle qu'elle a été utilisée précédemment peut être facilement étendue au modèle à deux dimensions .

Chaque spin prend deux valeurs (± 1), on aura donc 2^N états pour un réseau de N spins .
[01]

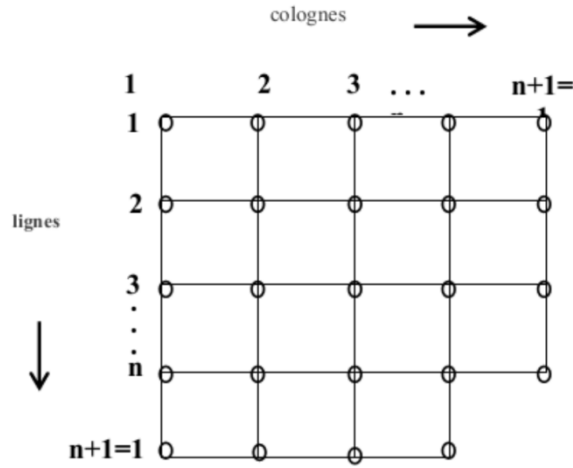


Figure I. 03 : Représentation d'un réseau en deux dimensions

I.3.1. La fonction de partition

Dans l'ensemble canonique, on s'intéresse à la fonction de partition :

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{-\beta H} = \text{Tr}(T^N) \quad (\text{I.44})$$

La fonction de partition présente une grande analogie avec la fonction de partition d'Ising à 1D. Ainsi , alors que la fonction de partition d'Ising 1D était donné par l'expression . [04]

$$Z = \left(2 \cosh \frac{J}{K_\beta T} \right)^N \quad (\text{I.45})$$

Onsager a démontré que la fonction de partition dans le cas d'Ising 2D peut s'écrire sous la forme [04] :

$$Z = \left(2 \cosh \frac{J}{K_\beta T} \exp(I) \right)^N \quad (\text{I.46})$$

Où I est une intégrale elliptique qui a la forme :

$$I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \ln \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + (1 - x^2 \sin^2 \varphi)^{\frac{1}{2}} \right] \right\} \quad (\text{I.47})$$

Tel que :

$$x = \frac{2 \sinh \left(\frac{2J}{K_\beta T} \right)}{\cosh^2 \frac{2J}{K_\beta T}} \quad (\text{I.48})$$

x est une fonction de T qui s'annule pour $T = 0$ et $T = \infty$. Pour J et T positives x est aussi positive et continue, le paramètre x présente un maximum à $T = T_c$ (température critique). [05]

Soit :

$$\sinh\left(\frac{2J}{K_B T}\right) = 1 \quad . \quad x(T_c) = 1 \quad . \quad k_B T_c = 2.669J \quad (I.49)$$

I.3.2. L'aimantation

Le système d Ising sur un réseau carré présente une transition de phase à ($T = T_c$) et en absence d'un champ magnétique ($h = 0$) L'expression de l'aimantation spontanée est :

$$\begin{aligned} m(T) &= \left(1 - [\sinh \beta J]^{-4}\right)^{\frac{1}{8}} & T_c > T \\ m(T) &= 0 & T_c < T \end{aligned} \quad (I.50)$$

En certain points ce paramètre devient zéro , ces points appelés points critiques ou température de Curie qui a la forme suivante :

$$\tanh\left[\frac{2J}{K_B T}\right] = \frac{1}{\sqrt{2}} \rightarrow \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1+\sqrt{2})} = 2.269185 \quad (I.51)$$

Cette équation est obtenue à partir des propriétés du réseau carré .

La température critique exacte donnée par :

$$T_c = \frac{2J}{K_B \ln(1+\sqrt{2})} = \frac{2.269185J}{K_B} \quad (I.52)$$

I.3.3. L'énergie moyenne

L'Energie moyenne est donné par :

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (I.53)$$

$$E = -2NJ \tanh(2J\beta) - 2NJ \left[\frac{\sinh^2(2J\beta - 1)}{\sinh(4J\beta)} \right] \left[\frac{2}{\pi} f(x) - 1 \right] \quad (I.54)$$

Où $f(x)$ étant l'intégrale elliptique :

$$f(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \frac{1}{\sqrt{(1-x^2 \sin^2 \varphi)}} \quad (I.55)$$

f est connu comme l'intégrale elliptique complète du premier type .

$$f(x) = \ln \frac{4}{\sqrt{1-x^2}} + \dots \quad (I.56)$$

I.3.4. La capacité calorifique

L'expression de la capacité calorifique est défini par :

$$C_V = -\frac{1}{k_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (I.57)$$

$$C_V \approx -NK_\beta \frac{2}{\pi} \left(\frac{2J}{K_\beta T_C} \right)^2 \ln \left(1 - \frac{T}{T_C} \right) + \text{constante} \quad (I.58)$$

(T près de T_C).

Lorsque $T = T_C$ la capacité thermique diverge :

$$C_V(T) \cong -\ln \epsilon \quad (I.59)$$

Où la différence de température réduite est donnée par :

$$\epsilon = \frac{(T_C - T)}{T_C} \quad (I.60)$$

I.3.5. L'énergie libre

L'expression de l'énergie libre pour un champ nul ($h = 0$) est défini par :

$$\begin{aligned} F(t) &= -k_B T \ln Z = -k_B T \ln \left[(2 \cosh(2\beta J) \exp I)^N \right] \\ &= -NK_\beta T \ln [2 \cosh(2\beta J)] - NK_\beta T \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \left[\frac{1}{2} (1 + (1 - x^2 \sin^2 \varphi))^{\frac{1}{2}} \right] \end{aligned} \quad (I.61)$$

I.3.5. La susceptibilité magnétique

La susceptibilité magnétique peut être défini comme :

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial h} \quad (I.62)$$

On obtient la susceptibilité à partir des fluctuations de l'aimantation :

$$\chi = \frac{1}{k_{\beta}T} \int d^3r \left[\langle m(r)m(0) - \langle m(0) \rangle^2 \rangle \right] \quad (I.63)$$

Lorsque $T \rightarrow T_c$ donc:

$$\chi = (T_c - T)^{-\gamma} \equiv (T_c - T)^{-\frac{7}{4}} \quad (I.64)$$

La susceptibilité magnétique diverge .

