

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° :/2018.....



DOMAINE : Sciences de la matière

FILIERE : Physique

OPTION : Physique Théorique

Mémoire présenté pour l'obtention
Du diplôme de Master Académique

Par: Mechiki Imen

Intitulé

**MODELE D'ISING FERROMAGNETIQUE EN 2D :
ETUDE PAR LA DYNAMIQUE DES CLUSTERS
DE MONTE CARLO**

Soutenu le : 27 /06 /2018 devant le jury composé de:

S. Menouar	Université de Sétif	Président
A. Metatla	Université de M'sila	Rapporteur
H. Latelli	Université de M'sila	Examineur
S. Medjber	Université de M'sila	Examineur

Année universitaire : 2017/2018

Dédicace

Je dédie ce travail à ma chère mère et à mon chère père et à mes frères, mes sœurs, à toute ma famille, mes connaissances et mes amis, en particulier les étudiants de deuxième année de master en physique théorique.

YMEN

REMERCIEMENTS

Je remercie tout d'abord ALLAH tout puissant pour m'avoir donné la santé, la patience, l'espoir et le courage pour mener à terminer ce mémoire.

Je remercie mes parents qui me sont toujours le meilleur soutien que vous ma bénédiction, je transmets mes remerciements à mon encadreur estimé Abboud Metatla, avec tout le respect et l'appréciation et je remercie vos efforts et vos problèmes avec moi, et je remercié aussi les membres du jury de discussion, je reçu un diplôme, je transmets mes remerciements à l'enseignante Aicha Mahhadi sur tous les conseils et tout le soutien, aussi je remercie ma famille ,mes voisins, mes connaissances et mes amies et bravo à tous de près et de loin.

Sommaire

Introduction	4
Chapitre 01 : modèle d'Ising à une dimension	5
1- L'Hamiltonien du système	5
2- Fonction de partition exacte	5
3- Energie libre	7
4- Aimantation	8
5- Energie moyenne	9
Chapitre 02 : Modèle d'Ising à deux dimensions	9
1- Fonction de partition exacte	9
2- Energie libre	10
3- Aimantation	10
4- Energie moyenne	10
5- Approximation du champ moyen solutions à d-dimensions.....	11
5-1- Fonction de partition.....	11
5-2- Energie libre	12
5-3- Aimantation	12
5-4- Energie moyenne.....	12
Chapitre 03 : Simulations MC et Algorithme de Metropolis.....	13
1- Définition	13
2- Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps.....	14
2-1- Particules dans l'espace continu.....	14
2-2- Modèles sur réseaux	15
3- Importance échantillonnage et bilan détaillé	17
Chapitre 04: Simulations MC et Algorithme des Clusters de Swendsen-Wang	20
1- Algorithmes des Clusters pour le modèle d'Ising.....	20
2- Algorithme de Swendsen-Wang.....	20
Chapitre 05: Simulations du modèle par la dynamique des clusters de Swendsen-Wang	22
1- Caractéristiques générales des systèmes simulés	22
2- Résultats obtenus par la dynamique de S-W et comparaison avec ceux de Metropolis	23
Conclusion	25

Listes des figures :

Figure 1.1: Représentation graphique d'une chaîne d'Ising.

Figure 1.3 : Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré. Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction J (traits noir)

Figure 3 .1: Etats-basse énergie du modèle d'Ising bidimensionnel avec interactions ferromagnétiques (à droite) et interactions antiferromagnétiques (à gauche). Les cercles pleins correspondent aux spins orientés vers le haut et ouverte vers le bas respectivement. Les constantes de couplage J sont souvent limitée à être non nul uniquement pour les sites de réseau i, j qui sont voisins les plus proches.

Figure 5.1 : Variation de l'aimantation absolue $|M|$ avec la température pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$ pour les phases initiales BS et HS respectivement. La dynamique utilisée est celui de Metropolis.

Concernant les phases initiales du système à simuler, les résultats de mesure sur l'aimantation absolue que le système est initialement en phase BS sont, d'une façon générale, identiques à ceux obtenues sur un système initialement en phase HS dans les deux dynamiques de simulation (**Figures 5.1 et 5.2**).

Figure 5.2 : Variation de l'aimantation absolue $|M|$ avec la température pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$ pour les phases initiales BS et HS respectivement. La dynamique utilisée est celui des clusters de S-W.

Figure 5.3 : Comparaison de la variation de l'aimantation absolue $|M|$ avec la température dans les cas des deux dynamiques de Metropolis et des clusters de S-W pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$.

INTRODUCTION

Le modèle d'Ising est un modèle de physique statistique, il a été utilisé pour modéliser différents phénomènes dans lesquels des effets collectifs sont produits par des interactions locales entre particules à deux états, notamment les phénomènes ferromagnétiques dans les matériaux [1].

Les solutions exactes du modèle d'Ising n'existent que pour une chaîne (1-D) et en 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 conçue pour effectuer le calcul des grandeurs thermodynamiques du modèle telles que l'énergie interne, l'aimantation, la capacité calorifique, la susceptibilité magnétique,.... 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, l'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 le modèle d'Ising en 2-D par la méthode MC via la dynamique des clusters de Swendsen-Wang, le premier et le deuxième chapitres sont consacrés à l'approche théorique du modèle d'Ising en 1-D et 2-D dans le cadre de l'ensemble canonique, le troisième et quatrième chapitres sont un rappel sur les techniques des simulations par la méthode MC via l'algorithme de Metropolis des clusters de Swendsen-Wang, les résultats des simulations et leurs discussions pour le modèle en 2-D seront présentés dans le cinquième et dernier chapitre, nous terminerons ce mémoire par une conclusion.

Chapitre 01 : Modèle d'Ising à une dimension

A une dimension, c'est le cas le plus simple du modèle, le système d'Ising est exactement soluble, où la fonction de partition qui décrit les propriétés thermodynamiques de ce système est calculée avec exactitude par la méthode de la matrice de transfert.

