

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

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT PHYSIQUE

N° :.....Ph/TH/08/2020.....



DOMAINE : SCIENCES DE LA MATIERE

FILIERE : Physique

OPTION : PHYSIQUE THEORIQUE

Mémoire présenté pour l'obtention  
Du diplôme de Master Académique

Par: Fatima-Zohra Bachiri

Roguia Saidi

*Intitulé*

**CAPACITE CALORIFIQUE D'UN SYSTEME  
D'ISING EN 2D : ETUDE PAR LA DYNAMIQUE  
DES CLUSTERS DE MONTE CARLO.**

Soutenu le : 30/09/2020 devant le jury composé de:

LATELLI H'mida

Pr. Université de M'sila

Président

METATLA Abboud

MC(B) Université de M'sila

Rapporteur

KALLI Siham

MC(B) Université de M'sila

Examineur

**Année universitaire : 2019/2020**

## REMERCIEMENT

---

*Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon Directeur de mémoire D. METATLA Abboud, je la remercie de m'avoir encadré, orienté, aidé et conseillé. Je le remercie pour ses encouragements continuels qui ne cessaient de me remonter le moral pendant les moments difficiles et pour l'énorme soutien scientifique et moral qu'il a su m'accorder pendant cette période.*

*Je remercie Docteur LATELLI H'mida Pour avoir accepté de présider mon jury. Je remercie également Dr KALLI Siham, membre du jury d'avoir accepté l'examination et l'évaluation de ce travail.*

*J'adresse aussi mes vifs remerciements à mon cher père et à ma chère mère pour leur encouragement et le soutien affectif et matériel qu'ils m'ont apporté tout au long de mon existence.*

*Je remercie aussi mes frères, mes sœurs, mes chers, mes collègues, mes enseignants et tout le personnel du Département de la physique, ainsi que toutes les personnes qui m'ont apporté un soutien moral de loin ou de près.*

## DEDICACES

---

*J'ai le grand plaisir de dédier ce modeste travail :*

*A ma très chère mère, qui me donne l'espoir de vivre et qui n'a jamais cessé de prier pour moi.*

*A mon très cher père, pour ses encouragements, son soutien, surtout pour son amour et son sacrifice afin que rien n'entrave le déroulement de mes études.*

*A mon frère taki eddine, qui a contribué à la réalisation de ce modeste travail et mes sœurs*

*A mes meilleurs amis et mes chers collègues.*

***Fatima Zahra***

---

# DEDICACES

---

*Je dédie ce mémoire*

*A mes chers parents ma mère qui avoir soutenu et mon père pour leur patience, leurs amours, leur soutien et leurs encouragements.*

*A mes frères a mes amies et mes camarades*

*Sans oublier tous les professeurs que ce soit du primaire, du moyen, du Secondaire ou de l'enseignement supérieur.*

***Roguia***

---

# TABLE DES MATIERES

---

LISTE DES FIGURES.....	vii
INTRODUCTION GENERALE.....	1
Chapitre 1.....	2
Modèle d'Ising à une et deux dimensions.....	2
1 Introduction :.....	2
2. Modèle d'Ising à une dimension : .....	2
2.1 Fonction de partition exact : .....	3
2.2 Energie libre :.....	5
2.3 Aimantation .....	6
2.4 Susceptibilité .....	6
2.5 Capacité calorifique .....	6
2.6 Energie moyenne.....	6
3. Modèle d'Ising en deux dimensions : .....	7
3.1 La fonction de partition .....	7
3.2 L'énergie libre .....	8
3.3 L'aimantation.....	8
3.4 La Susceptibilité magnétique.....	8
3.5 La capacité calorifique .....	8
3.6 L'énergie moyenne .....	9
4. L'approximation de champ moyen.....	9
4.1 La Fonction de partition .....	10
4.2 L'énergie libre .....	10
4.3 L'aimantation.....	10
4.4 Susceptibilité .....	11
4.5 Capacité calorifique .....	12
4.6 Energie moyenne.....	13
Chapitre 2. Simulation de monte Carlo et algorithme de Métropolis.....	14
1. Introduction :.....	14
2. Mécanique statistique des systèmes à plusieurs corps :.....	15
2.1 Particules dans l'espace continu : .....	15
2.2 Modèles sur réseaux :.....	17
3. Importance échantillonnage et bilan détaillé .....	18
4. Algorithme de Metropolis pour le modèle d'ising .....	21
5. Mesure des observables physiques :.....	21
Chapitre 3. Dynamique des clusters de swendsen-wang .....	23

