

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

FACULTE des Sciences
DEPARTEMENT de Physique
N° : PhTh09 /2019



DOMAINE : Sciences de la matière
FILIERE : Physique
OPTION : Physique Théorique

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: REFAFSA SOURIA

SAADI RYM

Intitulé

**SUSCEPTIBILITE MAGNETIQUE D'UN SYSTEME
D'ISING FERROMAGNETIQUE EN 2D: ETUDE
PAR LA DYNAMIQUE DES CLUSTERS DE
MONTE CARLO**

Soutenu le 01/07/2019 devant le jury composé de:

H. Latelli	Université de M'sila	Président
A. Metatla	Université de M'sila	Rapporteur
S. Kalli	Université de M'sila	Examinatrice
A. GHomeid	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2018/2019

Dédicaces

Je tiens à dédier cet humble travail à :

Mes parents :

Ma mère, qui a œuvré pour ma réussite, de par son amour, son soutien, tous les sacrifices consentis et ses précieux conseils, pour toute son assistance et sa présence dans ma vie

Mon père, que Dieu ait pitié de lui, lui pardonne, j'espère qu'il sera satisfait de ce que j'ai atteint

Mes frères et sœurs qui n'ont cessé d'être pour moi des exemples de persévérance, de courage et de générosité et à toute la famille Refafsa.

Mes enseignants du département de physique et mes amies.

Souria

Dédicaces

Je dédie ce modeste travail à:

Pour le printemps tendresse qui coule, qui est resté sur mon éducation et m'a appris que la vie est une lutte pour une grande portée, à laquelle je regardai ma joie et crié à mon succès au premier mot prononcé par les lèvres que Dieu sauvé ma mère bien-aimée

Pour qui a brûlé pour moi d'ouvrir le chemin de la vie et qui insufflent le véritable amour du travail et de la patience et la force et la volonté, mon cher père que Dieu le protège

À tous les membres de ma famille, mes frères et sœurs

Pour ceux qui ont été crédités dans l'écriture de cette recherche

Pour ceux qui me connaissent et me aimé.

Rym

Remerciements

Au nom d'Allah, le Tout Miséricordieux, le Très Miséricordieux

Nous remercions en premier Dieu d'avoir terminé cette recherche.

Nous voudrions exprimer nos remerciements à **Mr A. Metatla** pour ses efforts, ainsi que pour son soutien moral et sa confiance lors de la réalisation de ce modeste travail.

Nous voudrions aussi remercier, le jury d'avoir assisté et observé à ce travail et à ne pas oublier les professeurs qui se sont consacrés à présenter les meilleurs au cours de leur carrière universitaire.

Dans ce dernier cas, on dit que les amies sont la famille que nous choisissons nous-mêmes.

Donc nos deux familles, nos amies, merci pour votre encouragements et votre soutien, ainsi qu'à tous ceux qui ont contribué à ce travail.

Table des matières

Introduction.....	06
Chapitre 01 : modèle d'Ising à une et deux dimensions.....	07
1-Définition.....	08
2- Modèle d'Ising	08
2-1- Modèle d'Ising à une dimension, cas général ($h \neq 0$ et $j \neq 0$).....	09
2-1-1- Fonction de partition exacte.....	09
2-1-2- Energie libre.....	11
2-1-3- Aimantation.....	11
2-1-4- Susceptibilité magnétique.....	11
2-1-5- Energie moyenne.....	12
2-2- Modèle d'Ising à deux dimensions.....	12
2-2-1- Fonction de partition exacte.....	13
2-2-2- Energie libre.....	13
2-2-3- Aimantation.....	13
2-2-4- Susceptibilité magnétique.....	13
2-2-5- Energie moyenne.....	14
3- Approximation du champ moyen et solutions à d-dimensions.....	14
3-1- Fonction de partition.....	15
3-2- Energie libre	15
3-3- Aimantation.....	15
3-4- Solution graphique de l'équation auto-cohérente.....	16
3-5- Susceptibilité.....	16
3-6- Energie moyenne.....	17
Chapitre 02: Simulations monte Carlo et Algorithme de Metropolis.....	19
1-Définition.....	20
2-Principe.....	20
3-Calcul des valeurs moyennes.....	20
4-Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps.....	22
5- Importance échantillonnage et bilan détaillé.....	23
6- Algorithme de Métropolis pour le modèle d'ising.....	25
7- Mesure des observables physiques.....	26
Chapitre 03: Simulations monte Carlo et Algorithme des clusters de Swendsen- Wang.....	27
1- Algorithmes des Clusters pour le modèle d'Ising.....	28
2- Algorithme de Swendsen-Wang.....	28
Chapitre 04: Résultats et discussions.....	31
4-1- Présentation des résultats.....	32
4-2- Discussion	32
Conclusion	36
Référence Bibliographiques.....	37

Liste des figures

Figure 1.1: Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches hautes (bleues) et basses (rouges) représentent des spins positifs et négatifs respectivement.....	08
Figure 1.2 : Représentation graphique d'une chaîne du modèle d'Ising.....	09
Figure 1.3 : Chaîne Fermée.....	10
Figure 1.4 : Représentation graphique d'un système d'Ising sur un réseau carré. Les spins sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction J (traits noirs).....	12
Figure 1.5 : Résolution graphique de l'équation autocohérente.....	16
Figure 4.1 : Aimantation absolue par site calculée par la dynamique de Métropolis...	33
Figure 4.2 : Aimantation absolue par site calculée par la dynamique de Swendsen-Wang.....	33
Figure 4.3 : Susceptibilité magnétique calculée par la dynamique de Métropolis.....	34
Figure 4.4 : Susceptibilité magnétique calculée par la dynamique de Swendsen-Wang.....	34
Figure 4.5 : Configuration finale de spins pour réseaux de différentes tailles et phase initiale à quelques températures obtenue par la dynamique de Métropolis.....	35
Figure 4.6 : Configuration finale de spins et de liaisons pour un réseau taille $L=16$ en phase initiale (HS) à quelques températures obtenue par la dynamique de Swendsen-Wang.....	35

Introduction

Le modèle d'Ising fut introduit dans les années 1920 par Wilhelm Lenz et son étudiant Ernest Ising pour l'étude des transitions de phase des matériaux ferromagnétiques à la température de Curie. Le problème était de trouver une explication au phénomène de l'aimantation spontanée observé dans les matériaux ferromagnétiques avec un modèle de chaîne ferromagnétique.

Si à 1-dimension il n'existe pas une transition de phase, en 1944 Lars Onsager confirme l'existence de transition de phase en 2-dimensions. Les solutions exactes (analytiques) du modèle d'Ising n'existent que pour une chaîne (1D) et en 2D 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 conçue pour effectuer le calcul sur des grandeurs thermodynamiques. Ces techniques de simulations permettent aussi de tester la validité des approximations théoriques. La méthode MC est très utilisée aussi 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 algorithme utilisé dans les simulations MC est celui de Metropolis avec une large variété dans le choix de la probabilité d'acceptance. Depuis 1987 la méthode MC est dotée 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.

Dans ce mémoire, qui vise à étudier la susceptibilité magnétique d'un système d'Ising en 2D par la méthode MC via la dynamique des clusters de Swendsen-Wang, le premier chapitre est consacré à l'approche théorique du modèle d'Ising en (1D et 2D) dans le cadre de l'ensemble canonique, le deuxième et troisième chapitres sont un rappel sur les techniques des simulations par la méthode MC via l'algorithme de Metropolis et des clusters de Swendsen-Wang, les résultats des simulations et leurs discussions pour seront présentés dans le quatrième et dernier chapitre, nous terminerons ce mémoire par une conclusion.

Chapitre 01

MODELE D'ISING A UNE ET DEUX DIMENSIONS

Chapitre 01

MODELE D'ISING A UNE ET DEUX DIMENSIONS

1- Définition :

Le modèle d'Ising dénommé d'après le physicien Ernest Ising est parmi les modèles exactement solubles en physique statistique à une dimension et à deux dimensions (solution d'Onsager 1944). A trois dimensions il n'existe que des solutions approchées. Il s'agit d'un modèle de N spins classiques disposés sur un réseau, ce modèle très simple est défini de la façon suivante : on considère un réseau régulier dont les sites de spins sont numérotés d'une certaine façon et chaque site de spin (i) est associé à lui une variable de spin σ_i qui peut prendre deux valeurs ± 1 , ces variables sont couplées entre elles avec une interaction J et peuvent être soumis à un champ magnétique extérieur h .