On considère un réseau régulier (une chaîne) dont chaque site de spin est défini par une variable scalaire de spin $\sigma_i = \pm 1$ [2].

1- L'Hamiltonien du système

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

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

Où

J : est l'interaction entre les spins de sites plus proches voisins et h est le champ magnétique extérieur

$\sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$: signifie la somme sur les paires de sites des plus proches voisins.

$\sum_i \sigma_i = M$: étant la magnétisation.

On utilisant les conditions aux limites périodiques : $\sigma_{N+i} = \sigma_i$, on constate que l'Hamiltonien va comporter deux termes :

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

qui représente l'interaction entre spins les plus proches voisins.

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 :

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

La division sur 2 évite le double comptage dans cette somme. Le système comporte 2^N états différentes. Alors l'Hamiltonien devient :

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_{i+1} - (h/2) \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.5)$$

2- 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 $\sigma_i = \sigma_{i+N} \quad \forall i$ [2].

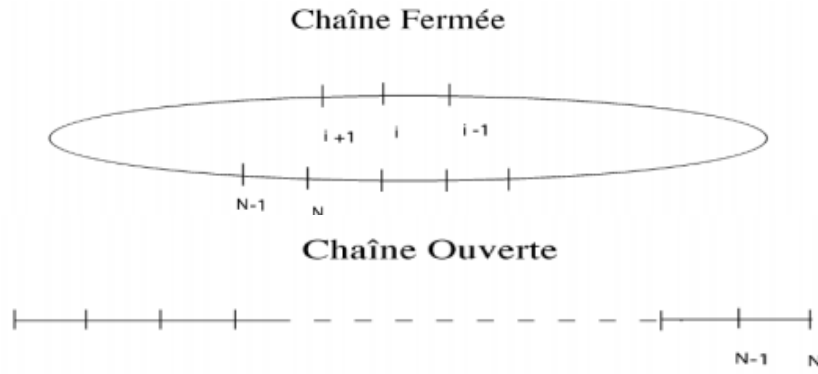


Figure 1.1: Représentation graphique d'une chaîne d'Ising.

Dans la fonction de partition pour N spins, 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 :

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

tel que $\beta = 1 / K_B T$, K_B est la constante de Boltzmann.

On injectant H donné par l'équation (1.5) dans cette fonction on obtient :

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \exp(\beta \sum_{i=1}^N [j\sigma_i\sigma_{i+1} + h(\sigma_i + \sigma_{i+1}) / 2]) \\ &= \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp(\beta [j\sigma_i\sigma_{i+1} + h(\sigma_i + \sigma_{i+1}) / 2]) \end{aligned} \quad (1.7)$$

On réécrit Z en fonction de produit de matrice :

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} T(\sigma_1, \sigma_2) T(\sigma_2, \sigma_3) \dots T(\sigma_N, \sigma_1) \quad (1.8)$$

tel que La matrice T est donné par :

$$T(\sigma_1, \sigma_2) = \exp(\beta [j\sigma_1\sigma_2 + h(\sigma_1 + \sigma_2) / 2]) \quad (1.9)$$

Ces éléments sont :

$$\langle 1 | T | 1 \rangle = e^{\beta(j+h)}$$

$$\langle -1 | T | -1 \rangle = e^{-\beta(j-h)}$$

$$\langle -1 | T | 1 \rangle = \langle 1 | T | -1 \rangle = e^{-\beta j}$$

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

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

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

$$\det(T - \lambda I) = 0 \quad (1.10)$$

où I est la matrice unité. Donc :

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

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

$$\text{tr}(AB) = \sum_{i=1}^n (AB)_{ii} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_{ij} B_{ji} = \sum_{j=1}^m (BA)_{jj} = \text{tr}(BA) \quad (1.11)$$

et après la diagonalisation de T la fonction Z devient :

$$Z = \text{tr}(T^N) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.12)$$

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

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta j} [\cosh(\beta h) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}}] \quad (1.13)$$

Donc on obtient :

$$Z = e^{N\beta j} \{ [\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}}]^N + [\cosh(\beta h) - \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}}]^N \} \quad (1.14)$$

3- Energie libre

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

$$F(T) = -K_B T \ln Z(T) \quad (1.15)$$

Avec

$$Z = (\lambda_+^N + \lambda_-^N) = \lambda_+^N (1 + (\lambda_- / \lambda_+)^N) \quad (1.16)$$

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

$$Z \approx \lambda_+^N$$

Car

$$(\lambda_- / \lambda_+)^N \rightarrow 0$$

Donc

$$F = -NK_B T \{ \beta j + \ln[\cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}}] \} \quad (1.17)$$

4- Aimantation

L'aimantation est donné par :

$$m = \langle \sigma \rangle = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \quad (1.18)$$

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + e^{-4\beta j}}} \quad (1.19)$$

Pour produire une magnétisation à température finie, il faut un champ extérieur.

5- Energie moyenne

L'énergie moyenne est défini 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.

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

Chapitre 02 : Modèle d'Ising à deux dimensions

La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel a été donnée pour la première fois par Lars Onsager[2]. 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.