1. Algorithmes des clusters pour le modèle d'Ising .....	23
2. Algorithme de Swendsen-Wang .....	23
Chapitre 4. Résultats des mesures numériques et discussion .....	26
1. Caractéristiques des systèmes à simuler .....	26
2. Présentation des résultats .....	26
Conclusion .....	29
RÉFÉRENCES .....	30

## ***LISTE DES FIGURES***

<b>FIGURE 1.1:</b> Le réseaux carrée est repliée sur lui-même pour Former un tore sur lequel chaque site a Exactly voisins .....	2
<b>FIGURE 1.2:</b> Représentation graphique d'une chaîne du modèle .....	3
<b>FIGURE 1.3:</b> Représentation graphique d'un système d'Ising sur un réseau carré .....	7
<b>FIGURE 1.4:</b> Principe de l'approximation du champ moyen .....	9
<b>FIGURE 1.5:</b> Résolution graphique de l'équation auto cohérente avec $j=1, q=6, h=0$ .....	11
<b>FIGURE 2.1:</b> 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. ....	18
<b>FIGURE 4.1 :</b> Etats-basses Aimantation absolu en fonction de la température pour un réseau carré de Taille $L=16,32,64$ et $128.L=16,32$ et $64$ respectivement.....	26
<b>FIGURE 4.2 :</b> Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille $L=16,32,64$ et $128$ .....	26
<b>FIGURE 4.3 :</b> Configuration finale de spins et de liaisons pour un réseau avec $L=16$ en phase initiale (HS) à quelques températures obtenue par la dynamique de Swendsen-Wang.....	27

## ***INTRODUCTION GENERALE***

Le modèle d'Ising est utilisé pour modéliser les phénomènes dans lesquels des effets collectifs sont produits par des interactions locales entre particules à deux états, en particulier, les phénomènes ferromagnétiques dans les matériaux.

Vu que les solutions exactes du modèle n'existent que pour des systèmes à (1-D) et en (2-D) sans champ magnétique, d'où les techniques de simulations numériques sont très utilisées pour résoudre le modèle hors ces deux cas. Parmi ces techniques, 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, en plus elles permettent aussi de tester la validité des approximations théoriques, l'étude des phénomènes critiques et les transitions de phase,....

Le premier algorithme utilisé dans les simulations MC est celui de Métropolis, et 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 capacité calorifique du modèle d'Ising en 2-D par les techniques MC via la dynamique des clusters de Swendsen-Wang, le premier chapitre est consacré à l'approche théorique du modèle d'Ising en 1-D et 2-D dans le cadre de l'ensemble canonique, le deuxième et le troisième chapitres sont un rappel sur les techniques des simulations MC via l'algorithme de Metropolis et celui des clusters de Swendsen-Wang respectivement, les résultats des simulations et leurs discussions pour le modèle en 2-D seront présentés dans le quatrième et dernier chapitre, nous terminerons ce mémoire par une conclusion.

# Chapitre 1. Modèle d'Ising à une et deux dimensions

## 1 Introduction :

Le modèle d'Ising a été inventé par le physicien Wilhelm Lenz (1920) et a été résolu par son étudiant Ernst Ising (modèle 1-D Ising). Le modèle 2-D (sans champ magnétique appliqué) a été résolu par L. Onsager (1944). En trois dimensions le modèle ne peut pas être résolu analytiquement.