En physique statistique on étudie des systèmes à très grand nombre N de particules, tant que N est grand cette étude est difficile. Paradoxalement le cas limite $N \rightarrow \infty$ redevient un cas relativement simple, et cela grâce aux méthodes statistiques (calcul des probabilités où la loi des grands nombres donne une limite universelle aux distributions de probabilités: la loi gaussienne) aussi se sert-on en physique statistique du concept de la limite thermodynamique qui n'est rien d'autre que la limite d'un système infini. Bien sur les systèmes physique que l'on étudie ne sont pas infini néanmoins le nombre de particules d'un système macroscopique ($N \approx 10^{23}$) est suffisamment grand pour que ses propriétés soient très proche de celles déduites théoriquement de la limite thermodynamique

2- Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est défini sur un réseau régulier dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs ± 1 , représentant un spin up ou un spin down (**Figure 1.1**). L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i$$

Où $\langle ij \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins, J est le paramètre d'interaction et h est le champ magnétique extérieur.

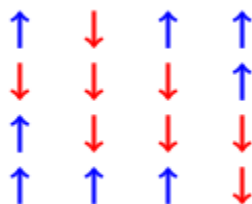


Figure 1.1: Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches hautes (bleues) et basses (rouges) représentent des spins positifs et négatifs respectivement.

2-1- Modèle d'Ising à une dimension, cas général ($h \neq 0$ et $J \neq 0$)

C'est le cas le plus simple du modèle. La fonction de partition est calculée avec exactitude par la méthode de la matrice de transfert. On considère un réseau régulier (une chaîne) dont chaque site est défini par une variable scalaire de spin $\sigma_i = \pm 1$.



Figure 1.2 : Représentation graphique d'une chaîne du modèle d'Ising.

L'Hamiltonien d'une chaîne de N spins en présence d'un champ magnétique extérieur h s'écrit comme suit :

$$H(\{\sigma_i\}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

Où J est l'interaction entre les spins de sites plus proches voisins, h est le champ magnétique extérieur, $\sum_i \sigma_i = M$ étant la magnétisation, c'est la somme sur tous les sites.

On constate que l'Hamiltonien comporte deux termes : terme qui représente l'interaction entre spins les plus proches voisins :

$$H_1 = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (1.2)$$

Le deuxième terme :

$$H_2 = -h \sum_i \sigma_i \quad (1.3)$$

Représente l'interaction des spins avec le champ magnétique extérieur. On peut écrire ce dernier terme comme suit :

$$H_2 = -(h/2) \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.4)$$

Alors l'Hamiltonien devient :

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.5)$$

2-1-1- Fonction de partition exacte

Calculons maintenant la fonction de partition pour un système linéaire d'Ising de N spins, N étant un très grand nombre, ceci afin de se placer dans la limite thermodynamique avec les conditions périodiques $\sigma_i = \sigma_{i+N} \forall_i$ (Figure 1.3).

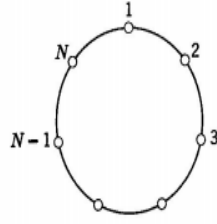


Figure 1.3 : Chaîne Fermée

Dans la fonction de partition pour N spins, puisque chaque spin indicé (i) ne peut par hypothèse prendre que deux valeurs, +1 et -1, le système comporte donc 2^N états différents. Donc la fonction de partition par définition est :

$$Z = \sum_{\sigma_{i=\pm 1}} e^{-\beta H} \quad (1.6)$$

Où $\beta = 1/(k_B T)$ est la constante de Boltzmann. On injectant H donné par l'équation (1.5) dans cette fonction on obtient :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_i} \dots \sum_{\sigma_N} \exp \left\{ \beta \sum_i^N J \sigma_i \sigma_{i+1} + h \sigma_i \right\} = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp \left(\beta \sum_i^N \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right) \\ &= \sum_{\sigma_i=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left\{ \beta \left[J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right] \right\} \end{aligned}$$

On récrire Z en fonction de produit de matrice :

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) = Tr(T^N) \quad (1.7)$$

tel que La matrice T est donné par :

$$T(\sigma_1, \sigma_2) = \exp \left(\beta \left[J \sigma_1 \sigma_2 + \frac{h}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) \right] \right) \quad (1.8)$$

Ces éléments est :

$$\begin{aligned} \langle 1 | T | 1 \rangle &= e^{\beta(J+h)} \\ \langle -1 | T | -1 \rangle &= e^{\beta(J-h)} \\ \langle -1 | T | 1 \rangle &= \langle 1 | T | -1 \rangle = e^{-\beta J} \end{aligned}$$

T est appelée la matrice de transfert qui est de dimension 2×2 , s'écrit comme suit :

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} \end{pmatrix}$$

La matrice T est diagonalisable et les valeurs propres λ_+ et λ_- sont les racines du déterminant suivant :

$$\det(T - \lambda I) = 0 \quad (1.9)$$

Où I est la matrice unité et :

$$T - \lambda I = \begin{pmatrix} e^{\beta(J+h)} - \lambda & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta(J-h)} - \lambda \end{pmatrix}$$

On compare L'équation (1.7) avec la définition de la trace suivante :

$$Tr(AB) = \sum_{i=1}^n (AB)_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_{ij} B_{ji} = \sum_{j=1}^m (BA)_{jj} = Tr(BA) \quad (1.10)$$

Et après la diagonalisation de T la fonction Z devient :

$$Z = Tr(T^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.11)$$

La solution de l'équation de diagonalisation (1.9) donne :

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta J} \left[\cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}} \right] \quad (1.12)$$

On a alors

$$Z = \lambda_-^N + \lambda_+^N$$

Enfin on obtient :

$$Z = e^{N\beta J} \left\{ \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}} \right]^N + \left[\cosh(\beta h) - \sqrt{\sinh^2 \beta h + e^{-4\beta J}} \right]^N \right\} \quad (1.13)$$

2-1-2- Energie libre

L'énergie libre associée au modèle d'Ising appelé aussi potentiel thermodynamique dans l'ensemble canonique, est définie par :

$$F(T) = -K_B T \ln Z(T) \quad (1.14)$$

Avec

$$Z = (\lambda_+^N + \lambda_-^N) = \lambda_+^N \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right)$$

On note que $\lambda_+ > \lambda_-$, à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) on a :

$$Z \cong \lambda_+^N \quad (1.15)$$

Car $(\lambda_-/\lambda_+)^N \rightarrow 0$, donc :

$$F = -N K_B T \left\{ \beta J + \ln \left[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right] \right\} \quad (1.16)$$

2-1-3 - Aimantation

L'aimantation par site est donné par :

$$m = \langle \sigma_i \rangle = - \frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h}$$

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} \quad (1.17)$$

Pour $\beta = 0$ il n'y a pas d'aimantation spontanée. Cela signifie qu'il n'y a pas de transition de phase à 1D.

2-1-4- Susceptibilité magnétique

La susceptibilité est définit par :

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h} \right)_{h=0} = - \frac{1}{N} \left(\frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \right)_{h=0}$$

Donc on a :

$$\chi = \left[\frac{(\beta \cosh(\beta h)) \sqrt{\sin^2 h(\beta h) + e^{-4\beta J}} - \frac{2\beta \sin^2 h(\beta h \cosh(\beta h))}{2\sqrt{\sin^2 h(\beta h) + e^{-4\beta J}}}}{\sin^2 h(\beta h) + e^{-4\beta J}} \right]_{h=0}$$

Enfin on obtient :

$$\chi = \frac{\beta e^{-2\beta J}}{e^{-4\beta J}} = \beta e^{2\beta J} \quad (1.19)$$

Qui reste finie à toute température non nulle.

2-1-5- Energie moyenne

L'énergie moyenne est définie de la façon suivante :

$$E = \sum_s E_s P_s = \sum_s \frac{E_s e^{-\beta E_s}}{Z} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.20)$$

Où P_s étant la probabilité canonique de l'état microscopique s

$$E = -N \left[J + \frac{h \sinh(\beta h)}{\sqrt{\sin^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} - \frac{2J e^{-4\beta J}}{\sqrt{\sin^2(\beta h) + e^{-4\beta J}} (\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta J}})} \right] \quad (1.21)$$

2-2- Modèle d'Ising à deux dimensions

La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel a été donnée pour la première fois par Lars Onsager. Ce système comporte bien à 2D une transition de phase de second ordre, elle se manifeste par un comportement singulier des fonctions thermodynamiques ou leurs dérivées

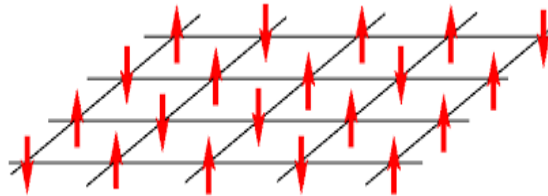


Figure 1. 4 : Représentation graphique d'un système d'Ising sur un réseau carré. Les spins sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction J (traits noirs).