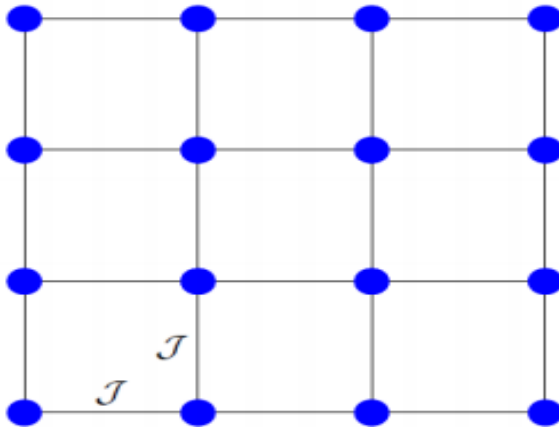


Figure 1.3 : Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré. Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction J (traits noir)

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

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.1)$$

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

1- Fonction de partition exacte

Onsager a calculé exactement la fonction de partition du modèle en deux dimensions quand $h = 0$ (champ nul) :

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{-\beta H} = \text{tr} T^N$$

Avec

$$\beta = \frac{1}{K_B T}$$

D'après Onsager on a :

$$Z = [2 \cosh(2j\beta) e^I]^N \quad (2.2)$$

Où I est une intégrale elliptique qui a la forme :

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

Avec

$$x = \frac{2 \sinh\left(\frac{2j}{K_B T}\right)}{\cosh^2 h\left(\frac{2j}{K_B T}\right)}$$

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 $T = T_c$ (il suffit de dériver x en fonction de T pour observer $Sh(T_c) = 1$ et donc $x(T_c) = 1$).

2- Energie libre

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

$$F(T) = -K_B T \ln Z = -NK_B T \ln[2 \cosh(2\beta j)] - \frac{NK_B T}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \left[\frac{1}{2} (1 + \sqrt{1 - x^2 \sin^2 \varphi}) \right] \quad (2.3)$$

3- Aimantation

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

$$m = [1 - \sinh(2\beta j)^{-4}]^{\frac{1}{8}} \quad (2.4)$$

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

$$\tanh\left(\frac{2j}{K_B T}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow \frac{K_B T_c}{j} = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} = 2.269185 \quad (2.5)$$

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

4- Energie moyenne

L'énergie moyenne est donnée par :

$$E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -2Nj \tanh(2\beta j) - 2Nj \frac{(\sinh^2(2j\beta) - 1)}{\sinh(4j\beta)} \left[\frac{2}{\pi} g(x) - 1 \right] \quad (2.6)$$

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

$$g(x) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 - x^2 \sin^2 \varphi}}$$

On a mentionné qu'à $T = T_c$, χ atteint un maximum, dans cette valeur de χ la fonction $g(x)$ présente une divergence logarithmique :

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

5- Approximation du champ moyen solutions à d-dimensions

Cette méthode très générale a été proposée par C. Weiss en 1907, sur un site donné i , on admet que l'on peut remplacer tous les autres spins par leur valeur moyenne de σ [2].

Pour obtenir un Hamiltonien approche qui le soit, on porte de l'identité suivante :

$$\sigma_i \sigma_j = (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) + m(\sigma_i + \sigma_j) - m^2 \quad (2.7)$$

Valable quel que soit m , on choisit $m = \langle \sigma \rangle$ valeur moyenne de spin qui on calculera par la suite. On introduit la somme dans cette identité et évaluer chaque terme isolément :

$$\sum_{\langle ij \rangle} (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) = \sum_i (\sigma_i - m) \sum_{j(i)} (\sigma_j - m) \quad (2.8)$$

Ou $j(i)$ représente toutes les interactions de sites j plus proches voisins de i , si la coordinnence q était infinie la somme donnée par (2.2) serait nulle par définition de la moyenne (les fluctuations sont petites par rapport à la valeur moyenne), à la limite thermodynamique ($N \rightarrow \infty$) l'approximation sera d'autant meilleure que q sera grande, si on néglige les effets de bord alors :

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

La division par 2 évite le double comptage dans cette somme. Hamiltonien (2.1) devient :

$$H = - \sum_i (jqm + h) \sigma_i + j \frac{q}{2} Nm^2$$

Avec $j \frac{q}{2} Nm^2$ est négligée. Donc

$$H = - \sum_i (jqm + h) \sigma_i = -(jqm + h) \sum_i \sigma_i \quad (2.9)$$

5-1- Fonction de partition

La fonction de partition est donnée par :

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

On fait la somme sur tous les états de spin :

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

$$Z = e^{-\beta \frac{jqNm^2}{2}} \sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta(jqm+h) \sigma_i}$$

Qui prendre la forme simple

$$Z = e^{-\beta \frac{qjNm^2}{2}} \left[\sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{\beta(jqm+h)\sigma_i} \right]^N$$

$$Z = e^{-\beta \frac{qjNm^2}{2}} [2 \cosh \beta(jqm + h)]^N \quad (2.10)$$

5-2- Energie libre :

L'énergie libre dans cette approximation est donnée par :

$$F(T) = -K_B T \ln Z = \left(j \frac{q}{2} Nm^2 \right) - NK_B T \ln [2 \cosh \beta(jqm + h)] \quad (2.11)$$

5-3- Aimantation

Elle a la même définition que dans 1D, elle est donc donnée comme suit :

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

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

Donc

$$m = \tanh \beta(h + jmq) \quad (2.12)$$

5-4- Energie moyenne

L'énergie moyenne par site est donnée par :

$$e = \frac{E}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (2.13)$$

$$e = -j \frac{q}{2} m^2 + \tanh \beta(jqm + h) + \frac{\partial m}{\partial \beta} [-\beta jmq + \beta jq \tanh(jqm + h)] \quad (2.14)$$

D'autre part :

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial m} = -\beta jmq + \beta jq \tanh \beta(jqm + h)$$

On remplace dans l'équation (2.14), 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 :

$$e = -\frac{q}{2} m^2 \quad (2.15)$$

Chapitre 03 : Simulations MC et Algorithme de Metropolis

1-Définition

Le terme méthode de Monte Carlo (MC) inventé par Metropolis désigne une famille algorithmique visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoire, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Les simulations de Monte Carlo sont une classe très importante de méthodes stochastiques pour calculer les propriétés thermiques, on s'intéresse ici à des simulations classiques (puisque il y a également des simulations MC quantiques). 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, mais, ils sont basés sur des plans d'échantillonnage non uniformes plus efficaces. En utilisant importance échantillonnage, la configuration (positions de particules, les directions de spin, etc...) d'un système à plusieurs corps et qui est fini, peut être généré selon la distribution de Boltzmann, de sorte que les valeurs moyennes thermiques sont obtenus en tant que moyennes arithmétiques simples des fonctions "mesure" de la configuration. On présente ici cette méthode de simulation dans le cadre de la description canonique pour simplifier son illustration.