Dans le modèle d'Ising en 2-D, On considère généralement un réseau carré sur lequel sont disposés  $N$  spins. Un spin  $\sigma_i$  représente l'état microscopique du site  $i$  du réseau. Deux états sont possibles :  $\sigma_i = \pm 1$ . Ils correspondent par exemple à un moment magnétique qui pointe soit vers le nord soit vers le sud. En présence d'un champ magnétique extérieur  $H$ , les spins auront tendance à s'orienter selon ce champ. De plus, les spins ne sont pas indépendants. Supposant que Chaque spin interagit uniquement avec ses plus proches voisins. L'énergie interne du système pour une distribution de spins  $\{\sigma_i\}$  s'écrit :

$$U(\{\sigma_i\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - H \sum_i \sigma_i \tag{1.1}$$

Où l'énergie de couplage entre les paires de spins ppv est  $J$ , et le champ extérieur est  $H$ . Ce système de spins est mis en contact avec un thermostat à température  $T$ . Le nombre de spins étant conservé, on travaillera dans l'ensemble canonique. Pour éviter des effets de bord le long des côtés du réseau carré, on considère des conditions périodiques. Le réseau est en quelque sorte replié sur lui-même pour former un tore. Ainsi, tous les spins ont bien **4** plus proches voisins (Figure 1.1) [1].

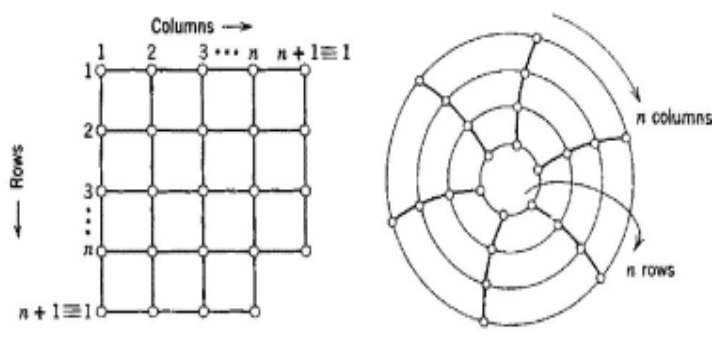


Figure 1.1 : Le réseau carré est replié sur lui-même pour former un tore sur lequel chaque site a exactement 4 voisins

## 2. Modèle d'Ising à une dimension :

C'est le cas le plus simple. 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) [2].

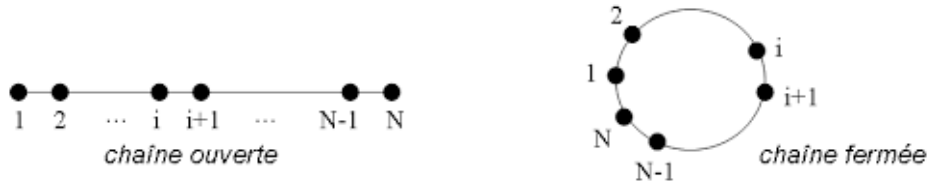


Figure 1.2 : Représentation graphique d'une chaîne du modèle ising

L'hamiltonien d'une chaîne de  $N$  spins en présence d'un champ magnétique extérieur  $h$  s'écrit :

$$H\{\{\sigma_i\}\} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.2)$$

$J$  : le couplage ferromagnétique entre spin sur les sites qui sont des ppv.

$\sum_i \sigma_i = M$  : étant la magnétisation, c'est la somme sur tous les sites.

Pour une chaîne fermée  $\sigma_i = \sigma_{i+N}$  (conditions périodiques) L'Hamiltonien du système va comporter deux termes :

Le premier terme représente l'interaction entre spins les ppv :

$$H_1 = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} \quad (1.3)$$

Le deuxième terme :

$$H_2 = -h \sum_i \sigma_i \quad (1.4)$$

On peut écrire ce dernier terme comme suit :

$$H_2 = -\frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.5)$$

Alors l'Hamiltonien devient :

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - \frac{h}{2} \sum_i (\sigma_i + \sigma_{i+1}) \quad (1.6)$$

## 2.1 Fonction de partition exacte :

La fonction de partition pour  $N$  spin  $\sigma_i$  est par définition s'écrit :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} e^{(-\beta H)} \quad (1.7)$$

Tel que  $\beta = 1/K_B T$ ,  $K_B$  est la constante de Boltzmann D'après l'expression de  $H$  la fonction de partition prend la forme :

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

$$Z = \sum_{\sigma_1=\pm 1} \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N \exp \left[ \beta \left( J \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{1}{2} H(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \right) \right] \quad (1.8)$$