Considérons un réseau carré régulier (Figure 1.3). Il est géré par l'Hamiltonien :

$$H = -j \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.22)$$

Chaque spin possède deux valeurs $\sigma_i = \pm 1$, on aura donc 2^N états pour un réseau de N spins.

2-2-1- Fonction de partition exacte

Onsager a démontré quand $h = 0$, la fonction de partition à deux dimensions est donnée par :

$$Z = \sum_{\sigma_{i=\pm 1}} e^{-\beta H} = Tr(T^N)$$

Et elle prendre la forme simple :

$$Z = [2 \cosh(2J\beta) e^I]^N \quad (1.23)$$

Où I est une intégrale elliptique qui a la forme :

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

Avec $\chi = 2 \sin \left(\frac{2j}{k_B T} \right) / \cosh^2 \left(\frac{2j}{k_B T} \right)$.

χ est une fonction de T qui s'annule pour $T = 0$ et $T = \infty$. Pour J et T positives χ est aussi positive et continue, le paramètre χ présente un maximum à $T = T_c$ (il suffit de dériver χ en fonction de T pour observer $sh(T_c) = 1$) et Donc $\chi(T_c) = 1$

2-2-2- Energie libre

L'énergie libre exacte d'Onsager est donnée par :

$$F(T) = -K_B T \ln Z$$

$$F = -N K_B T \ln [2 \cosh(2\beta J)] - \frac{N K_B T}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - x^2 \sin^2 \varphi}) \right] \quad (1.24)$$

2-2-3- Aimantation

La magnétisation exacte du modèle d'Ising bidimensionnels est un paramètre d'ordre de la transition de phase, elle est donnée par :

$$m = [1 - \sin(2\beta J)^{-4}]^{\frac{1}{8}} \quad (1.25)$$

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

$$\tanh \left(\frac{2J}{k_B T} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \frac{k_B T_c}{J} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.269185 \quad (1.26)$$

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

2-2-4- Susceptibilité magnétique

Selon la solution exacte d'Onsager on a :

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial h}$$

On peut aussi obtenir la susceptibilité à partir des fluctuations de l'aimantation :

$$\chi = \frac{1}{kT} \int d^3 r \left[\langle m(r) m(0) \rangle - \langle m(0) \rangle^2 \right]$$

Par comparaison avec la définition de la fonction de corrélation donne, $m(r)$ est la densité de paramètre d'ordre.

2-2-5- Energie moyenne

Elle est donnée par :

$$E = - \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$$

$$E = -2NJ \tanh(2J\beta) - 2NJ \frac{(\sinh^2(2J\beta) - 1) \left[\frac{2}{\pi} g(x) - 1 \right]}{\sinh(4J\beta)} \quad (1.27)$$

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

$$g(x) = \ln \frac{4}{\sqrt{1-x^2}} + \dots$$

3- Approximation du champ moyen et solutions à d-dimensions

L'approximation la plus simple pour traiter un système de spin en interaction est celle de champ moyen, quiconside à remplacer chacun des voisins des spins par une valeur moyenne. Ici la dimension de l'espace n'intervient pas seul le nombre de coordinations (q) qui est le nombre de particules en interaction compte. il augmente avec la dimension d , on comprend pourquoi les calculs en champ moyen seront d'autant meilleurs que d est grand.

Pour obtenir un Hamiltonien approché, qui le soit on part de l'identité suivante:

$$\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) + \sum_{\langle i,j \rangle} m(\sigma_i + \sigma_j) - \sum_{\langle i,j \rangle} m^2 \quad (1.28)$$

Valable quel que soit m , et on choisit $m = \langle \sigma \rangle$ est la valeur moyenne de spin qui on calculera par la suite.

Dans cette identité on évalue chaque terme isolément :

$$\sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) = \sum_i (\sigma_i - m) \left[\sum_{j(i)} (\sigma_j - m) \right] \quad (1.29)$$

Où $j(i)$ représente toutes les interactions de sites (j) plus proches voisins de (i), si la coordinence q était infinie la somme donnée par (1.29) serait nulle par définition de la moyenne (les fluctuations petites par rapport à la valeur moyenne), à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) l'approximation sera d'autant meilleur que q sera grande, si on néglige les effets de bord alors :

$$\sum_{\langle i,j \rangle} m(\sigma_i + \sigma_j) = \frac{1}{2} 2m \sum_i \sum_{i(j)} \sigma_i = m \sum_i \sigma_i \sum_{i(j)} 1 \quad (1.30)$$

La division par 2 évite le double comptage dans cette somme. Hamiltonien (1.22) devient :

$$H_i = - \sum_i (Jqm + B) \sigma_i + J \frac{q}{2} N m^2$$

3-1- Fonction de partition

La fonction de partition est donnée par (ensemble canonique) :

$$Z = \sum_{\sigma_i} e^{-\beta H}$$

On fait la somme sur tous les états de spin :

$$Z = e^{-\beta \frac{qJNm^2}{2}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} e^{\beta(Jqm+h)\sum_i \sigma_i}$$

$$Z = e^{-\beta \frac{qJNm^2}{2}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta(Jqm+h)\sigma_i} = e^{-\beta \frac{qJNm^2}{2}} \left[\sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta(Jqm+h)\sigma_i} \right]^N$$

Enfin, on a :

$$Z = e^{-\beta J \frac{qNm^2}{2}} \left[\sum_{\sigma_i=\pm 1} 2 \cosh \beta (Jqm + h) \right]^N \quad (1.31)$$

3-2- Energie libre

Elle est donnée par :

$$F(T) = -K_B T \ln Z$$

Par un calcul simple, on obtient :

$$F = \left(J \frac{q}{2} N m^2 \right) - N K_B T \ln [2 \cosh \beta (Jqm + h)] \quad (1.32)$$

3-3- Aimantation

Elle a la même définition que dans 1D et donnée comme suit :

$$m = \langle \sigma \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h}$$

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial \left\{ \left(\frac{JqNm^2}{2} \right) - N K_B T \ln [2 \cosh \beta (Jqm + h)] \right\}}{\partial h}$$

Et enfin, on a :

$$m = T \operatorname{anh} \beta (h + Jmq) \quad (1.33)$$

Equation dans le cas de spin d'Ising avec l'interaction ferromagnétique entre les premiers voisins.

Il y a aussi deux autres façons de calculer m :

a) On minimise l'énergie libre par rapport à m ce qui vient à résoudre $\frac{\partial \ln Z}{\partial m} = 0$

b) On prend la dérivée logarithmique de Z il vient : $\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = \beta \langle \sigma \rangle = \beta m$

Ces deux méthodes conduisent à l'équation auto-cohérente (1.33).

3-4- Solution graphique de l'équation auto-cohérente

Si $h \neq 0$ il Ya une seule solution qui assure le minimum de l'énergie libre.

Si $h = 0$ il Ya deux cas :

- $\beta j q > 1$: il y a deux solutions (symétriques) en plus de $m = 0$ (courbe en bleu)
- $\beta j q < 1$: La seule solution est $m = 0$ (courbe en vers).

Lorsque on dessine l'énergie libre en fonction de m on a pour $K_{\beta} T < K_B T_c = j q$, les solutions $m \neq 0$ sont les minima de $F(m)$ tandis que $m = 0$ correspondant un maximum. Donc l'équilibre, la théorie de champ moyen prévoit une magnétisation spontanée perdue à $T > T_c$, cette brisure de symétrie est étonnante, elle est bien vérifiée expérimentalement: certains substances présentent une aimantation permanente en absence du champ magnétique extérieur h .

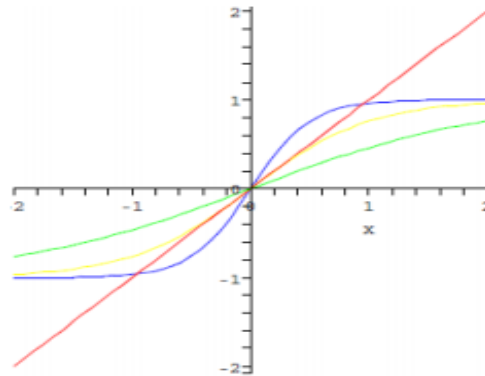


Figure 1.5 : Résolution graphique de l'équation autocohérente (1.33) avec $J = 1$

3-5- Susceptibilité

On a :

$$m = T \tanh \beta (J q m + h) \quad (1.34)$$

On considère $h = 0$, donc :

$$m = T \tanh \beta (J q m) \quad (1.35)$$

Quand β est grand T est petite, il existe 3 solutions possibles $m=0$ et $m = \pm |m|$, la solution $m > 0$ apparaît où la pente de la fonction \tanh à l'origine est supérieur à un c'est-à-dire :

$$\frac{d}{dm} (\tanh \beta (J q m))_{m=0} > 1 \quad (1.36)$$

On trouve la condition (1.36) est $\beta j q > 1$ équivalent de :

$$\beta J q = \frac{T_c}{T} \quad (1.37)$$

Ou $T_c = \frac{Jq}{k}$.