Dans une simulation on veut calculer les valeurs moyennes des grandeurs physiques telles que l'énergie moyenne, la capacité calorifique, l'aimantation, la susceptibilité magnétique. Si on considère ici l'exemple du modèle de spins d'Ising avec des interactions ferromagnétiques entre premiers voisins, cette hypothèse ne fait pas perdre le caractère général de la méthode.

La valeur moyenne d'une grandeur A est défini par :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z(T)} \sum_s A(s) e^{-\beta E(s)} \quad (3.1)$$

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 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.

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

$$\langle A \rangle = \int_{-L}^L P(x) A(x) dx \quad (3.2)$$

Avec

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

Où $P(x)$ est une distribution de probabilité quelconque. Par échantillonnage aléatoire de M points X_1, \dots, X_M dans l'intervalle choisit, la valeur moyenne est estimée à :

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i) \quad (3.3)$$

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 certaine distribution de probabilité $W(x)$, à savoir la probabilité de choisir un point dans un intervalle infiniment petit $[x, x + dx]$, l'estimation de la valeur moyenne est :

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M \frac{P(x)}{W(x)} A(x) \quad (3.4)$$

Les fluctuations statistiques ici sont moins que l'estimation (2.2) de l'échantillonnage uniforme si $W(x)$ est culminé dans la même région que $P(x)$ et si la fonction $A(x)$ est régulière, dans le sens d'être raisonnablement lisse et pas très petite où $P(x)$ est grand et vice versa.

Il est impossible dans la pratique pour trouver $W(x)$ optimale qui minimise les fluctuations, une très bonne solution est d'utiliser $W(x) = P(x)$. [3]. La valeur moyenne est alors juste simple moyenne arithmétique de $A(x)$ par rapport à la configuration échantillonné

$$\langle A \rangle \approx \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A(x_i) \quad (3.5)$$

En physique statistique, P est une fonction exponentielle fortement culminé $e^{-\frac{E}{K_B T}}$ 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 importante par rapport à ceux de A et dans l'échantillonnage en utilisant A 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.

Un des utilitaires principaux de la simulation Monte Carlo est dans les études des transitions de phase et les phénomènes critiques [3].

2- 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 [3].

2-1- Particules dans l'espace continu

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

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d A(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) e^{-\mu(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/K_B T} \quad (3.6)$$

Où Z est la fonction de partition :

$$Z = \int \prod_{i=1}^n dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d e^{H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/K_B T} \quad (3.7)$$

K_B est la constante de Boltzmann, et H est l'Hamiltonien. Pour les particules identiques de masse m dans un potentiel $U(\vec{x}_i)$ et une autre à deux particules interaction $V(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ l'Hamiltonien est :

$$H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^n U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j} V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \quad (3.8)$$

Si l'observable A est indépendante de la vitesse (une fonction que des positions x_i), les intégrales de moment s'annulent en (3.6), conduisant à

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d A(\{\vec{x}_i\}) e^{-H(\{\vec{x}_i\})/K_B T} \quad (3.9)$$

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d e^{-H(\{\vec{x}_i\})/K_B T}$$

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

$$E_p(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) = \sum_{i=1}^n U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j} V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \quad (3.10)$$

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

$$K_i = \left\langle \frac{P_i^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d \frac{P_i^2}{2m} e^{-p_i^2/2mK_B T} \quad (3.11)$$

$$Z_i = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d e^{-p_i^2/2mK_B T} \quad (3.12)$$

Etant donné que toutes les intégrales sauf ceux sur \vec{P}_i sont nulle. Cela donne le théorème d'équipartition :

$$K_i = \frac{d}{2} K_B T \quad (3.13)$$

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 ici examiner le cas le plus simple qui est des modèles sur réseaux[3].

2-2- Modèles sur réseaux

Dans un modèle sur réseau les degrés de liberté du système peuvent être continus ou discrets. Les modèles de spin constituent une classe importante de modèles sur réseau. Le modèle de spin le plus simple connu est le modèle Ising, dans lequel les spins ont seulement deux orientations possibles le long d'un axe choisi; "haut" ou "bas".

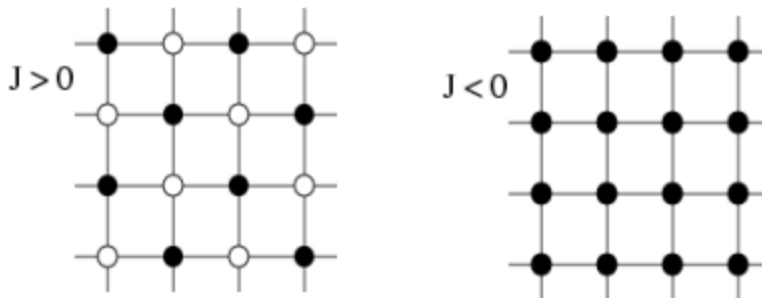


Figure 3.1: États-basse énergie du modèle d'Ising bidimensionnel avec interactions ferromagnétiques (à droite) et interactions antiferromagnétiques (à gauche). Les cercles pleins correspondent aux spins orientés vers le haut et ouverts vers le bas respectivement. Les constantes de couplage J sont souvent limitées à être non nul uniquement pour les sites de réseau i, j qui sont voisins les plus proches.