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

$$Z = \sum_{\sigma_1} \sum_{\sigma_2} \dots \sum_{\sigma_N} \langle \sigma_1 | T | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | T | \sigma_3 \rangle \dots \langle \sigma_N | T | \sigma_1 \rangle \quad (1.9)$$

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N} T_{\sigma_1 \sigma_2} T_{\sigma_2 \sigma_3} \dots \dots T_{\sigma_N \sigma_1} = \sum_{\sigma_1} (T^N)_{\sigma_1 \sigma_1} \quad (1.10)$$

C'est-à-dire,  $Z = Tr(T^N)$  avec :

$$T_{\sigma_i \sigma_j} = \exp \left( \beta \left[ J \sigma_i \sigma_j + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_j) \right] \right) \quad (1.11)$$

Les  $T_{\sigma_i \sigma_j}$  peuvent être considérés comme les éléments d'une matrice puisque chaque  $\sigma_i$  peut prendre exactement deux valeurs +1 ou -1.

Cette matrice  $T \in M_2(\mathbb{R})$  est définie de la façon suivante :  $T = \begin{pmatrix} T_{++} & T_{+-} \\ T_{-+} & T_{--} \end{pmatrix}$

Ces éléments sont :

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

Alors  $T = \begin{pmatrix} e^{[\beta(J+h)]} & e^{[-\beta J]} \\ e^{[-\beta J]} & e^{[\beta(J-h)]} \end{pmatrix}$ ,  $T$  appelée la matrice de transfert de dimension 2. Dont chaque élément est un facteur de Boltzmann de l'énergie d'une paire de spins

La matrice  $T$  peut être diagonalisable et les valeurs propres  $\lambda_1$  et  $\lambda_2$  sont les racines du déterminant c-à-d :

$$\det(T - \lambda I) = 0 \quad (1.12)$$

Où  $I$  est la matrice identité.

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

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

La trace de  $T^N$  est la somme des valeurs propre donc la fonction de partition devient :

$$Z = \sum_{\sigma_1} \langle \sigma_1 | T^N | \sigma_1 \rangle = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad (1.13)$$

Les deux valeurs propres de la matrice de transfert  $T$  sont données par :

$$\lambda_{\pm} = e^{(\beta J)} \left[ \cos h(\beta h) \pm \sqrt{\sin^2 h^2(\beta h) + e^{(-4\beta J)}} \right] \quad (1.14)$$

Comme  $\lambda_+ > \lambda_-$ , la fonction de partition est dominée par le terme  $\lambda_+^N$

On obtient :

$$Z = e^{(\beta J N)} \left\{ \left[ \cos h(\beta h) + \sqrt{\sin^2 h^2(\beta h) + e^{(-4\beta J)}} \right]^N + \left[ \cos h(\beta h) - \sqrt{\sin^2 h^2(\beta h) + e^{(-4\beta J)}} \right]^N \right\} \quad (1.15)$$

## 2.2 Energie libre :

Par définition :

$$F(t) = -K_B T \ln Z \quad (1.16)$$

Avec

$$z = \lambda_+^N + \lambda_-^N = \lambda_+^N \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] \quad (1.17)$$

On s'intéresse à la limite thermodynamique. Dans cette limite, l'énergie libre par site s'obtient par :

$$\frac{F}{N} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{-1}{\beta N} \ln Z_N \quad (1.18)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z_N(T, H) = \ln \lambda_+ + \ln \left[ 1 + \left( \frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^N \right] = \ln \lambda_+ \quad (1.19)$$

Puisque on travaille dans la limite où  $N$  est grand, il est commode de faire apparaître le rapport :  $\lambda_-/\lambda_+ < 1$

Alors :

$$F = -NK_B T \ln \lambda_+^N$$

$$F = -Nk_B T \{ \beta J + \ln [ \cosh(\beta h) + \sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(4\beta J)} ] \} \quad (1.20)$$

### 2.3 Aimantation

Pour calculer la magnétisation par site dans le système, on utilise la relation :

$$m = \frac{M}{N} = -\frac{1}{N} \left( \frac{\partial F}{\partial h} \right) \quad (1.21)$$

en remplaçant la valeur de  $F$  dans (0.21) et après développement, on trouve :

$$m = \frac{\sinh(\beta h)}{\sqrt{\sinh^2(\beta h) + \exp(-4\beta J)}} \quad (1.22)$$

Pour produire une magnétisation à température finie, il faut obligatoirement un champ  $h$  non nul. Cela signifie qu'il n'y a pas de transition de phase à une seule dimension. Il n'y a donc aucune singularité dans cette version du modèle. Nous verrons plus loin que les transitions de phase ne peuvent jamais se produire dans les systèmes physiques à une seule dimension.