I.4. Approximation du champ moyen

En 1D et 2D le problème est résoluble même si les calculs permettant de parvenir à la solution sont un peu techniques . Mais à partir de 3D, le problème n'est toujours pas résolu . Une idée de Weiss en 1907 consiste à admettre que , en première approximation, chaque spin est soumis au champ moyen de tous les autres . Cette hypothèse se traduit en remplaçant dans chaque couple l'un des spins par sa valeur moyenne $\langle \sigma_i \rangle$, Pour que cette démarche soit valable , il est nécessaire que les fluctuations par rapport à la valeur moyenne soient petites . [08]

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) + \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \sigma_j \langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \\ &\approx -m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j) + (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) \\ &\approx -m^2 + m(\sigma_i \sigma_j) + \underbrace{\Delta \sigma_i \Delta \sigma_j}_{\text{\{Négligé\}}} \end{aligned} \quad (I.65)$$

$\langle \sigma \rangle$, l'aimantation moyenne

$(\Delta \sigma_i \Delta \sigma_j)$ est négligeable, puisque les fluctuations par rapport à $m = \langle \sigma \rangle$ sont petites.

I.4.1. L'Hamiltonien de champ moyen

L'énergie moyenne peut être défini :

$$\begin{aligned} H_{CM} &= -J \sum_{(i,j) \in \nu} (-m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j)) - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &= \frac{1}{2} JqNm^2 - \frac{Jm}{2} \left(\sum_{i=1}^N \sum_{(i,j) \in \nu} \sigma_i + \sum_{j=1}^N \sum_{(i,j) \in \nu} \sigma_j \right) - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\ &= \frac{1}{2} JqNm^2 - (h + qJm) \sum_{i=1}^N \sigma_i \end{aligned} \quad (I.66)$$

Où q est l'indice de coordination , on néglige $\frac{1}{2} JqNm^2$ donc :

$$H_{CM} = -(qJm + h) \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (I.67)$$

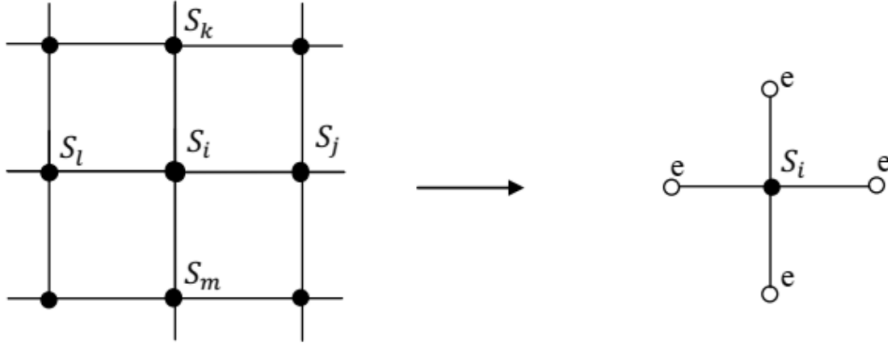


Figure 1.04 : Principe de l'approximation du champ moyen

I.4.2.1. La fonction de partition

On définit la fonction de partition par la relation suivante :

$$Z_{CM} = e^{-\beta H_{CM}} \quad (I.68)$$

Elle est donnée par :

$$\begin{aligned} Z_{CM} &= e^{-\beta \frac{q}{2} J N m^2} \sum_{\sigma_i} e^{\beta (J q m + h) \sum_i \sigma_i} \\ &= e^{-\beta \frac{q}{2} J N m^2} \underbrace{\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta (J q m + h) \sigma_i}}_{\text{Nblocs indépendants et similaires}} \\ &= e^{-\beta \frac{q}{2} J N m^2} \left[\sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta (J q m + h) \sigma_i} \right]^N \\ &= e^{-\beta \frac{q}{2} J N m^2} \left[2 \cosh(\beta (J q m + h)) \right]^N \end{aligned} \quad (I.69)$$

I.4.2.2. L'aimantation

Elle est donnée par :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \quad (I.70)$$

On dérive :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial \left\{ \frac{1}{2} J q N m^2 - N K_{\beta} T \ln [2 \cosh \beta (J q m + h)] \right\}}{\partial h} \quad (I.71)$$

L'équation est :

$$m = \tanh[\beta (J q m + h)] \quad (I.72)$$

L'équation d'état de la substance ferromagnétique :

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 0 \rightarrow m = \tanh(\beta J q m) \quad (I.73)$$

Solution de l'équation de m (1.72) :

L'équation est admet deux solution si , $h \neq 0$

L'équation est admet une seul solution si ; $h = 0$, $\beta J q > 1$, $m = 0$

L'équation est admet une seul solution si ; $h = 0$, $\beta J q < 1$, $m = 0$

L'équation précédente(1.72) est une équation transcendante que l'on peut résoudre graphiquement. Les solutions de cette équation de la température font apparaître l'existence d'une transition pour la température critique T_c définie par : $kT_c = qJ$

- Si $T > T_c$: l'équation d'état admet une unique solution pour le paramètre d'ordre $m = 0$
- Si $T < T_c$: l'équation d'état possède une solution nulle et deux solutions non nulles et opposées. Cependant, en utilisant la contrainte sur l'énergie libre, seule les deux solutions non nulles correspondent à une situation d'équilibre . [09]

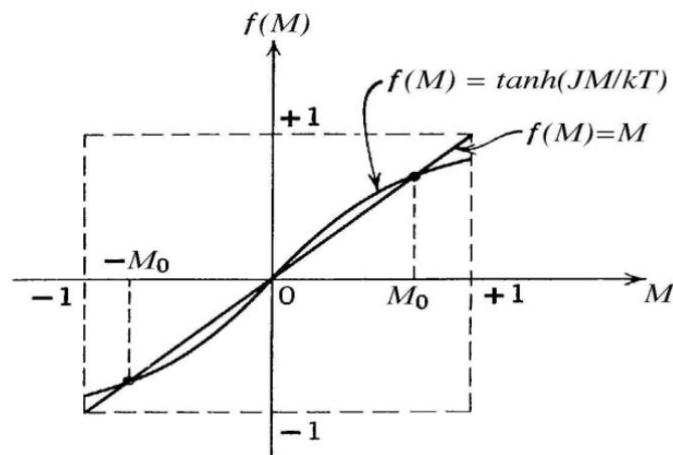


Figure I.05: Etude graphique de la magnétisation dans l'approximation de champ moyen