En notant les degrés de liberté $\sigma_i = \pm 1$, l'énergie est :

$$E = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (3.14)$$

Où nous avons également inclus un champ magnétique externe. L'interaction J_{ij} est encore (mais pas toujours) non nulle seulement entre voisins les plus proches. Un modèle d'Ising peut survenir dans un système de spin $\sigma = \frac{1}{2}$ lorsque les anisotropies font les interactions dans un sens de rotation dominante, par exemple, seulement $\sigma_i^z \sigma_j^z$ peut devoir être pris en considération.

Considérant seulement les interactions entre plus proche voisin, l'énergie est :

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (3.15)$$

Où $\langle i, j \rangle$ désigne une paire de sites proches voisins (i, j) . En notant σ l'ensemble des configurations de spin $\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$, où N est le nombre total de sites dans le système, la valeur moyenne thermique d'une fonction $A(\sigma)$ est ($K_B = 1$):

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} A(\sigma) e^{-E(\sigma)/T} \quad (3.16)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} \quad (3.17)$$

Pour les interactions ferromagnétiques (c.-à-d. $J < 0$) lorsque $T \rightarrow 0$ il y a seulement deux configurations de spin qui contribuent; ceux avec tous les spins pointant vers le haut ou vers le bas. Pour les interactions antiferromagnétiques (de $J > 0$), et par exemple, sur un réseau carré bidimensionnel les configurations les plus bas de l'énergie sont en alternance de haut spin en bas spin dans un motif en damier (les spins haut et bas constituent deux sous-réseaux)[3].

En dimension $d > 1$, le modèle d'Ising présente une transition de phase entre un état désordonné (paramagnétique) à des températures élevées et un état ordonné (ferromagnétique) à basse température (dans une dimension, les fluctuations thermiques interdisent l'ordre à $T > 0$, et le système présente alors un véritable ordre). Le paramètre d'ordre de cette transition de phase est l'aimantation :

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (3.18)$$

3- 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 :

$$\langle A \rangle = \sum_{\sigma} P(C_i) A(C_i), \quad P(C_i) = \frac{1}{Z} e^{-E(C_i)/T} \quad (3.19)$$

Où nous travaillons en unités telles que $K_B = 1$ (i.e., nous mesurons les énergies en degrés Kelvin). Dans une simulation, nous commençons avec une configuration arbitraire $C_{i(0)}$ et de lui sera générée 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 distribué 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 $P(C)$ 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 d'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 noter $P(C_i \rightarrow C_j)$. Le nombre de configurations C_i après mise à jour des toutes les configurations est :

$$N_1(C_i) = N_0(C_i) + \sum_{j \neq i} [N_0(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - N_0(C_i) P(C_i \rightarrow C_j)] \quad (3.20)$$

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 pour tout $i = 1, \dots$:

$$\sum_{j \neq i} [N_0(C_j) P(C_j \rightarrow C_i) - N_0(C_i) P(C_i \rightarrow C_j)] = 0 \quad (3.21)$$

Et puisque $N_0(C_i) \propto P(C_i)$:

$$\sum_{j \neq i} [P(C_j)P(C_j \rightarrow C_i) - P(C_i)P(C_i \rightarrow C_j)] = 0 \quad (3.22)$$

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;

$$P(C_j)P(C_j \rightarrow C_i) - P(C_i)P(C_i \rightarrow C_j) = 0 \quad (3.23)$$

Ce qui donne une condition, appelé de balance détaillée, sur le rapport des probabilités de transition;

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{P(C_j)}{P(C_i)} \quad (3.24)$$

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

$$P(C_i) = \frac{1}{Z} W(C_i) \quad (3.25)$$

$$W(C_i) = e^{-E(C_i)/T} \quad (3.26)$$

Où $W(C_i)$ est désigné comme étant le poids de la configuration, on peut aussi écrire :

$$\frac{P(C_i \rightarrow C_j)}{P(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (3.27)$$

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 et l'autre pour exercer effectivement le changement (accepter). Nous écrivons donc :

$$P(C_i \rightarrow C_j) = P^{attempt}(C_i \rightarrow C_j)P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) \quad (3.28)$$

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 $P(C_i \rightarrow C_j) = const.$, indépendante de i, j . Cette partie de la probabilité de transition tombe alors sur la condition de bilan détaillé (3.28) et on se retrouve avec une condition bilan détaillé pour les probabilités d'acceptation :

$$\frac{P^{accept}(C_i \rightarrow C_j)}{P^{accept}(C_j \rightarrow C_i)} = \frac{W(C_j)}{W(C_i)} \quad (3.29)$$

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

$$P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) = \min\left[\frac{W(C_j)}{W(C_i)}, 1\right] \quad (3.30)$$

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 Metropolis satisfait la condition de bilan détaillé (3.30).

Pour déterminer si ou non la mise à jour sera acceptée lorsque $P(C) < 1$, la probabilité d'acceptation peut être comparée avec un pseudo-nombre (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 C_i configuration 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 utilisée avec l'algorithme de Metropolis est :

$$P^{accept}(C_i \rightarrow C_j) = \frac{W(C_j)}{W(C_i) + W(C_j)} \quad (3.31)$$

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

$$P^{accept}(C_{j(k)}) = \frac{W(C_{j(k)})}{\sum_{l=1}^m W(C_{j(l)})} \quad (3.32)$$

La configuration actuelle est $C_i = C_j(l)$ pour certains $l \in \{1, \dots\}$ et il n'y a pas explicitement un rejet de mise à jour, à savoir, l'une des options $l \in 1, \dots$ est toujours choisie, selon les probabilités ci-dessus [3].

Chapitre 04: Simulations MC 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 lorsqu'on s'approche des points critiques, où le temps d'autocorrélation peut être long dans beaucoup de systèmes. Ces problèmes peuvent être significativement réduits, voire complètement éliminés, en utilisant les algorithmes des clusters, 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 ($h = 0$)[3].