### 2.4 Susceptibilité

En déduit la susceptibilité magnétique en champ nul par :

$$\chi(h, T) = \left( \frac{\partial m}{\partial h} \right)_{h=0} = \left( -\frac{\partial^2 F}{\partial^2 h} \right) = N\beta e^{2K} \quad (1.23)$$

La susceptibilité reste finie à toute température non nulle. Il ne peut pas apparaître de singularité à température finie et donc pas de transition de phase.

### 2.5 Capacité calorifique

La capacité calorifique est donnée par :

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = \frac{1}{K_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} = \frac{\beta}{T} [\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2] \quad (1.24)$$

### 2.6 Energie moyenne

Elle est donnée par :

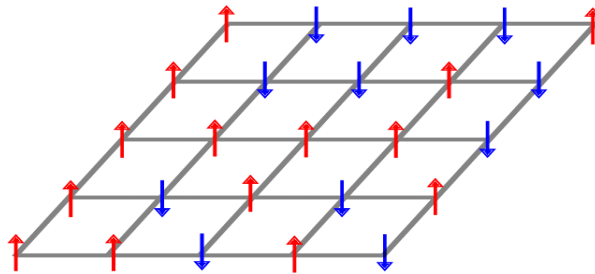
$$E = \sum_s E_s P_s = \sum_s \frac{E_s e^{-\beta E_s}}{Z} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_s e^{-\beta E_s} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.25)$$

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

$$E = -N \left[ J + \frac{h \sin(\beta h)}{\sqrt{\sin^2(\beta h) + e^{-4\beta J}}} - \frac{2J e^{-4\beta J}}{\sqrt{\sin^2(\beta h) + e^{-4\beta J} (\cos(\beta h) + \sqrt{\sin^2(\beta h) + e^{-4\beta J}})}} \right] \quad (1.26)$$

### 3. Modèle d'Ising en deux dimensions :

La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel a été donnée pour la première fois par le chimiste *Lars Onsager*.



**Figure 1.3** 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 noir).

Considérons un réseau régulier carré dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs  $\pm 1$ . Il est géré par l'Hamiltonien :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (1.27)$$

Où  $\langle i, j \rangle$  désigne une somme sur les sites qui sont les ppv, et  $J$  le paramètre d'interaction.

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

Chaque spin prend deux valeurs ( $\pm 1$ ) (deux états, *up* et *down*), on aura donc  $2^N$  états pour un réseaux de  $N$  spins.

#### 3.1 La fonction de partition

Le calcul analytique (L. Onsager) étant complexe, nous reporterons ici seulement le résultat en champ nul et à la limite thermodynamique. La fonction de partition  $Z$  s'écrit [3]:

$$Z = \sum_{\sigma_i = \pm 1} e^{-\beta h} \quad (1.28)$$

Selon la solution exacte d'Onsager, on a :

$$Z = (2 \cos h (2\beta J) \exp I)^N \quad (1.29)$$

Et  $I$  l'intégral elliptique de la forme suivante :

$$I = \int_0^{\pi/2} d\varphi \ln \frac{1+(1-x^2 \sin^2 \varphi)^{1/2}}{2} \quad \text{Tel que : } x = 2 \frac{\sin h(2\beta j)}{\cos h^2(2\beta j)}$$

$x$  est une fonction de  $T$  qui s'annule pour  $T = 0$  et  $= \infty$ . Pour  $J$  et  $T$  positives  $x$  est aussi positive et continue, le paramètre  $x$  présente un maximum à  $T = T_c$  (température critique).[4]