I.4.2.3. Energie moyenne

L'énergie moyenne peut être défini :

$$e = \frac{E}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (I.74)$$

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 + \tan \beta (J q m + h) + \frac{\partial m}{\partial \beta} [-\beta J q m + \beta J q \tanh(J q m + h)] \quad (I.75)$$

Or il est facile de vérifier l'identité :

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial m} = -\beta J q m + \beta J q \tanh(J q m + h) \quad (I.76)$$

On obtient :

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 + \tan \beta (J q m + h) + \frac{\partial \ln Z}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial \beta} \quad (I.77)$$

L'équation de m (1.72) permet d'éliminer la (\tanh) et l'énergie libre par rapport à (m) , alors le second terme s'annule donc :

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 \quad (I.78)$$

I.4.2.4. Capacité calorifique

En dérivant l'énergie on trouve :

$$C_v = \frac{\partial e}{\partial T} = \frac{J q}{2} \frac{\partial m^2}{\partial T} \quad (I.79)$$

Lorsque $T = T_c$ Et m est très petit donc :

$$\tanh x \approx x - \frac{x^3}{3} \quad (I.80)$$

En injectant (x) on trouve :

$$m = \beta (J q m + h) - \beta^3 \frac{(J q m + h)^3}{3} \quad (I.81)$$

Quand le champ magnétique est nul ($h = 0$) donc :

$$m^2 \approx \frac{3 \left(\frac{T_c}{T} - 1 \right) T^3}{T^3_c} \approx 3 \left(1 - \left(\frac{T}{T_c} \right) \right) \quad (I.82)$$

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{3K_b}{2} & (T < T_c) \\ C_v &= 0 & (T > T_c) \end{aligned} \quad (I.83)$$

I.4.2.5. L'énergie libre

L'énergie libre dans cette approximation est donnée par :

$$\begin{aligned} F(T) &= -K_\beta T \ln Z \\ &= \frac{1}{2} JqN - NK_\beta T \ln [2 \cosh \beta (Jqm + h)] \end{aligned} \quad (I.84)$$

I.4.2.6. La susceptibilité

Elle est donnée par la relation :

$$\begin{aligned} \chi &= \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial h} \\ &= \frac{1 - m^2}{K_\beta T - Jq(1 - m^2)} \end{aligned} \quad (I.85)$$

Pour $T > T_c$, $m = 0$ et $h = 0$ donc :

$$\chi = \frac{1}{K_\beta (T - T_c)} \quad (I.86)$$

Pour $T < T_c$ donc :

$$m^2 \approx \frac{3(T_c - T)}{T_c} \Rightarrow (1 - m^2) = \frac{(3T - 2T_c)}{T_c} \quad (I.87)$$

On obtient :

$$\chi = \frac{1}{K_\beta [T - T_c (1 - m^2)]} \quad (I.88)$$

D'où :

$$X = \frac{1}{2K_\beta (T_c - T)} \quad (I.89)$$

Chapitre II :

SIMULATION MONTE CARLO ET DYNAMIQUE DE METROPOLIS

II.1. Introduction

La technique de simulation de Monte Carlo constitue l'un des outils informatiques utilisés pour l'étude des comportements des systèmes dits complexes de la vie réelle leur développement avec le temps. Cette technique a été introduit pour la première fois dans un article coécrit avec Stanislaw Ulam en 1949 , cette manière numérique prend une place assez importante que la théorème et l'expérience dans divers intervalles: biologie, statistiques, sciences des matériaux , finances , chimie et physique Cette technique très importante pour l'étude des phénomènes critiques et les transitions de phase .

II.2. Introduction de l'estimateur-échantillonnage de l'espace des phases

II.2.1. L'estimateur des moyennes thermodynamiques

La méthode Monte Carlo consiste à choisir un échantillon qui contient les états dominants. Cette opération s'appelle l'échantillon important L'idée est de remplacer l'expression de $\langle A \rangle$ par un estimateur $\langle A \rangle_M$ qui correspond à une somme finie dans l'espace des phases, on choisit aléatoirement un nombre fini M de micro-états $\{s\}_{i=1,\dots,M}$ à partir d'une distribution de probabilité P_s . L'estimateur de la moyenne de l'observable A s'écrit sous la forme :

$$\langle A \rangle \cong \langle A \rangle_M = \frac{\sum_{s=1}^M A_s P_s^{-1} e^{-\beta H(s)}}{\sum_{s=1}^M P_s^{-1} e^{-\beta H(s)}} \quad (\text{II.01})$$

Le facteur P_s à l'itération i compense le fait que les états avec les probabilités les plus importantes vont être sélectionnés un plus grand nombre de fois que les autres durant la simulation si ces états sont échantillonnées uniformément .

II.2.2. Echantillonnage aléatoire

Si on choisit la même probabilité $P_s = P$ pour toutes les configurations , l'échantillonnage est uniforme , on a alors :

$$\langle A \rangle_M = \frac{\sum_{s=1}^M A_s e^{-\beta H(s)}}{\sum_{s=1}^M e^{-\beta H(s)}} \quad (\text{II.02})$$

Ce choix est particulièrement adapté pour des moyennes thermiques réalisées avec des distributions de probabilité qui ne prennent pas de valeurs significatives pour un petit nombre de configurations et des valeurs proches de zéro pour une majorité de configurations . Si le nombre des états M d'échantillons augmente , $\langle A \rangle_M$ devient une estimation plus précise de $\langle A \rangle$, et lorsque $M \rightarrow \infty$ nous avons $\langle A \rangle_M = \langle A \rangle$.