2- Algorithme de Swendsen-Wang :

Pour construire l'algorithme de cluster pour le modèle Ising d'abord développé par Swendsen et Wang, nous introduisons une indice de liaison b correspondant à une paire de spins en interaction $\sigma_{i(b)}\sigma_{j(b)}$; $b=1,2,\dots, N_b$, où le nombre de liaisons $N_b = d.N$ pour un réseau cubique d -dimensionnel avec N sites avec des conditions périodiques aux limites.

Nous pouvons alors écrire l'énergie du modèle d'Ising :

$$E(\sigma) = -|J| \sum_{b=1}^{N_b} [\sigma_{i(b)}\sigma_{j(b)} + 1] = \sum_{b=1}^{N_b} E_b \quad (4.1)$$

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

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} e^{-E_b/T} = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} [1 + (e^{-E_b/T} - 1)] \quad (4.2)$$

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

$$\begin{aligned} F_b(0) &= 1; \\ F_b(1) &= e^{-E_b/T} - 1; \end{aligned} \quad (4.3)$$

Et écrivez la fonction de partition comme :

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} [F_b(0) + F_b(1)] \quad (4.4)$$

Nous introduisons maintenant un ensemble de variables $\tau_b = \pm 1$ de liaison auxiliaires, à utiliser comme arguments dans la fonction de liaison (4.3) 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 σ . Nous pouvons maintenant écrire Z comme somme sur des spins et des liens :

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \prod_{b=1}^{N_b} F_b(\tau_b) \quad (4.5)$$

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

$$F_b(0) = 1 \text{ Independent de } \sigma_{i(b)}, \sigma_{j(b)} \quad (4.6)$$

$$F_b(1) = e^{E_b/T} - 1 = \begin{cases} e^{2|J|T} - 1, & \text{si } \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \\ 0, & \text{si } \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \end{cases} \quad (4.7)$$

Pour une contribution non nulle à la fonction de partition (4.5), 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 (4.5) est :

$$W(\sigma, \tau) = \prod_{b=1}^{N_b} F_b(\tau) \quad (4.8)$$

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

$$W(\sigma, \tau) = (e^{2|J|T} - 1)^{N_1} \quad (4.9)$$

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 (4.1) ; 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 (4.9). Pour une configuration de spin donnée, nous définissons la probabilité d'une configuration de liaison correspondant au poids (4.9) ;

$$P(\tau) = \prod_b P_b(\tau_b) \quad (4.10)$$

Ou la probabilité de lien individuel

$$P(\tau_b) = \frac{F_b(\tau_b)}{F_b(0) + F_b(1)} \quad (4.11)$$

La probabilité d'une liaison remplie est donc

$$P(\tau_b = 1) = 1 - e^{-2|J|T}, \text{ si } \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \quad (4.12)$$

$$P(\tau_b = 1) = 0, \text{ si } \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \quad (4.13)$$

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 Metropolis est appropriée aux modèles thermiques[3].

Chapitre 05: Simulations du modèle par la dynamique des clusters de Swendsen-Wang

1- Caractéristiques générales des systèmes simulés:

Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d = 2$) de taille $L = 16, 32, 64, 128$, en deux phases initiales différentes : haut spin (HS) et bas spin (BS), pour des valeurs de la température dans l'intervalle $[0.5, 4]$ en système d'unité tel que $K_B = J = 1$ et avec des conditions périodiques aux bords.

L'algorithme des clusters utilisé dans les simulations MC est celui de Swendsen-Wang, et nous avons comparés les résultats obtenus avec ceux de l'algorithme de Metropolis. Notons qu'avant chaque mesure, on fait équilibrer thermiquement le système.

Les résultats de mesure pour l'aimantation absolue $|M|$ par les deux dynamiques sont schématisés dans les figures ci-dessous.

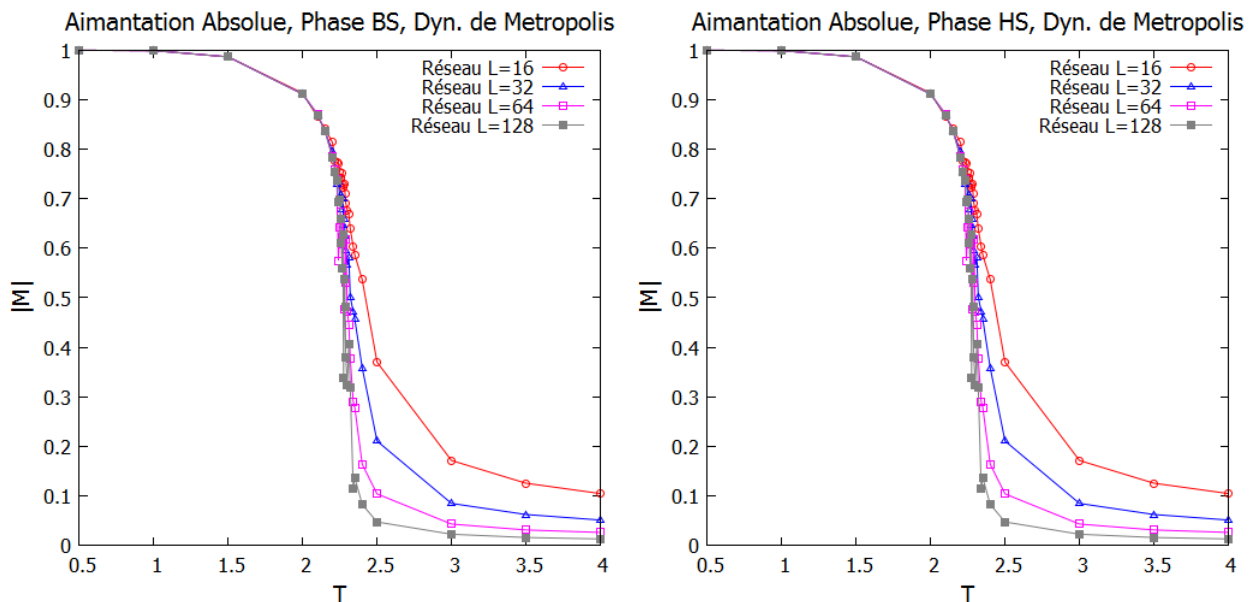


Figure 5.1 : Variation de l'aimantation absolue $|M|$ avec la température pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$ pour les phases initiales BS et HS respectivement. La dynamique utilisée est celui de Metropolis.