On considère l'équation (1.35) et on utilisant (1.37) :

$$m = \tanh\left(m \frac{T_c}{T}\right) \quad (1.38)$$

Quand $T \approx T_c$ $|m| \ll 1$ on porte le développement suivant

$$\tanh(x) \approx x - \frac{x^3}{3} \quad (1.39)$$

$$m = m \frac{T_c}{T} - \frac{m^3}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \Rightarrow m^2 = 3 \left(\frac{T}{T_c}\right)^3 \left(\frac{T_c}{T} - 1\right) \quad (1.40)$$

On pose $t = \frac{T - T_c}{T_c}$, t est la température réduite mesure l'approximation au point critique, quand t est petit l'équation (1.40) deviennent :

$$m^2 = 3(1+t)^3 \left(1 - \frac{1}{1+t}\right) \approx -3t \quad (1.41)$$

Alors :

$$\begin{cases} T > T_c : m = 0 \\ T < T_c : m \approx \pm (3|t|)^{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (1.42)$$

$$\chi = \left(\frac{\partial m}{\partial h}\right)_{h=0} \quad (1.43)$$

On porte le développement de l'équation (1.49) en tenant compte de h seulement

dans le premier terme de développement : $m = m \frac{T_c}{T} + \beta h - \frac{m^3}{3} \left(\frac{T_c}{T}\right)^3$ et prend la

dérivée par rapport à h :

$$\chi = \chi \frac{T_c}{T} + \beta - \chi m^2 \left(\frac{T_c}{T}\right)^3 \Rightarrow \chi = \frac{\beta}{\left[1 - \frac{T_c}{T} + m^2 \left(\frac{T_c}{T}\right)^3\right]} \quad (1.44)$$

Lorsque t est petit on utilisant l'approximation suivant pour m :

$$\begin{cases} T > T_c : \chi = \frac{\beta}{\left(1 - \frac{T_c}{T}\right)} \approx \frac{\beta}{t} \\ T < T_c : \chi = \frac{\beta}{\left[1 - \frac{T_c}{T} + 3\left(\frac{T_c}{T} - 1\right)\right]} \approx \frac{\beta}{2|t|} \end{cases} \quad (1.45)$$

3-6- Energie moyenne

L'énergie moyenne par site est donnée par :

$$e = \frac{E}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.46)$$

Un calcul simple donne :

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 + \tanh \beta (Jqm + h) + \frac{\partial m}{\partial \beta} [-\beta Jqm + \beta Jq \tanh \beta (Jqm + h)] \quad (1.47)$$

D'autre part :

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial m} = -\beta Jqm + \beta Jq \tanh \beta (Jqm + h)$$

On remplace dans l'équation (1.47), on obtient :

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 + \tanh \beta (Jqm + h) + \frac{\partial \ln Z}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial \beta}$$

L'équation auto-cohérente permet d'éliminer la tanh et

l'énergie libre ($F = -K_B T \ln Z$) étant stationnaire par rapport à m, alors le second terme s'annule donc :

$$e = -\frac{q}{2} Jm^2 \quad (1.48)$$

Chapitre 02

SIMULATIONS MONTE CARLO ET ALGORITHME DE METROPOLIS

Chapitre 02 :

SIMULATIONS MONTE CARLO ET ALGORITHME DE METROPOLIS

1- Définition

La méthode de Monte Carlo (MC), très répandue en physique de la matière condensée, a été introduite par Metropolis et al en 1953. Basée sur l'utilisation de nombres aléatoires, elle repose sur la génération d'une séquence aléatoire d'états accessibles dans un système en utilisant le processus de Markov ; qui permet de générer un état c_i du système à partir d'un autre état c_j connu. La séquence d'états générés se déroule durant un temps Monte Carlo qui n'a aucun rapport avec le temps réel du système. L'état généré n'est pas toujours le même, il parcourt le système à la recherche de nouveaux états avec une probabilité de transition $P(c_i \rightarrow c_j)$. Les simulations MC sans doute ce sont les techniques numériques les plus importantes dans la physique statistique. Les méthodes de simulations de MC sont liées aux méthodes d'intégration élémentaires

2- Principe

Pour illustrer le principe de la simulation Monte Carlo, on considère, quand cela est nécessaire, le modèle de spins d'Ising avec l'interaction ferromagnétique J entre premiers voisins, mais cette hypothèse ne fait pas perdre le caractère général de la méthode.

Dans une simulation de ce modèle on veut calculer les valeurs moyennes des grandeurs physiques telles que l'énergie moyenne $\langle E \rangle$, la capacité calorifique C_v , l'aimantation M et la susceptibilité χ . La valeur moyenne d'une grandeur A est défini par :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(T)} \sum_s A(s) e^{-\beta E(s)} \quad (2.1)$$

Où $Z(T)$ est la fonction de partition à la température T , $E(s)$ et $A(s)$ sont l'énergie du système et la valeur de A dans l'état microscopique s .

On principe, on doit sommer sur tous les états microscopiques, c'est-à-dire sur toutes les configurations de spins. Dans le cas des spins d'Ising, le nombre des configurations de spin est 2^N où N est le nombre total de spins. Cette somme est impossible numériquement à effectuer quand N est grand.

3- Calcul des valeurs moyennes

Comme une simple illustration des avantages de échantillonnage non-uniforme de Monte Carlo, prenons une intégrante similaire à une valeur moyenne thermique en physique statistique (la discussion ici peut être directement généralisée à des intégrales multidimensionnelles) :

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L P(x) A(x) dx \quad (2.2)$$

$$\int_{-L}^L P(x) dx = 1 \quad (2.3)$$

Où $P(x)$ est une distribution de probabilité quelconque. Par échantillonnage aléatoire de M points x_1, \dots, x_M dans l'intervalle, la valeur moyenne est estimée à

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M P(x_i) A(x_i) \quad (2.4)$$

Si $P(x)$ est fortement culminé dans une petite région, les fluctuations statistiques de cette estimation seront grandes que seule une petite fraction des points générés tombera dans la région dominante. Si nous prélevons la place des points selon certains $w(x)$ de distribution de probabilité, à savoir la probabilité de choisir un point dans un intervalle infiniment petit $[x, x + dx]$, l'estimation de la valeur moyenne est

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{P(x_i)}{W(x_i)} A(x_i) \quad (2.5)$$

Les fluctuations statistiques ici sont moins que l'estimation (2.4) de l'échantillonnage uniforme si $w(x)$ est culminé dans la même région que $P(x)$ et si la fonction $A(x)$ est régulière.

Il est impossible dans la pratique pour trouver le $w(x)$ optimale qui minimise les fluctuations, mais si $P(x)$ a beaucoup plus de variations que $A(x)$ une très bonne solution est d'utiliser $w(x) = P(x)$. La valeur moyenne est alors juste simple moyenne arithmétique de $A(x)$ par rapport à la configuration échantillonné

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i) \quad (2.6)$$

En physique statistique, P est une fonction exponentielle fortement culminé $\exp(-E/k_B T)$ de l'énergie et A est typiquement une fonction polynomiale linéaire ou d'ordre inférieur des degrés de liberté du système. Les fluctuations de P sont donc très importantes par rapport à ceux de A et dans l'échantillonnage en utilisant P comme la distribution de probabilité est alors proche de l'optimum. Ceci est ce que l'on entend généralement par l'échantillonnage de l'importance à long terme. La simulation numérique est très utilisée pour étudier les phénomènes critiques et les transitions de phase.

Dans notre travail, on s'intéresse à des simulations de Monte Carlo du modèle d'Ising (il appartient aux modèles avec des degrés de liberté discrets sur un réseau, qui sont des bons exemples à simuler).

4 - Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps

Nous examinons brièvement ici le formalisme mathématique utilisé pour évaluer les valeurs moyennes thermiques dans la physique classique à plusieurs corps dans les systèmes de spins à plusieurs particules.