### 3.2 L'énergie libre

La relation de l'énergie libre pour un champ nul ( $\mathbf{h} = \mathbf{0}$ ) s'écrit :

$$\begin{aligned} F(t) &= -k_\beta T \ln Z \\ &= -k_\beta T \ln[(2 \cos h(2\beta j) \exp I)^N] \\ &= -NK_\beta T \ln[2 \cos h(2\beta j)] - NK_\beta T \int_0^{\pi/2} d\varphi \left[ \frac{1}{2} (1 + (1 - x^2 \sin^2 \varphi))^{1/2} \right] \end{aligned} \quad (1.30)$$

### 3.3 L'aimantation

Le système d'ising sur un réseau carré présente une transition de phase à  $T = T_c$  (température critique), et en absence d'un champ magnétique ( $\mathbf{h} = \mathbf{0}$ )

L'aimantation spontanée est donnée par :

$$m(t) = \begin{cases} (1 - [\sin h\beta J]^{-4})^{1/8} & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases} \quad (1.31)$$

Au-delà de cette température critique exacte, la magnétisation s'annule brutalement.

$$T_c = \frac{2J}{k_\beta \ln(1 + \sqrt{2})} \approx \frac{2.269185J}{k_\beta} \quad (1.32)$$

Lorsque  $T < T_c$ , la magnétisation par spin  $m$  varie comme

$$m \sim (T_c - T)^\beta \quad (1.33)$$

Avec un exposant  $\beta = 1/8$ .

### 3.4 La Susceptibilité magnétique

Selon la solution exacte d'Onsager on a :

$$\chi = \frac{1}{V} \frac{\partial M}{\partial h} \quad (1.34)$$

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

$$\chi = \frac{1}{kT} \int d^3r [\langle m(r)m(0) - \langle m(0) \rangle^2 \rangle] \quad (1.35)$$

La susceptibilité magnétique diverge quand  $T \rightarrow T_c$

$$\chi \sim (T_c - T)^{-\gamma} \equiv (T_c - T)^{-7/4}$$

### 3.5 La capacité calorifique

La capacité calorifique peut être défini :

$$C = -\frac{1}{K_B T^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (1.36)$$

$$C \approx -Nk \frac{2}{\pi} \left( \frac{2J}{kT_C} \right)^2 \ln \left| 1 - \frac{T}{T_C} \right| + \text{constant} \quad (T \text{ près } T_C) \quad (1.37)$$

Une propriété importante de la solution " Onsager " est que la capacité thermique diverge logarithmiquement à  $T = T_C$  :

$$C(t) \sim -\ln \epsilon \quad (1.38)$$

Où la différence de température réduite est donnée par :  $\epsilon = \frac{(T_C - T)}{T_C}$

### 3.6 L'énergie moyenne

L'énergie moyenne est donnée par :  $E = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta}$

$$E = -2NJ \tan h(2J\beta) - 2NJ \frac{(\sin h^2(2J\beta) - 1)}{\sin h(4J\beta)} \left[ \frac{2}{\pi} k_1(x) - 1 \right] \quad (1.39)$$

Où :

$$k_1(x) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - k^2 \sin^2 \varphi}} E$$

$k_1$  est connu comme l'intégrale elliptique complète du premier type.

### 4. L'approximation de champ moyen

En dimensions 1 et 2 le problème est résoluble même si les calculs permettant de parvenir à la solution sont un peu techniques. Mais à partir de la dimension 3, le problème n'est toujours pas résolu. Une idée de Weiss en 1907 consiste à admettre que, en première approximation, chaque spin est soumis au champ moyen de tous les autres. Cette hypothèse se traduit en remplaçant dans chaque couple  $\sigma_i \sigma_j$  l'un des spins par sa valeur moyenne  $\langle \sigma \rangle$ , Pour que cette démarche soit valable, il est nécessaire que les fluctuations par rapport à la valeur moyenne soient petites. [5]

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= (\sigma_i - \langle \sigma_i \rangle)(\sigma_j - \langle \sigma_j \rangle) + \sigma_i \langle \sigma_j \rangle + \sigma_j \langle \sigma_i \rangle - \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle \\ &\approx -m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j) + (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) \end{aligned} \quad (1.40)$$