Concernant les phases initiales du système à simuler, les résultats de mesure sur l'aimantation absolue que le système est initialement en phase BS sont, d'une façon générale, identiques à ceux obtenues sur un système initialement en phase HS dans les deux dynamiques de simulation (**Figures 5.1 et 5.2**).

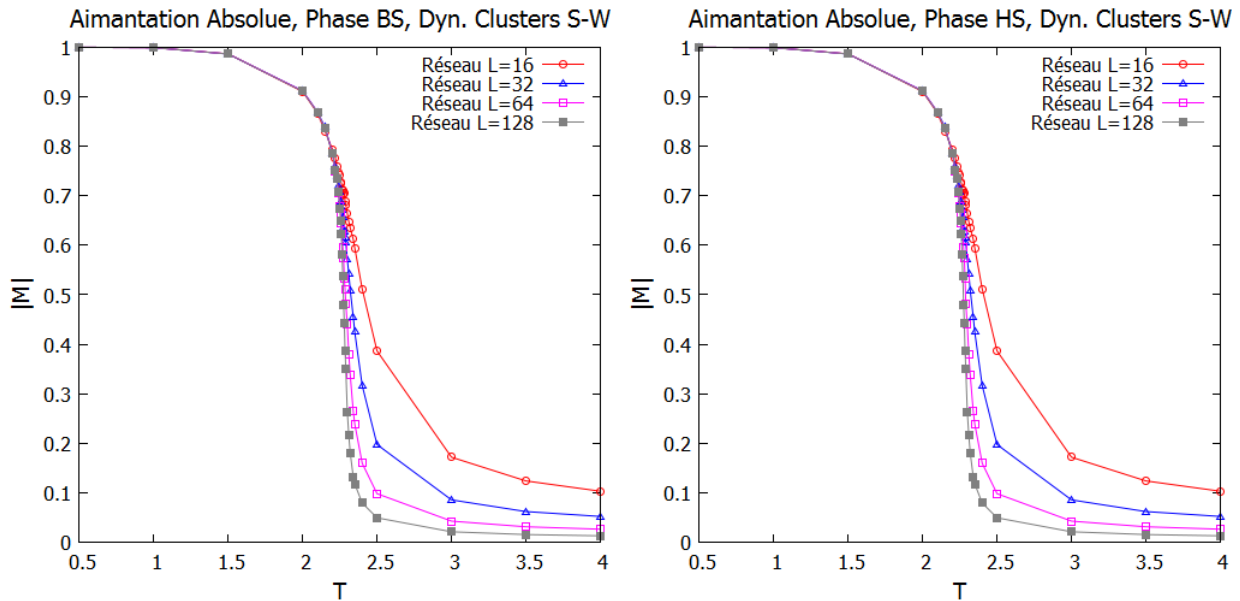


Figure 5.2 : Variation de l'aimantation absolue $|M|$ avec la température pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$ pour les phases initiales BS et HS respectivement. La dynamique utilisée est celui des clusters de S-W.

2- Résultats obtenus par la dynamique de S-W et comparaison avec ceux de Metropolis:

Les résultats de mesure sur l'aimantation absolue $|M|$ selon la dynamique des clusters S-W pour des températures loin de la température critique T_C , de transition de la phase ordonnée ferromagnétique à basses températures vers la phase désordonnée paramagnétique à hautes températures pour un réseau carré d'un système infini d'Ising, montrent que ces résultats sont pratiquement identiques à ceux obtenus par la dynamique de Metropolis, sauf que pour les systèmes de petites tailles (ici pour $L=16, 32$) les résultats montrent une petite différences entre les deux dynamiques pour les hautes températures (**Figure 5.3**), le défaut est à la dynamique des clusters qui est moins efficace pour les systèmes de petites tailles, plus le système à simuler est large plus la dynamique est efficace.

Pour les mesures sur l'aimantation absolue $|M|$ aux alentours de la température critique, la dynamique des clusters S-W donne des résultats moins fluctuants que ceux de la dynamique de Metropolis (**Figures 5.1, 5.2**), il est très bien connu que parmi les inconvénients de ce dernier dynamique le ralentissement lorsqu'on s'approche des points critiques, où le temps d'autocorrélation peut être long dans beaucoup de systèmes, d'où les résultats de mesure sont beaucoup fluctuants aux points critiques. Ces problèmes seront significativement réduits, voire complètement éliminés, par l'utilisation de la dynamiques des clusters.