II.2.3. Echantillonnage d'importance

L'opération de choisir un échantillon qui contient les états dominants s'appelle l'échantillon important . Les états de l'échantillon ne sont pas équiprobables, mais distribués selon la distribution de probabilité de Boltzmann donnée dans l'équation qui permet d'améliorer l'estimation . Dans ce cas , l'estimation devient

$$\langle A \rangle_M = \frac{1}{M} \sum_{s=1}^M A_s \quad (\text{II.03})$$

Le calcul des fonctions thermodynamiques peut être fait en évitant le calcul de la fonction de partition Z et en ne considérant qu'un échantillon représentatif des configurations de plus forts poids de Boltzmann. On réalise alors une marche dirigée dans l'espace des phases de telle manière que chaque état du système apparaisse avec une probabilité égale à son poids de Boltzmann .

II.2.4. Chaîne de Markov pour échantillonner le système à l'équilibre

II.2.4.1. Equation maîtresse

Reprenons notre problème de mécanique statistique : nous sommes intéressés le plus souvent par le calcul de la moyenne thermique d'une grandeur et non directement par la fonction de partition , la solution de ce problème est de générer une chaîne de configurations successives, qui converge vers la distribution d'équilibre P_{eq} .

Cette mécanique est connue par processus de Markov et signifie que la transition du système de la configuration i à une autre configuration j est possible avec une probabilité de transition $W(i \rightarrow j)$ à laquelle il impose deux conditions :

- ne pas varier avec le temps .
- dépendre uniquement des propriétés du système sur les états a et b .

Ceci traduit par :

$$\sum_b W(i \rightarrow j) = 1 \quad (\text{II.04})$$

$W(i \rightarrow i)$ n'est pas obligatoirement nul .

L'équation d'évolution du système est alors donnée par l'équation maîtresse suivante :

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_i W(i \rightarrow j)P_i - \sum_j W(j \rightarrow i)P_j \quad (\text{II.05})$$

Avec cette procédure , la simulation produise une succession de configurations avec la distribution d'équilibre de Boltzmann . Pour réaliser notre objectif , il est utile d'imposer deux nouvelles conditions au processus de Markov , notamment l'ergodicité et la balance détaillée .

▪ Ergodicité

La condition d'ergodicité est que le système peut , à partir d'un état donné , assumer tout état possible après un temps suffisamment long pendant le processus de Markov. La condition d'ergodicité n'est pas satisfaite si toutes les probabilités de transition d'un état donné sont nulles .

▪ Balance détaillée

Si le système est en équilibre, c'est-à-dire $dP_{eq} / dt = 0$, les taux de transition à partir d'un état et vers le même état sont égaux . On écrit donc:

$$\sum_i W(i \rightarrow j)P_i = \sum_j W(j \rightarrow i)P_j \quad (\text{II.06})$$

Nous appliquerons une condition supplémentaire à nos probabilités de transition qui assure que la distribution de probabilité de Boltzmann :

$$W(i \rightarrow j)P_i = W(j \rightarrow i)P_j \quad (\text{II.07})$$

C'est la condition de la balance détaillée .

II.2.4.2. Taux d'acceptation

L'équation (II.9) est plus connue sous le nom de taux d'acceptation et sous la forme suivante :

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{P_j}{P_i} = e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad (\text{II.08})$$

Il existe une infinité de taux de transition qui vérifie l'expression de taux d'acceptation .On peut décomposer le taux de transition en deux parties :

$$W(i \rightarrow j) = \alpha(i \rightarrow j)\pi(i \rightarrow j) \quad (\text{II.09})$$

Où $\alpha(i \rightarrow j)$ est la probabilité de "sélection" : à partir de la configuration $\{i\}$, on tire au hasard une configuration $\{j\}$; cette nouvelle configuration est acceptée avec la probabilité d'acceptante $\pi(i \rightarrow j)$. L'équation devient :

$$\frac{W(i \rightarrow j)}{W(j \rightarrow i)} = \frac{\alpha(i \rightarrow j)\pi(i \rightarrow j)}{\alpha(j \rightarrow i)\pi(j \rightarrow i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad (\text{II.10})$$

Parmi les choix de probabilité de sélection $\alpha(i \rightarrow j)$, on s'intéresse à celui qui mène à la dynamique de Monte Carlo le plus important qu'est présentée dans ce chapitre

II.3. Algorithmes de simulation

II.3.1. Algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis est l'une des plus efficaces et simples solutions en ce qui concerne les problèmes de simulation en transition de phase.

Afin d'obtenir des solutions des équations ou, en d'autres termes d'obtenir le taux de transition $W(i \rightarrow j)$, notons que le processus stochastique élémentaire dans un algorithme Monte Carlo est la succession de deux étapes :

1. A partir d'une configuration i , on tire au hasard une configuration j , avec une probabilité $\alpha(i \rightarrow j)$.

2. Cette nouvelle configuration est acceptée avec une probabilité $\pi(i \rightarrow j)$.

Dans l'algorithme original de Metropolis (et dans la plupart des algorithmes Monte Carlo), on choisit $\alpha(i \rightarrow j) = \alpha(j \rightarrow i)$. Dans ce cas, l'équation (II.10) se réexprime comme :

$$\frac{\pi(i \rightarrow j)}{\pi(j \rightarrow i)} = e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad (\text{II.11})$$

La solution choisie par Metropolis et al. est :

$$\pi(i \rightarrow j) = \begin{cases} e^{-\beta(E_j - E_i)} & \text{si } E_i < E_j \\ 1 & \text{si } E_i > E_j \end{cases} \quad (\text{II.12})$$

Comme nous allons le voir, cette solution est très efficace et simple à mettre en œuvre.

II.3.2. Implémentation de l'algorithme Metropolis

D'un point de vue pratique, la mise en place de l'algorithme de Metropolis est le suivant . Une itération ou pas Monte Carlo correspond aux différentes étapes suivantes :

- (1) On choisit un site i au hasard parmi les N possibilités .
- (2) Réorienter le site choisi i aléatoirement vers une nouvelle orientation j parmi les voisins .
- (3) On calcule la différence d'énergie $\Delta E = E_j - E_i$ entre la nouvelle configuration avec un spin retourné et la configuration de départ .
- (4) Si $\Delta E < 0$ la nouvelle configuration est acceptée .
- (5) Si $\Delta E > 0$, on génère alors un nombre aléatoire ζ tel que $\zeta \in [0,1]$.
- (6) Si $\zeta < \exp(-\beta\Delta E)$ la nouvelle configuration est acceptée , sinon l'ancienne configuration est conservée .
- (7) On calcule les grandeurs suivantes : aimantation par spin , susceptibilité par spin .
- (8) On tire ensuite un nouveau site au hasard et on recommence la procédure .