Pour un système de N particules, avec des coordonnées de position x_i et p_i impulsions dans un espace à d -dimensions, la valeur moyenne A d'une grandeur thermique à la température T est donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^N A(\{x_i, p_i\}) e^{-H(\{x_i, p_i\})/k_B T} \quad (2.7)$$

Où Z est la fonction de partition :

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^N e^{-H(\{x_i, p_i\})/k_B T} \quad (2.8)$$

K_B est la constante de Boltzmann, et H est l'Hamiltonien du système. Pour les particules identiques de masse m dans un potentiel à une et à deux particules interaction $U(x_i)$ et $V(x_i, x_j)$ l'Hamiltonien est :

$$H(\{x_i, p_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U(x_i) + \sum_{i \neq j} V(x_i, x_j) \quad (2.9)$$

Si l'observable A est indépendante de la vitesse (i.e. une fonction que des positions(x)), les intégrales de moment s'annulent en (2.7), conduisant à

$$\langle A \rangle = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int A(\{x_i\}) e^{-H(\{x_i\})/k_B T} \quad (2.10)$$

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d e^{-H(\{x_i\})/k_B T} \quad (2.11)$$

C'est-à-dire seulement l'énergie potentielle,

$$E(\{x_i\}) = \sum_{i=1}^N U(x_i) + \sum_{i \neq j} V(x_i, x_j) \quad (2.12)$$

est pertinent pour les propriétés statiques du système. Souvent, la seule quantité dépendant de la vitesse considéré en équilibre mécanique statistique est l'énergie cinétique, qui, pour une seule particule est donnée par

$$k_i = \left\langle \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{Z_p} \quad (2.13)$$

$$k_p = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d e^{-p_i^2/2m k_B T} \quad (2.14)$$

Etant donné que toutes les intégrales sauf ceux sur p_i sont nulle. Le théorème d'équipartition est:

$$k_i = \frac{d}{2} k_B T \quad (2.15)$$

En général, il est impossible de calculer analytiquement les valeurs moyennes d'une fonction de moments de particules ou de positions, sauf dans une seule dimension. Dans une simulation de Monte Carlo, ces valeurs moyennes sont évaluées par

échantillonnage d'importance d'un nombre n_i de la configuration $\{\vec{x}_i\}$. Nous allons examiner le cas un peu plus simple (par rapport un système de particules dans l'espace continu) des modèles sur réseaux.

5- Importance échantillonnage et bilan détaillé

Nous allons ici considérer un espace discret de configurations $\{C\} = C_1 C_2, \dots, C_N$ (où N peut être fini ou infini), mais la discussion peut être directement généralisée à un continuum de configuration. Pour un système à la température T , une valeur moyenne est donnée par :

$$\langle A \rangle = \sum_i P(c_i) A(c_i) \quad (2.16)$$

$$P(c_i) = \frac{1}{Z} e^{-E(c_i)/T} \quad (2.17)$$

Où nous travaillons en unités telles que $K_B = 1$ (ie, nous mesurons les énergies en degrés Kelvin). Dans une simulation, nous commençons avec une configuration arbitraire $C_{i(0)}$ et de lui sera généré une séquence stochastique $C_{i(1)}, C_{i(2)}, \dots, C_{i(M)}$, que nous utilisons pour approcher diverses valeurs moyennes d'intérêt. Notre objectif est que la configuration sera distribuée selon P .

Nous utilisons un processus stochastique dans lequel une configuration $C_{i(k+1)}$ est obtenue à partir de configurations $C_{i(k)}$ précédents en faisant une sorte de changement aléatoire dans ce dernier. Nous considérons une séquence de configurations constituant une chaîne de Markov, à savoir, la probabilité de faire une transition de $C_{i(k)}$ à $C_{i(k+1)}$ ne dépend pas de la façon dont nous sommes arrivés à $C_{i(k)}$ (son histoire).

Nous allons discuter des conditions sur les probabilités de transition $P(C_i \rightarrow C_j)$ pour la distribution désirée $P(C_i)$ à atteindre. Il convient de noter que P peut être une distribution de probabilités, pas nécessairement la probabilité de Boltzmann qui nous intéresse ici. Au lieu de considérer une seule séquence de configurations, il est utile d'abord imaginé un ensemble d'un grand nombre de configurations.

Si cet ensemble est distribué selon P , alors le nombre $N_0(C_i)$ de configurations C_i dans l'ensemble est proportionnel à $P(C_i)$. A un moment donné (étape), nous appliquons un certain régime pour changer (mise à jour) les configurations, avec la probabilité de changer C_i à C_j noté $P(C_i \rightarrow C_j)$.

Le nombre de configurations C_i après la mise à jour toutes les configurations est

$$N_i(C_i) = N_0(C_i) + \sum_{i \neq j} [N_0(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - N_0(C_i) P(C_i \rightarrow C_j)] \quad (2.18)$$

Où les deux termes pour chaque j de la somme correspond au nombre de configurations qui ont été modifiées dans et hors de C , respectivement. Ceci est appelé l'équation de maîtresse. Si nous voulons que l'ensemble reste réparti selon P nous devons clairement avoir $i = 1, \dots, N$

$$\sum_{i \neq j} \left[N_0(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - N_0(C_i) P(C_i \rightarrow C_j) \right] = 0 \quad (2.19)$$

Ou, depuis $N_0(C_i) \propto P(C_i)$

$$\sum_{i \neq j} \left[P(C_j) p(C_j \rightarrow C_i) - P(C_i) P(C_i \rightarrow C_j) \right] = 0 \quad (2.20)$$

Cette équation peut avoir de nombreuses solutions, et en général, il serait très difficile de trouver toutes les solutions. Cependant, nous pouvons obtenir une solution notamment en satisfaisant à la condition ci-dessus terme à terme;

$$P(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - P(C_i) P(C_i \rightarrow C_j) = 0 \quad (2.21)$$

Ce qui donne un état, appelé équilibre détaillée, sur le rapport des probabilités de transition;

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{P(C_j)}{P(C_i)} \quad (2.22)$$

Dans la mécanique statistique la probabilité des configurations $P(C_i)$ est donnée par

$$P(C_i) = \frac{1}{Z} W(C_i) \quad (2.23)$$

$$W(C_i) = e^{-E(C_i)/T} \quad (2.24)$$

Où $w(C_i)$ est désigné comme étant le poids de la configuration, la fonction de partition disparaître dans le rapport sur le côté droit de ces équations. On peut aussi écrire :

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (2.25)$$

Qui est la condition de bilan détaillé.

La probabilité de transition $P(C_i \rightarrow C_j)$

Dans les exemples donnés ci-dessus peut être écrit comme un produit de deux probabilités; une pour tenter une certaine mise à jour (sélection du spin à être retourné, ou la particule d'être déplacé et le vecteur de déplacement σ) et l'autre pour exercer effectivement le changement (accepter). Nous écrivons donc

$$P(C_i \rightarrow C_j) = P^{\text{attempt}}(C_i \rightarrow C_j) P^{\text{accept}}(C_i \rightarrow C_j) \quad (2.26)$$

Il est souvent le cas, car il se trouve dans les exemples mentionnés ci-dessus, que la probabilité d'une tentative de chacune des mises à jour possibles trivialement est uniforme, à savoir, $P(C_i \rightarrow C_j) = \text{Constante}$, indépendante de i, j . Cette partie de la probabilité de transition tombe alors sur la condition de bilan détaillé (2.26) et on se retrouve avec une condition bilan détaillé pour les probabilités d'acceptation :

$$\frac{P^{accept}(C_i \rightarrow C_j)}{P^{accept}(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (2.27)$$

Cette condition peut être remplie dans un certain nombre de façons, parmi lesquels le plus couramment utilisé est la probabilité d'acceptation de Metropolis :

$$P^{select}(C_{j(k)}) = \frac{W(C_{j(k)})}{\sum_{l=1}^m W(C_{j(l)})} \quad (2.28)$$

En d'autres termes, si la nouvelle configuration de poids est plus élevée (ce qui correspond à la réduction de l'énergie du système) on admet toujours la mise à jour, alors que si elle est inférieure on admet avec une probabilité égale au rapport des nouveaux et anciens poids. Il peut être vérifié que cette probabilité d'acceptation de Métropolis satisfait la condition de bilan détaillé (2.27). Pour déterminer si ou non la mise à jour sera acceptée lorsque $P(C) < 1$, la probabilité d'acceptation peut être comparé avec un numéro (random number) $r \in [0;1]$, si $r < P^{accept}(C_i \rightarrow C_j)$ la mise à jour est acceptée, et sinon elle est rejetée. Si une mise à jour est rejetée, l'ancienne configuration c_i devrait être considérée comme la configuration suivante dans la séquence. L'ensemble de la procédure de tenter des mises à jour et d'accepter ou de les rejeter en utilisant le schéma ci-dessus prend le nom de l'algorithme de Metropolis.