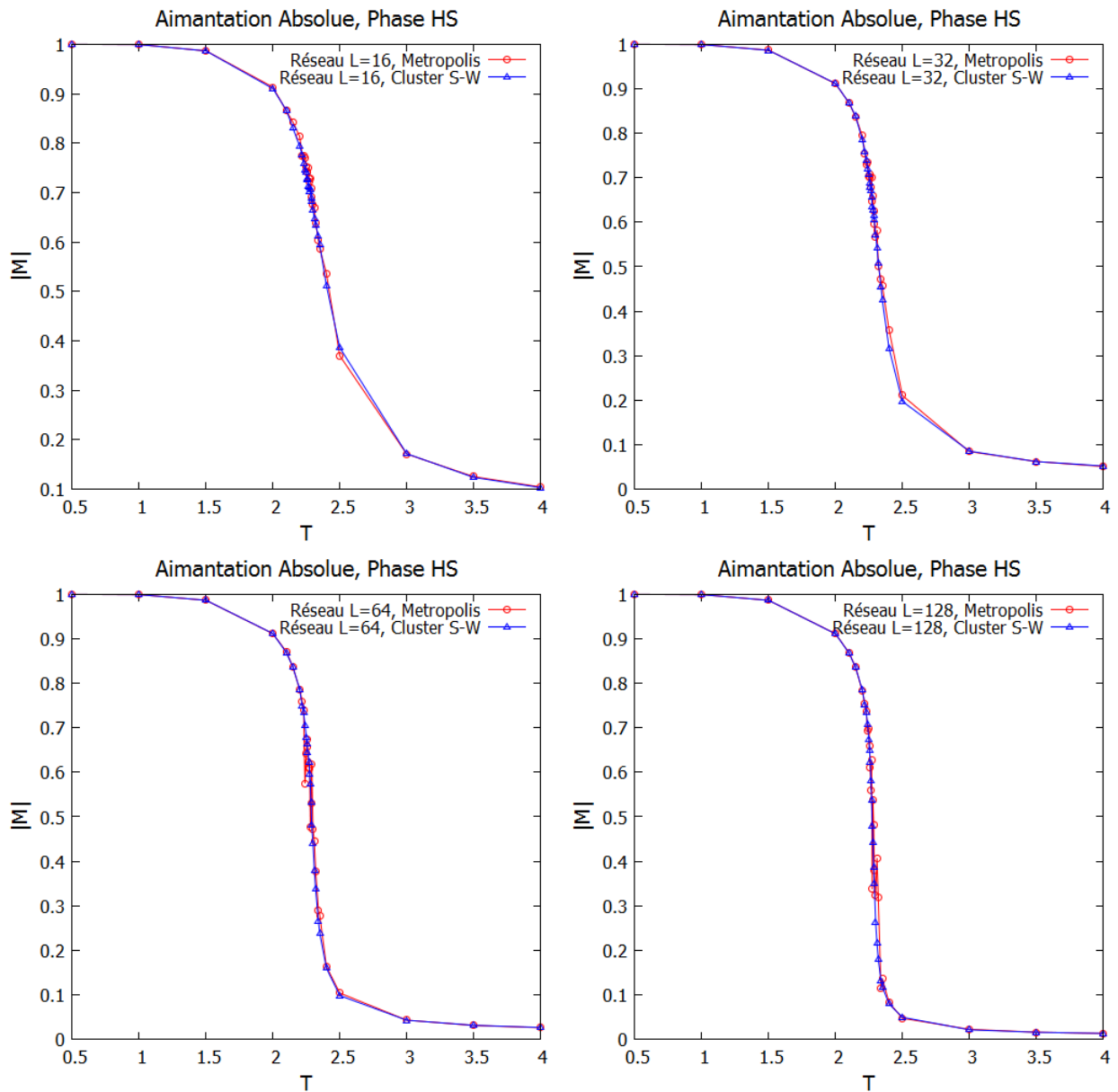


Figure 5.3 : Comparaison de la variation de l'aimantation absolue $|M|$ avec la température dans les cas des deux dynamiques de Metropolis et des clusters de S-W pour réseaux de taille $L=16, 32, 64, 128$.

Conclusion :

Nous avons étudié dans ce mémoire le modèle d'Ising bidimensionnel par les techniques des simulations de Monte Carlo via la dynamique des clusters de Swendsen-Wang et nous avons comparé les résultats obtenus pour l'aimantation absolue du modèle avec ceux obtenus par la dynamique de Metropolis. Nous avons fait les simulations sur des réseaux carrés ($d = 2$) avec des conditions périodiques aux bords et pour deux phases initiales différentes pour le système, haut spin (HS) et bas spin (BS).

La comparaison entre les deux dynamiques montrent qu'elles donnent des résultats presque identiques sauf pour deux cas, l'un concerne la taille du système : pour les systèmes de petites tailles, les résultats montrent une petite différence entre les deux dynamiques pour les hautes températures, le défaut est à la dynamique des clusters qui est moins efficace pour les systèmes de petites tailles, l'autre il concerne le point critique (température de transition de phase), les mesures sur l'aimantation absolue aux alentours de ce point montrent que la dynamique des clusters S-W donne des résultats moins fluctuants que ceux de la dynamique de Metropolis : dans la dynamique des clusters le temps d'autocorrélation au point critique est significativement réduit, d'où les résultats de mesure sont moins fluctuants, c'est un avantage de la dynamique des clusters sur celle de Metropolis.

Références :

[1]- Dounia Saez, Clément Perrot, Léo Vandamme, Création : 3 Octobre 2012, mise à jour : 13 Décembre 2012, Simulation du modèle d'Ising.

http://media4.obspm.fr/public/M2R/appliquettes/doc/Ising_doc.html

[2]- Anders W. Sandvika, Computational Physics Monte Carlo simulation in classical statistical physics. Department of Physics, 2013. Boston University.

[3]-Stéphane. D, Nicolas. V, Introduction à la Physique Statistique, Université de Liège, Belgique, 212p. (2006).

Résumé:

Nous avons étudié le modèle **d'Ising en 2-D** par les simulations **Monte Carlo** via **la dynamique des clusters de Swendsen-Wang**, où nous avons mesuré **l'aimantation absolue** du système et nous avons comparés résultats de mesure avec ceux obtenus par **la dynamique de Metropolis**.

ملخص

درسنا نموذج ايزينغ ثنائي الأبعاد بواسطة محاكاة مونت كارلو عبر ديناميكيات مجموعات سواندسنغ وانغ حيث قمنا بقياس المغنطة المطلقة للنظام ومقارنة نتائج القياس مع تلك التي تحصلنا عليها بديناميك ميتروبوليس

Summary:

We have studied **the 2-D Ising model** by **Monte Carlo** simulations via the **Swendsen-Wang cluster dynamics**, where we have measured **the absolute magnetization** of the system and we have compared the results of the measure with those obtained by **Metropolis dynamics**.