II.4. Algorithme de Métropolis pour le modèle d'ising

Dans l'état du modèle d'Ising, une mise à jour de configuration retour à sélectionner un spin au hasard et retournant avec une probabilité.

Lors la mise à jour d'une configuration Ising $C \rightarrow C'$ en retournant un nombre de tours, le rapport de poids $W(C')/W(C)$ de la probabilité d'acceptation est donnée par :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[-\frac{J}{T} \sum_{(i,j)} (\sigma'_i \sigma'_j - \sigma_i \sigma_j) + \frac{h}{T} \sum_i (\sigma'_i - \sigma_i) \right] \quad (\text{II.13})$$

Si on bascule un seul spin j , ce rapport devient :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[\frac{2J}{T} \sigma_j \left(\sum_{\delta(j)} \sigma_{\delta(j)} - \frac{h}{J} \right) \right] \quad (\text{II.14})$$

Où $\sigma(j)$ représente un voisin le plus proche de l'emplacement j . Depuis le critère d'acceptation-rejet on fait comparer le rapport ci-dessus avec un nombre aléatoire $0 \leq r < 1$, afin d'éviter les évaluations fastidieuses répétées de fonctions exponentielles, les ratios de poids doivent être pré-calculés et stockés dans une table.

Il convient de souligner qu'il n'est en fait pas nécessaire de sélectionner le spin d'être retourné au hasard ; on peut aussi passer par tous les spins un par un. Dans ce cas, le bilan détaillé n'est pas rempli pour chaque étape, mais la distribution correcte est néanmoins obtenue.

▪ Mesure des observables physiques :

Dans le cadre naturel du modèle ISING ferromagnétique est l'aimantation, qui est le paramètre d'ordre de la transition de phase se produisant à une température $T_c > 0$.

On observe M la magnétisation complète et par m la quantité normalisée :

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad m = \frac{M}{N} \quad (\text{II.15})$$

Dans un réseau fini la symétrie spin-inversion ne se décompose pas dans une simulation en cours depuis longtemps et donc $\langle m \rangle = 0$, quand $T < T_c$, dans la pratique alors on mesure $\langle m \rangle \neq 0$. Il est mieux de mesurer $\langle |m| \rangle$ ou $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$, puisque, dans la limite thermodynamique elle égale $\langle m \rangle$ de symétrie brisée.

Chapitre III :

SIMULATIONS MONTE CARLO ET DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

III.1. Algorithmes des clusters pour le modèle d'Ising :

Parmi désavantages de la dynamique de Metropolis, le ralentissement quand on s'approche des points critiques, où le temps d'autocorrélation peut être long dans abondance de systèmes. Ces difficulté peuvent être significativement réduits, voire complètement éliminés, on utilise les algorithmes des clusters, ou un grand nombre de spins peut être retournés simultanément pour obtenir une évolue rapidement des configurations. Dans un algorithme de cluster, on construit des spins de telle sorte que tout le cluster peut être retourné avec une probabilité élevée .on considère ici seulement l'état du champ magnétique nul ($h = 0$)

III.2. L'algorithme de Swendsen Wang

Après l'algorithme de MC Métropolis, vient celui de Swndsen Wang(1987) qui lui aussi se base sur le flippe des clusters. L'idée était inspirée du travail de Fortuin-Kasteleyn(1972).

L'algorithme ressemble a celui de Wolff ; l'ensemble du réseau de spin est divise en des clusters en joignant selon une probabilité $1 - \exp(-2bJ)$ les spins voisins de même signe.

Les mêmes étapes de l'algorithme de Wolff sont répétées, a l'exception que tous les cluster sont flippes avec une probabilité $1/2$. Pour chaque cluster flippé, une décision est prise avec une probabilité $1/2$ si le flip est accepté ou non.

Algorithme de Swendsen Wang

1. On choisit un spin m au hasard
2. Voir s'il existe un spin voisin qui possède le même signe et l'ajouter au cluster avec une probabilité $1 - \exp(-2bJ)$.
3. Pour chaque spin ajouter au cluster, examiner ses voisins qui ont le même signe que lui et l'ajouter au cluster selon la probabilité $1 - \exp(-2bJ)$.

4. répéter 3 jusqu'à aucun spin ne sera ajouté.

5. Flipper le cluster avec une probabilité 1/2. [01]

Pour construire l'algorithme de cluster pour la première fois par Swendsen et Wang, nous introduisons une indice de liaison b correspondant à une paire de spins en interaction $\sigma_i(b)\sigma_j(b)$; $b = 1, 2, 3, \dots, N_b$, où le nombre de liaisons $N_b = dN$. Pour un réseau cubique de d -dimensionnel avec N sites et avec des conditions périodiques aux limites. Alors on peut écrire l'énergie du modèle D'ISING ferromagnétique par la relation suivante :

$$E(\sigma) = -|J| \sum_{b=1}^{N_b} [\sigma_{i(b)}\sigma_{j(b)} + 1] = \sum_{b=1}^{N_b} E_b \quad (\text{III.01})$$

$|J| > 0$ est la constante d'interaction ferromagnétique.

Pour les raisons qui apparaîtront clairement ci-dessous nous pouvons écrire la fonction de partition sous la forme :

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} [1 + (e^{-E_b/T} - 1)] \quad (\text{III.02})$$

La fonction de liaison avec les arguments 0,1 correspondant aux deux termes du côté droit ci-dessus :

$$\begin{cases} F_b(0) = 1 \\ F_b(1) = e^{-E_b/T} - 1 \end{cases} \quad (\text{III.03})$$

On peut écrire la fonction de partition sous l'expression :

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} [F_b(0) + F_b(1)] \quad (\text{III.04})$$

Nous introduisons un ensemble de variable de liaison $\tau_b = \pm 1$ de liaison auxiliaires, on utilise comme argument pour chaque liaison $\tau = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{N_b}\}$. En utilisant la liaison b pour désigner une liaison entière, la méthode analogue à une configuration de spins σ .