Une autre probabilité d'acceptation souvent utilisé avec l'algorithme de Métropolis est :

$$P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) = \frac{W(C_j)}{W(C_i) + W(C_j)} \quad (2.29)$$

Qui est un cas particulier d'une probabilité de bain de chaleur impliquant une sélection parmi un nombre m de choisies :

$$P^{select}(C_{j(k)}) = \frac{W(C_{j(k)})}{\sum_{l=1}^m W(C_{j(l)})} \quad (2.30)$$

La configuration actuelle est $C_i = C_j[l]$ pour certains $l \in [1, \dots, m]$ et il n'y a pas explicitement un rejet de mise à jour, à savoir, l'une des options $l \in 1, \dots, m$ est toujours choisi, selon les probabilités ci-dessus.

6- Algorithme de Métropolis pour le modèle d'Ising

Dans un modèle d'Ising, une mise à jour de la configuration revient à sélectionner une rotation aléatoire et à la renverser avec probabilité $P^{accept}(C_i \rightarrow C_j)$. 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 explicitement par :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[\frac{-J}{T} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma_i' \sigma_j' - \sigma_i \sigma_j) + \frac{h}{T} \sum_i (\sigma_i' - \sigma_i) \right]$$

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

$$\chi = \frac{d \langle m \rangle}{dh} = \frac{1}{N} \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)$$

Où $\sigma [j]$ représente un voisin le plus proche de l'emplacement j (qui sont $2d$ sur un réseau cubique de dimension d). Depuis le critère acceptation/rejet on fait comparer le rapport ci-dessus avec un nombre aléatoire $0 \leq r < 1$, ces rapports peuvent être utilisés directement sans prendre le minimum de la probabilité effective (2.30). Afin d'éviter les évaluations fastidieuses répétées de fonctions exponentielles, les ratios de poids doivent être pré calculées et stockées dans une table.

7- Mesure des observables physiques

Une quantité d'intérêt 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 note M la magnétisation complète et par m la quantité normalisée :

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i ; \quad m = \frac{M}{N}$$

Comme nous avons discuté, sur un réseau fini la symétrie spin-inversion ne se décompose pas dans une simulation en cours depuis longtemps et donc $\langle m \rangle = 0$. Lorsque $T < T_c$; dans la pratique il sera alors mesurer $\langle m \rangle \neq 0$. 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.

Une autre quantité de grand intérêt est la susceptibilité magnétique, définie comme:

$$\chi = \frac{d \langle m \rangle}{dh} = \frac{1}{N} \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)$$

Chapitre 03

SIMULATIONS MONTE CARLO ET ALGORITHME DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

Chapitre 03 :

SIMULATIONS MONTE CARLO ET ALGORITHME DES CLUSTERS DE SWENDSEN-WANG

1- Algorithmes des clusters pour le modèle d'Ising

Parmi les inconvénients de la dynamique de Metropolis, le ralentissement à l'approche des points critiques et même aux points éloignés, en plus les temps de corrélation automatique peuvent être longs dans de nombreux systèmes. Ces problèmes peuvent être entièrement ou totalement éliminés à l'aide d'algorithmes de cluster, où un grand nombre de spins peut être retourné simultanément pour obtenir une évolution plus rapide 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 ($1/2$ ou 1 selon la formulation). Nous considérons ici seulement le cas du champ magnétique nul ($h = 0$).

2- Algorithme de Swendsen-Wang

La construction de l'algorithme de cluster du modèle Ising est déjà développée par Swendsen et Wang où nous fournissons un indice de corrélation b correspondant à une paire de spins en interaction $\sigma_{i(b)}\sigma_{j(b)}$; $b = 1, 2, \dots, N_b$ et que le nombre de liens est défini avec des emplacements et des conditions de limite périodiques, et que l'expression énergétique du modèle Ising s'écrit comme suit :

$$E(\sigma) = -|J| \sum_{b=1}^{N_b} [\sigma_{i(b)}\sigma_{j(b)} + 1] = \sum_{b=1}^{N_b} E_b \quad (3.1)$$

Une constante $-|J|$ a été ajoutée à l'énergie de chaque lien, pour des raisons qui seront mentionnées ultérieurement. On utilise les énergies de liaison E_b , nous pouvons écrire la fonction de partition comme

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} e^{E_b/T} = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} [1 + (e^{E_b/T} - 1)] \quad (3.2)$$

Nous définissons maintenant une fonction de liaison avec les arguments $0, 1$ correspondant aux deux termes ci-dessus :

$$\begin{aligned} F_b(0) &= 1 \\ F_b(1) &= e^{E_b/T} - 1 \end{aligned} \quad (3.3)$$

Nous avons écrit la fonction de partition comme

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} [F_b(0) + F_b(1)] \quad (3.4)$$

Nous introduisons maintenant un ensemble de variables $\tau_b = \pm 1$ de liaison auxiliaires, à utiliser comme arguments dans la fonction de liaison (3.3) pour chaque liaison b . Nous utilisons la notation $\tau = \{\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{N_b}\}$ pour désigner une configuration de liaison entière, d'une manière analogue à une configuration de spin.

Où on peut maintenant écrire Z comme somme sur des spins et des liens :

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \prod_{b=1}^{N_b} F_b(\tau_b) \quad (3.5)$$

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

$$F_b(0) = 1, \text{ indépendante de } \sigma_{i(b)}, \sigma_{j(b)} \quad (3.6)$$

$$F_b(1) = e^{E_b/T} - 1 = \begin{cases} e^{2|J|/T} - 1, & \text{si } \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \\ 0, & \text{si } \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \end{cases} \quad (3.7)$$

Pour une contribution non nulle à la fonction de partition (3.5) , la variable de liaison $\tau_b = 1$ est donc autorisé uniquement entre spins parallèles ; nous ferons référence à $\tau_b = 1$ en tant que lien rempli. Dans l'espace combiné des spins et des liaisons, le poids de configuration dans la fonction de partition (3.5) est :

$$W(\sigma, \tau) = \prod_{b=1}^{N_b} F_b(\tau_b) \quad (3.8)$$

Si nous n'avons pas d'obligations (illégales), c'est simplement :

$$W(\sigma, \tau) = \left(e^{2|J|/T} - 1 \right)^{N_1} \quad (3.9)$$

Où N_1 est le nombre d'obligations remplies. Par conséquent, la configuration de rotation n'affecte le poids qu'imposer des restrictions sur l'endroit où les obligations remplies peuvent être placées. Ce système repose essentiellement sur la constante ajoutée $-|J|$ dans chaque énergie de liaison dans l'équation (3.1) ; 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. Comme nous le verrons, la caractéristique clé du système Swendsen-Wang est que le poids est exactement nul si une liaison remplie est placée entre des spins antiparallèles. L'objectif est maintenant de construire un schéma pour générer des configurations de spin et de liaison distribuées selon la fonction de poids(3.9). Pour une configuration de spin donnée, nous définissons la probabilité d'une configuration de liaison correspondant au poids (3.9) :

$$P(\tau) = \prod_b P_b(\tau_b) \quad (3.10)$$

Où les probabilités de liens individuels sont

$$P(\tau_b) = \frac{F_b(\tau_b)}{F_b(0) + F_b(1)} \quad (3.11)$$

La probabilité d'une liaison remplie est donc

$$P(\tau_b = 1) = 1 - e^{-2|J|/T}, \quad \text{si } \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \quad (3.12)$$

$$P(\tau_b = 1) = 0, \quad \text{si } \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \quad (3.13)$$

Les simulations MC par la dynamique des clusters se fait sur des modèles percolatifs (modèles des clusters d'Ising, de Potts, ...), cette dynamique permet pour une

configuration de spins et de liaisons, de former des grappes (clusters) de spins reliés par des liaisons, par contre la dynamique de Métropolis est appropriée aux modèles dites thermiques.

Chapitre 04
RESULTATS ET DISCUSSION

Chapitre 04

RESULTATS ET DISCUSSION

Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d=2$) de taille $L=16, 32, 64,$ et 128 en trois phases initiales différentes : aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS), pour des valeurs de température sans unité ($[k_B T/J]$) dans l'intervalle $[0.5, 4]$ avec des conditions périodiques aux bords.

Nous avons utilisé dans les simulations deux algorithmes MC : de Métropolis et des clusters de Swendsen-Wang. Notons que, dans tous les calculs, avant chaque mesure, on fait équilibrer thermiquement le système.