On peut écrire Z comme somme sur des spins et des liens

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \prod_{b=1}^{N_b} F_b(\tau_b) \quad (\text{III.05})$$

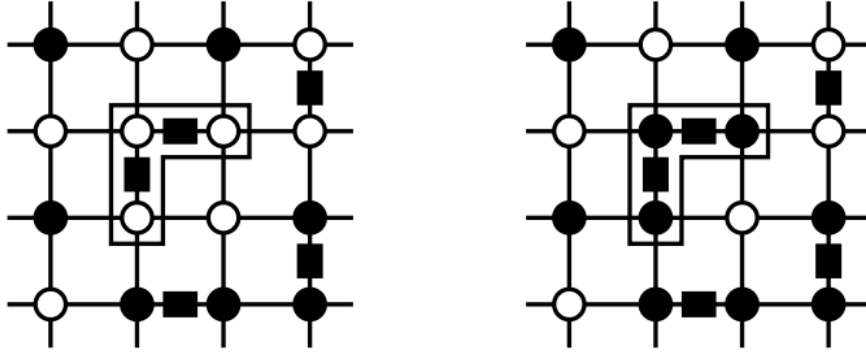


Figure III . 01 : Une configuration de spins (cercles) dans laquelle des liaisons remplies (lignes entre les cercles) ont été lancées entre des spins égaux selon la probabilité appropriée. Un cluster composé de trois spins est identifié et ses deux orientations sont affichées . Les poids dans la fonction de partition est le même pour ces deux configuration.

La fonction de liaison F_b dépend implicitement des spins reliés par la liaison b :

$$F_b(1) = e^{E_b/T} - 1 = \begin{cases} e^{2J/T} - 1 & \text{if } \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \\ 0 & \text{if } \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \end{cases} \quad (\text{III.06})$$

Pour une contribution n'est pas égal à zéro la fonction de partition (Z), la variable de liaison $\tau_b = 1$ est autorisé uniquement entre spins parallèles ; nous appellerons. Une liaison remplie. Dans l'espace combiné des spins et des liaisons, le poids de configuration dans la fonction de partition (Z) est donnée par:

$$P(\sigma, \tau) = \prod_{b=1}^{N_b} F_{b(\tau)} \quad (\text{III.07})$$

Qui, si nous n'avons pas d'obligations remplies (illégales) est simplement :

$$P(\sigma, \tau) = (e^{2J/T} - 1)^{N_1} \quad (\text{III.08})$$

Où N_1 est le nombre d'obligations remplies , la configuration de rotation n'affecte le poids qu'imposera des restrictions sur l'endroit où les obligations remplies peuvent être placées . Ce schéma repose essentiellement sur la constante ajoutée $-J$ dans chaque énergie de liaison dans l'équation (III.01) ; sans ce terme , il pourrait y avoir des liens remplis également entre les spins antiparallèles, et la fonction de poids serait avoir une dépendance plus complexe sur ces spins , la caractéristique clé du système Swendsen-Wang est que le poids est exactement nul si une liaison remplie est placée entre des spins antiparallèles .

Le but est maintenant de construire un schéma pour générer des configurations de spin et de liaison distribuées selon la fonction de poids statistique . Pour une configuration de spin donnée , on définit la probabilité d'une configuration de liaison correspondant au poids comme :

$$P(\tau) = \prod_b p_b(\tau_b) \quad (\text{III.09})$$

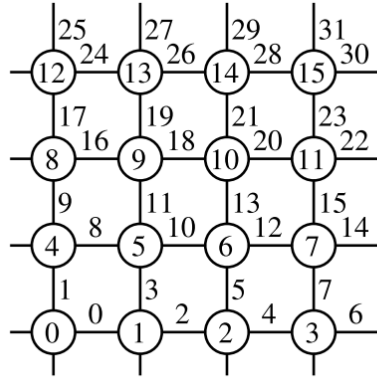


Figure III . 02 : Convention d'étiquetage des spins et liaisons d'un réseau carré 2D (ici de taille 4*4) avec conditions aux limites périodique .

Où la probabilité de lien individuel :

$$P(\tau_b) = \frac{F_b(\tau_b)}{F_b(0) + F_b(1)} \quad (\text{III.10})$$

La probabilité d'une liaison remplie est donc :

$$\begin{cases} P(\tau_b = 1) = 1 - e^{-2J/T} & , \quad \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \\ P(\tau_b = 0) = 0 & , \quad \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \end{cases} \quad (\text{III.11})$$

Les simulations MC par la dynamique des clusters se fait sur des modèles percolatifs (modèles des clusters d'Ising, de Potts, ...), par contre la dynamique de Métropolis est appropriée aux modèles thermiques [16]

CHAPITRE IV: RESULTATS DES MESURES NUMERIQUES ET DISCUSSION

IV.1. Caractéristiques des systèmes à simuler

Nous avons simulés un ensemble de systèmes d'Ising constitués à base de réseaux carrés de taille $L \times L$ ($d = 2$), en deux phases initiales différentes : haut spin (*HS*) et bas spin (*BS*), avec des interactions ferromagnétiques et qui sont limitées aux plus proches voisins (p p v) (nombre de p p v = $2d$) et avec des conditions périodiques aux bords et en système d'unité tel que $K_B = J = 1$. Nous avons utilisés dans les simulations, à titre comparative, deux dynamiques, celui de Métropolis et de clusters de Swendsen-Wang (SW).

Notons que, pour éviter des mesures erronées sur les grandeurs physiques, on fait équilibrer thermiquement le système dans tous les calculs, avant chaque mesure.

IV.2. Présentation des résultats et discussions

Nous avons calculé l'aimantation absolue moyenne par site $|m| = \langle |\sigma| \rangle$ par les deux dynamiques de Métropolis et des clusters de Swenden-Wang pour des réseaux de tailles indiqué précédemment, les résultats sont illustrés dans les Figures ci-dessous (Fig. IV.01).

Nous avons obtenus la capacité calorifique $C_v = \frac{1}{N} \frac{dE}{dT} = \frac{1}{N} \frac{1}{T} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ et la susceptibilité magnétique $\chi = \frac{1}{N} \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2)$ par la distribution de l'ensemble des pas MC sur des bins (ici on a préféré de prendre 10 bins, en général, dans les simulations MC le nombre de bins préférable varie entre 10 et 100 bins) ce qui nous a permis de calculer la capacité et la susceptibilité à partir des fluctuations de l'énergie et de l'aimantation entre bins.

Les mesures de ces quantités montrent que la phase initiale du système n'a pas un grand effet sur le résultat de mesure.

Les résultats de simulations pour l'aimantation montre que plus le système est large plus la température critique est plus proche de celle d'Onsager : $T_c = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) \cong 2.269$

,et les deux dynamiques donnent des résultats très proches , en plus , les résultats montrent que la phase initiale n'a pas d'effet remarquable sur l'aimantation .

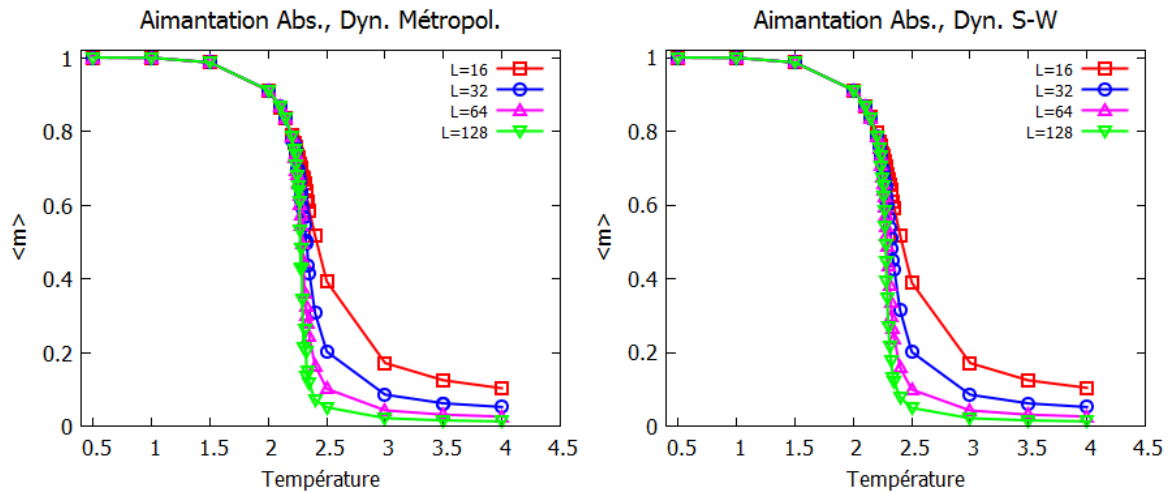


Figure IV . 01: Variation de l'aimantation absolue avec la température pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$ mesurée par la dynamique de Métropolis et la dynamique des clusters de Swendsen-Wang .

Les simulations montrent aussi que la capacité calorifique et la susceptibilité magnétique divergent aux alentours de la température critique , les résultats de simulations montrent que plus le système est large plus la divergence de ces deux quantités est rapide aux alentours de la température critique , et plus le système est large plus la température de divergence est très proche de celle d'Onsager , qui correspond à un système de taille infinie (Fig. IV.02) et (Fig. IV.03) , ce qui reflète l'effet de taille .

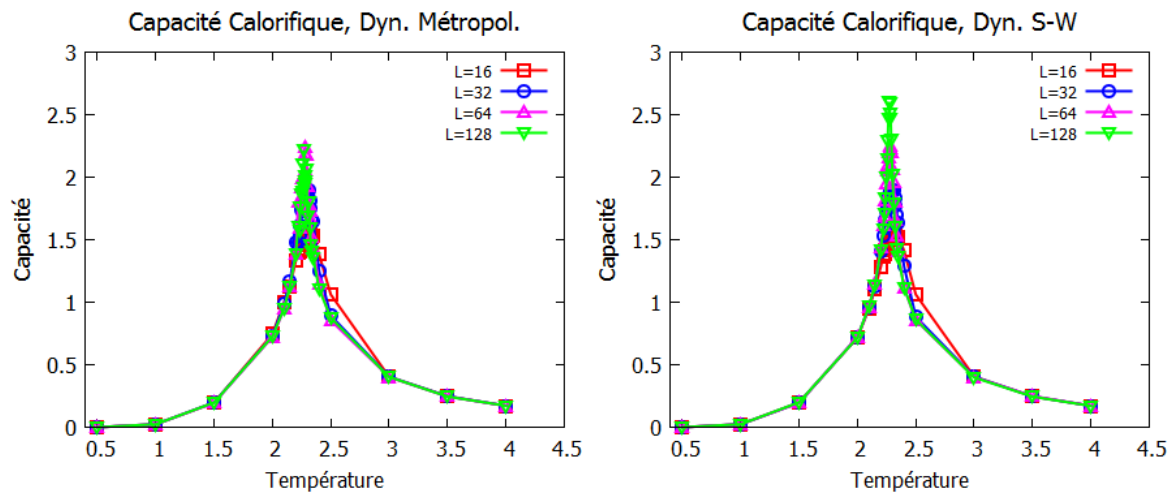


Figure IV. 02 : Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16, 32, 64$ et 128 mesurée par les deux dynamique de Métropolis et des clusters de Swendsen-Wang .