4-1- Présentation des résultats

Nous avons calculé l'aimantation absolue moyenne par site $|m| = \langle |\sigma| \rangle$ par la dynamique de Métropolis et par la dynamique des clusters de Swenden-Wang pour des réseaux de tailles indiqués précédemment. Nous avons obtenu la susceptibilité magnétique $\chi = \frac{d \langle m \rangle}{dh} = \frac{1}{N T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2)$ 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 permis de calculer la susceptibilité à partir des fluctuations de l'aimantation entre bins.

Dans les deux dynamiques et pour toutes tailles, les simulations montrent que la susceptibilité diverge aux alentours de la température critique, dont la valeur théorique est donnée par : $T_c = 2 / \ln(1 + \sqrt{2}) \cong 2.269$.

Nous avons aussi mis en évidence la configuration finale du système pour quelques valeurs des températures.

4-2- Discussion

Nous avons mesuré la valeur absolue de l'aimantation aux différentes phases initiales pour les deux dynamiques de MC, de Métropolis et des clusters de Swendsen-Wang. Les résultats sont illustrés dans les Figures ci-dessous.

Nous remarquons que les courbes de l'aimantation montrent clairement des effets de taille : pour les réseaux de petite taille, le changement de phase apparaitre à une température supérieure à T_c théorique, et plus en augmente la taille du réseau plus la transition de phase se fait pour des températures plus proche de celle théorique, ceci s'applique sur les deux dynamiques. Nous remarquons aussi que les mesures sur l'aimantation montrent des fluctuations aux alentours du point critique (T_c) dans le cas de la dynamique de Métropolis, où les courbes sont moins lisses au voisinage de ce point.

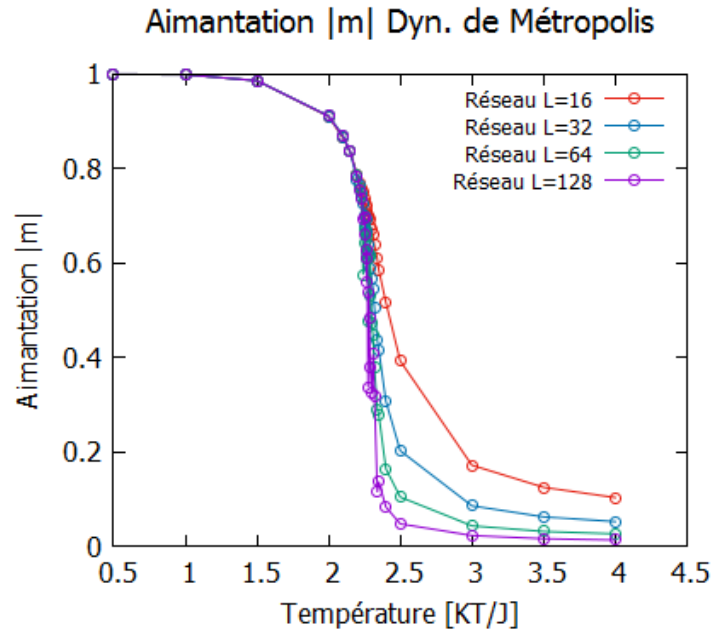


Figure 4.1 : Aimantation absolu par site calculée par la dynamique de Métropolis.

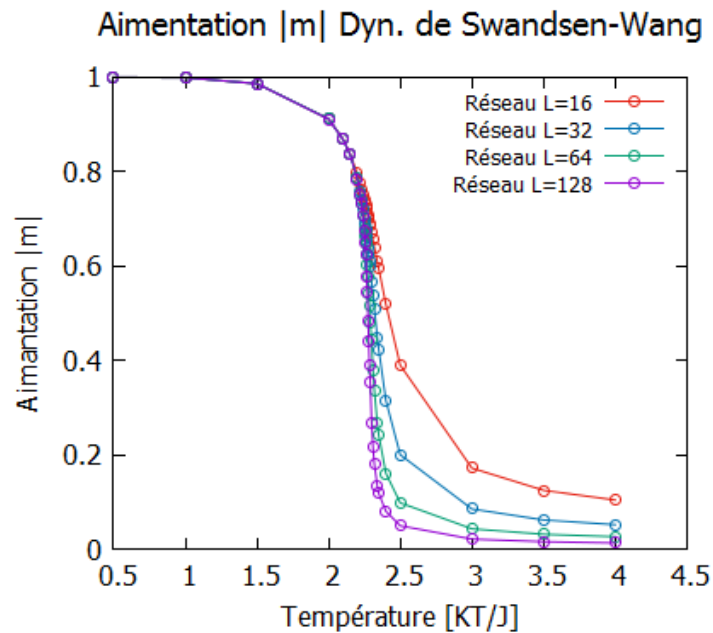


Figure 4.2 : Aimantation absolu par site calculée par la dynamique de Swandsen-Wang.

Nous avons mesuré la susceptibilité magnétique aux phases initiales : aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS) respectivement pour les valeurs de température indiqués précédemment. Les résultats sont illustrés dans les Figures ci-dessous.

Les résultats de simulations montrent que plus le système est large plus la divergence de la susceptibilité magnétique est rapide aux alentours de la température critique quel que soit la phase initiale; aléatoire, haut spin (HS) ou bas spin (BS), et plus le système est large plus la température de divergence est très proche de celle d'Onsager $T_c \cong 2.269$ qui correspond à un système de taille infinie.

Nous remarquons dans le cas de la dynamique de Métropolis, que les courbes de cette quantité montrent des fluctuations aux alentours de la température critique

par contre dans la dynamique de Swandsen-Wang les valeurs mesurés pour la susceptibilité sont moins fluctuants et la quantité est plus divergente.

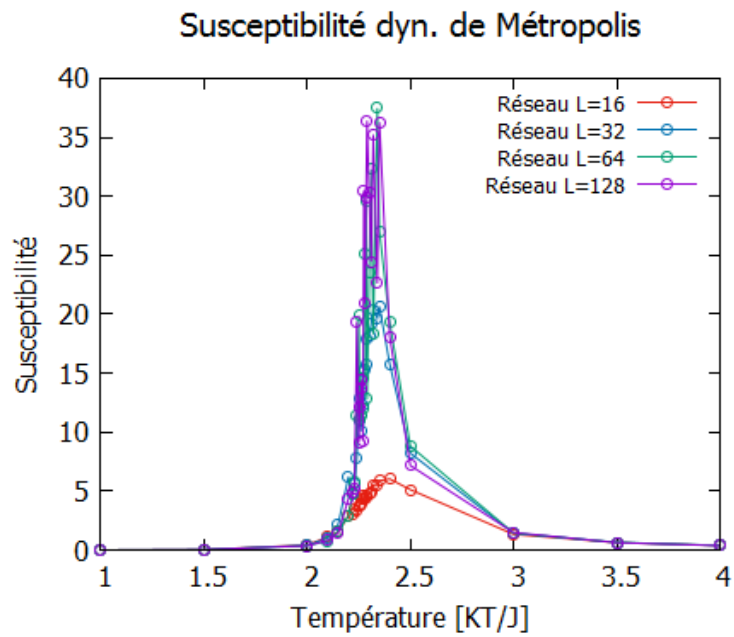


Figure 4.3 : Susceptibilité magnétique calculée par la dynamique de Métropolis.

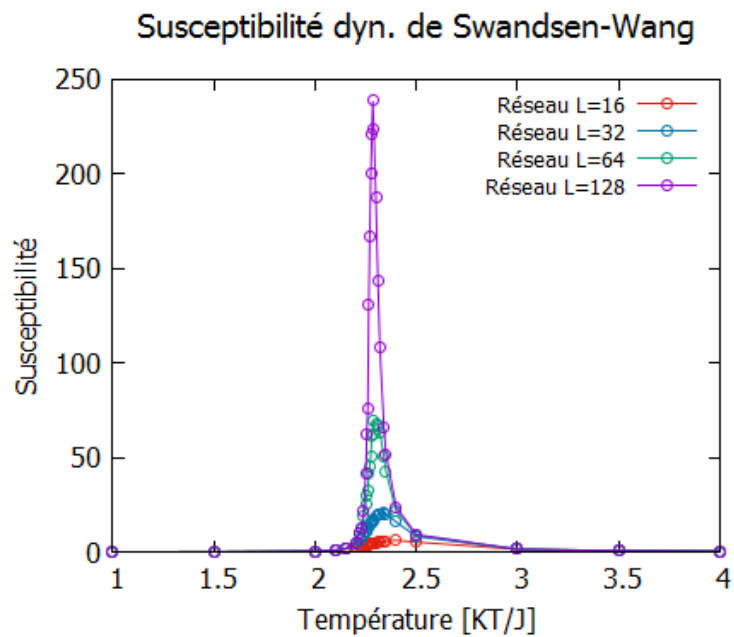


Figure 4.4 : Susceptibilité magnétique calculée par la dynamique de Swendsen-Wang.