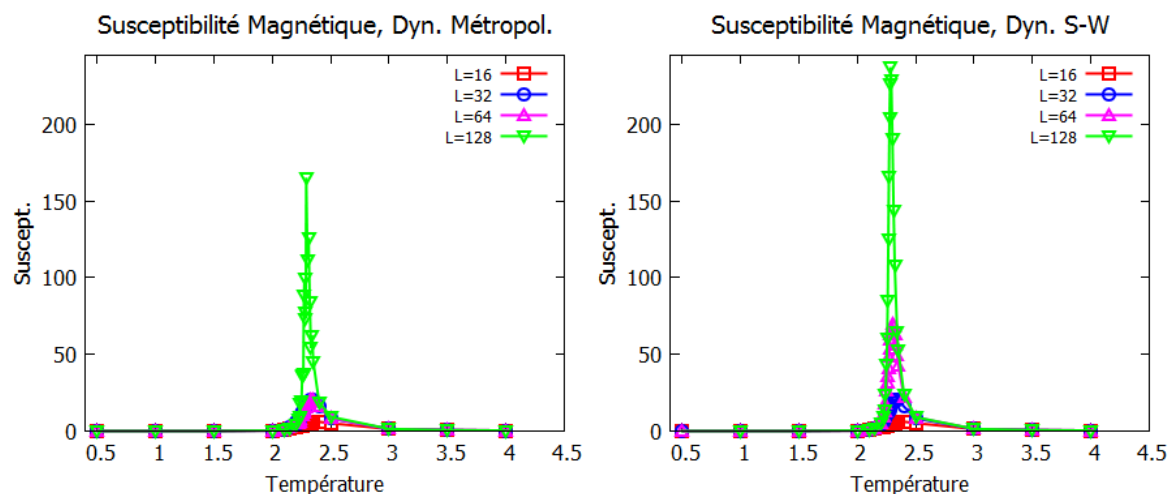


Figure IV. 03: Susceptibilité magnétique en fonction de la température pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$ mesurée par les deux dynamique de Métropolis et des clusters de Swendsen-Wang .

Les mesures par les deux dynamiques sur la capacité et la susceptibilité indiquent que les résultats diffèrent, dans le cas des systèmes de petites tailles, la dynamique de Métropolis donne des valeurs supérieures à celles obtenues par la dynamique des clusters, mais dans le cas des systèmes de tailles larges, la situation s'inverse, c'est la dynamique des clusters qui fournit des valeurs les plus supérieures .

CONCLUSION

Nous avons étudié , dans ce mémoire, le modèle d'Ising bidimensionnel par les techniques des simulations de MC via les dynamiques de Métropolis et celui des clusters de Swendsen-Wang , où nous avons comparés les résultats de mesures par les deux dynamiques sur l'aimantation absolue , la capacité calorifique et la susceptibilité magnétique .

Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d=2$) avec des conditions périodiques aux bords et pour des phases initiales différentes pour le système , haut spin (HS) et bas spin (BS) . Les mesures de ces quantités montrent que la phase initiale du système n'a pas un grand effet sur le résultat de mesure .

Les résultats de simulations montrent que la capacité calorifique et la susceptibilité magnétique divergent aux alentours de la température de transition de phase , plus le système est large plus la divergence est rapide aux alentours de cette température qui est très proche de celle d'Onsager , qui correspond à un système de taille infinie . Si les deux dynamiques donnent des résultats de mesure qui ne sont pas assez différents dans le cas des systèmes de petite taille , cette différence est remarquable dans celui des systèmes de large taille .

REFERENCES

1. **Zarguoug, Ismaïl (2015).**
Modèle d'Ising dilué [Manuscrit]. p. 20.
(Manuscrit de travail – Université d'Alger, Alger).
2. **Ferval, Julie (Juin 2018).**
Le modèle d'Ising [Rapport].
(Rapport de recherche – Département de Physique, Université de Tizi-Ouzou, Algérie).
3. **Gabriel, C.H., Jérôme, B. & Jean-Marcel, R. (2^e éd.).**
Fondements statistiques des matériaux [Ouvrage théorique].
(Paris : Dunod, France).
4. **Tremblay, A. (2020).**
Physique statistique [Manuel universitaire]. Université de Sherbrooke.
(Sherbrooke, Québec, Canada : Université de Sherbrooke).
5. **Dib, H.T. (2006).**
Physique statistique [Ouvrage].
(Alger, Algérie : Éditions Ellipses).
6. **Jebina, G., Ovando, J. & Morales, J. (2015).**
Écart tridimensionnel + potentiels déformés de Helleras : solutions d'état liées [Article de conférence].
Journal of Physics: Conference Series, 574, 012089. doi:10.1088/1742-6596/574/1/012089.
7. **Dib, Hong T. (2006).**
Éléments de physique statistique (corrigés) [Support de cours].
(Support de cours – Département de Physique, Université d'Alger).
8. **De Los Rios, B. (2008).**
Physique statistique III [Livre].
(Paris : Dunod, France).
9. **Vincent Bouthier (2^e éd.).**
Introduction aux phénomènes critiques : Notes de cours DEA [Notes de cours].
Paris: Presses Universitaires de France, 2010, 135 pages. ISBN:978-2-1234-5678-9.
10. **Vandewalle, Nicolas & Dorbolo, Stéphane (2006).**
Introduction à la physique statistique [Manuel universitaire]. Université de Liège.
(Liège, Belgique : Université de Liège).
11. **Gold, Harvey & Jan Topushnik (2015).**
Les systèmes magnétiques : physique thermique et statistique [Ouvrage scientifique].
12. **Heidelberg (2000).**
Introduction à la physique statistique [Livre].
(New York, États-Unis : Springer).
13. **Wajnflasz, J. (1970).**
Physique statistique. In Solid State Physics (Vol. 40, p. 537) [Article scientifique].
(New York, États-Unis : Academic Press).

ملخص:

بواسطة محاكاة مونت كارلو درسنا نموذج ايزينغ ثنائي الابعاد وذلك عبر ديناميكيات مترو بوليس و مجموعات سواندسينغ وانغ حيث قمنا بقياس المغنطة المطلقة للنظام و السعة الحرارية والقابلية المغناطيسية

الكلمات المفتاحية: نموذج ايزينغ ، محاكاة مونت كارلو ، خوارزمية متروبوليس ، خوارزمية

Swendsen-Wang

Résumé:

Par les simulations Monte Carlo nous avons étudié le modèle d'Ising en 2-D via la dynamique de Métropolis et des clusters de Swendsen-Wang, où nous avons mesuré l'aimantation absolue du système et la capacité calorifique et la susceptibilité magnétique.

Mots clés : Modèle d'Ising , Simulations Monte-Carlo , Algorithme de Metropolis , Algorithme de Swendsen-Wang .

Abstract:

Through Monte Carlo simulations we studied the 2-D Ising model via the dynamics of Métropolis and Swendsen-Wang clusters ,where we measured the absolute magnetization of the système and the heat capacity and magnetic susceptibility .

Keywords : Isng Model , Monte-Carlo simulations , Metropolis algorithm , Swendsen-Wang algorithm .