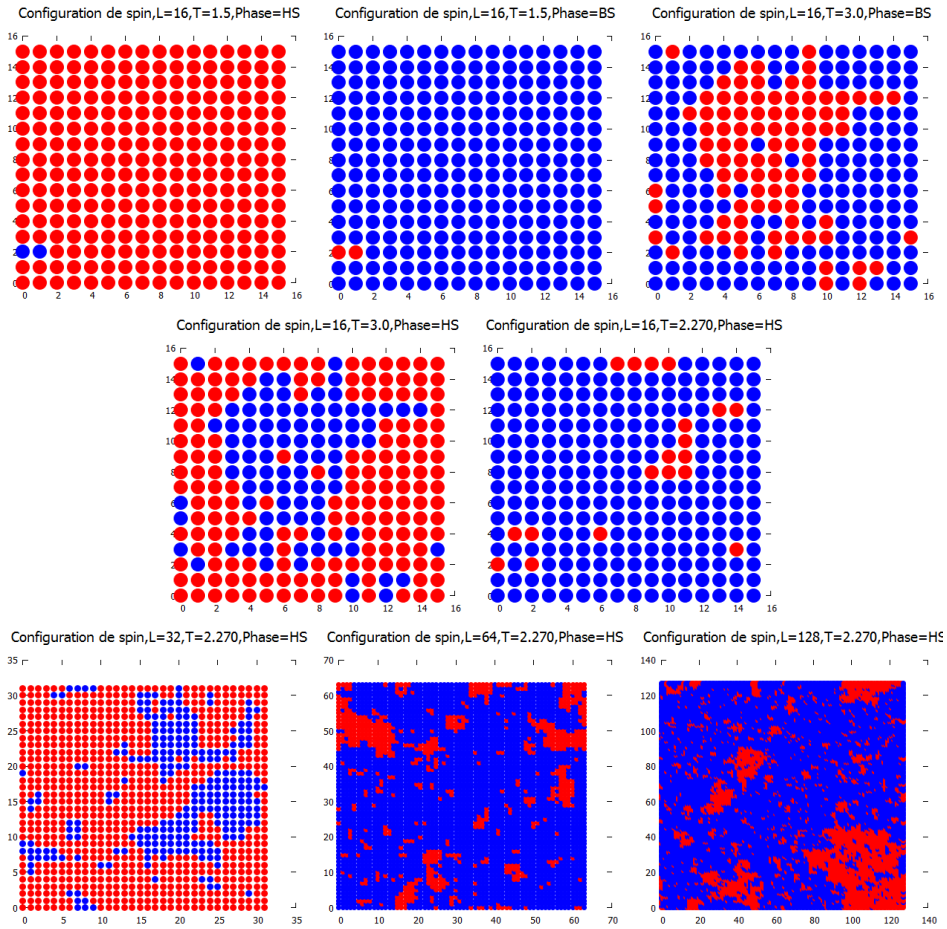


Figure 4.5 : Configuration finale de spins pour réseaux de différentes tailles et phases initiales à quelques températures obtenue par la dynamique de Métropolis, spin up(en rouge) et spin down (en bleue).

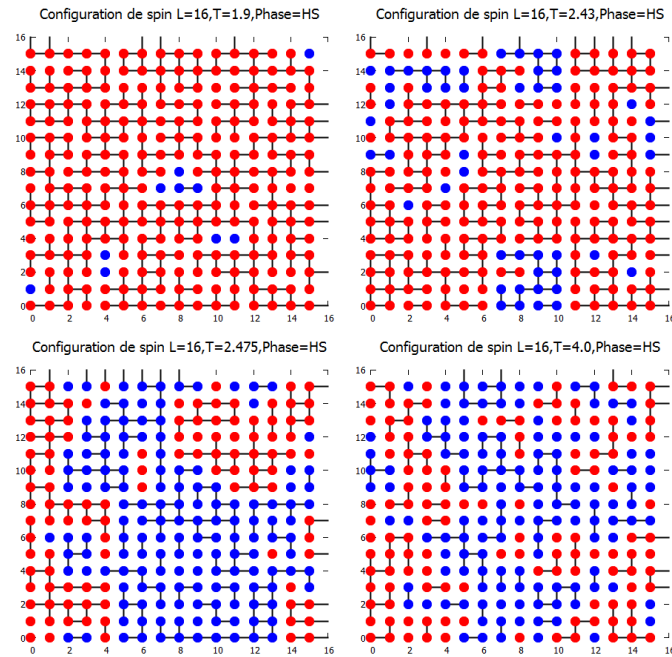


Figure 4.6 : Configuration finale de spins et de liaisons pour un réseau taille $L=16$ en phase initiale (HS) à quelques températures obtenue par la dynamique de Swendsen-Wang spin up(en rouge) et spin down (en bleue).

CONCLUSION

Nous avons étudié dans ce mémoire l'aimantation et la susceptibilité magnétique du modèle d'Ising bidimensionnel par les simulations Monte Carlo via les dynamiques de Métropolis et des clusters de Swendsen-Wang. Les simulations MC sont faites sur des réseaux carrés pour trois phases initiales différentes, aléatoire, haut spin (HS) et bas spin (BS). Les techniques de Monte Carlo sont très utilisées dans l'étude des phénomènes critiques et les transitions de phase.

Les résultats montrent que la susceptibilité magnétique, qui est une dérivée de l'aimantation (un paramètre d'ordre du système), diverge au point critique (température critique), donc les systèmes d'Ising bidimensionnels subit une transition des phases. Pratiquement les simulations sur des réseaux de différentes tailles montrent que plus le système à simulée est large plus la température de la transition de phase est plus proche de celle obtenue par Onsager (valeur théorique), c'est l'effet de taille. Ceci s'est produit dans le cas des deux dynamiques que nous avons utilisées dans les simulations.

Les simulations montrent clairement que la dynamique des clusters utilisée, par comparaison à la dynamique de Métropolis, donne des valeurs de mesures moins fluctuantes aux alentours de la température critique sur les quantités à mesurés où les autocorrélations sont minimales dans ce type de dynamique.

Références Bibliographiques

- [1]- Nicolas Vadewalle et Stéphane Dorbolo, Introduction à la physique statistique, Université de Liège, Belgique (2006).
- [2]- Y. Velnik, Le modèle d'Ising, Université de Genève (2009).
- [3]- Ishita Agawal , Numerical analysis of 2-D Ising model, University of Bonn (2011).
- [4] -Ismail Zergoug, Modèle d'Ising dilué, Thèse de Doctorat en physique, option physique médicale, Oran, (2005).
- [5]- T. Hung, Physique statistique, Paris, Ellipses Edition Marketing, (2006).
- [6] -Anders W. Sandvik, Monte Carlo simulations in classical statistical physics. Department of Physics, Boston University (2013).

Résumé

Dans ce travail, nous avons étudié la susceptibilité magnétique d'un système d'Ising ferromagnétique en 2D par la dynamique des clusters (Swendsen-Wang) de Monte Carlo. Un système d'Ising est un système de spins en interaction, dans lequel il se peut manifester le phénomène de la transition de phase. Tant que les solutions analytiques de ce modèle sont trop compliquées (2D), les simulations MC permettent de tester la validité des estimations théoriques.

ملخص

في هذا العمل ، قمنا بدراسة الحساسية المغناطيسية لنظام ايسينغ للفيرومغناطيسية في بعدين بواسطة ديناميك الفئات ل (Swendsen-Wang) لمونتي كارلو، نظام ايسينغ هو نظام يصف تفاعل سبين حيث تتجلى هذه الظاهرة في فضاء الاطوار. بما أن هذا النموذج معقد الحل التحليلي في بعدين ، فسنجد حلولاً رقمية باستخدام محاكاة مونتي كارلو التي تسمح باختبار صحة التقديرات النظرية.

Abstract

In this work, we studied the magnetic susceptibility of an Ising system in 2D by the cluster dynamic (Swandsen-Wang) of Monte Carlo. An Ising system is a system of interacting spins, in which a phase transitions phenomena is possible. As long as the analytical solutions of this model (2D) are so complex, the MC simulation allows testing the validity of the theoretical estimates.