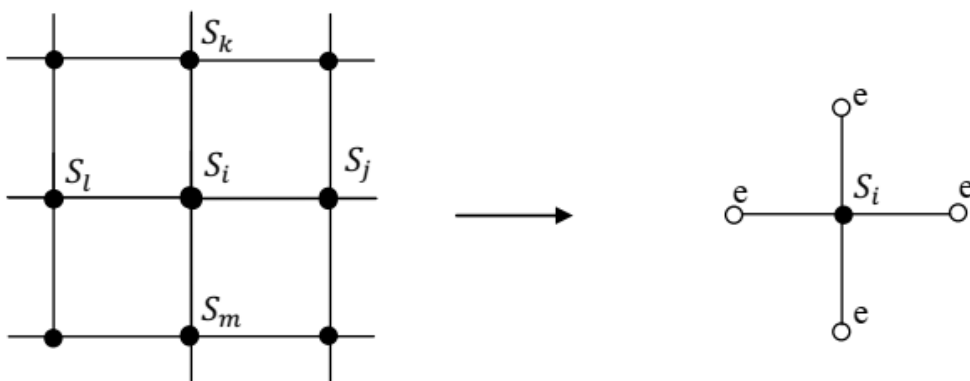


Figure 1.4 : Principe de l'approximation du champ moyen

Notons que  $m = \langle \sigma \rangle$  Dans ces conditions, l'Hamiltonien de champ moyen s'écrit [6]:

$$\begin{aligned}
 H &= -J \sum_{(i,j) \in V} \left( -m^2 + m(\sigma_i + \sigma_j) \right) - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\
 &= \frac{1}{2} JqNm^2 - \frac{Jm}{2} \left( \sum_{i=1}^N \sum_{(i,j) \in V} \sigma_i + \sum_{j=1}^N \sum_{(i,j) \in V} \sigma_j \right) - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \\
 &= \frac{1}{2} JqNm^2 - (h + qJm) \sum_{i=1}^N \sigma_i
 \end{aligned} \tag{1.41}$$

Où  $q$  est l'indice de coordination, autrement dit le nombre de voisins de chaque site.

Avec  $\frac{1}{2} JqNm^2$  est négligé donc :

$$H_{CM} = -(qJm + h) \sum_{i=1}^N \sigma_i \tag{1.42}$$

#### 4.1 La Fonction de partition

Elle est donnée par :

$$Z_{CM} = e^{-\beta H_{CM}} \tag{1.43}$$

On fait la somme sur tous les états de spin :

$$\begin{aligned}
 Z_{CM} &= e^{-\beta \frac{q}{2} JNm^2} \sum_{\sigma_i} e^{\beta (Jqm+h) \sum_i \sigma_i} \\
 &= e^{-\beta \frac{q}{2} JNm^2} \underbrace{\sum_{\sigma_1=\pm 1} \sum_{\sigma_2=\pm 1} \dots \dots \dots \sum_{\sigma_N=\pm 1} \prod_{i=1}^N e^{\beta (Jqm+h) \sigma_i}}_{N \text{ blocs indépendants et similaires}} \\
 &= e^{-\beta \frac{q}{2} JNm^2} \left[ \sum_{\sigma_i=\pm 1} e^{\beta (Jqm+h) \sigma_i} \right]^N \\
 &= e^{-\beta \frac{q}{2} JNm^2} \left[ 2 \cosh(\beta (Jqm + h)) \right]^N
 \end{aligned} \tag{1.44}$$

#### 4.2 L'énergie libre

L'énergie libre dans cette approximation est donnée par :

$$\begin{aligned}
 F(T) &= -K_B T \ln Z \\
 &= \frac{1}{2} JqNm^2 - NK_B T \ln [2 \cosh \beta (Jqm + h)]
 \end{aligned} \tag{1.45}$$

#### 4.3 L'aimantation

Elle est donnée par :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial H} \tag{1.46}$$

Donc en dérivant l'expression de  $F$  :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial \left\{ \frac{1}{2} JqNm^2 - NK_B T \ln [2 \cosh \beta (Jqm + h)] \right\}}{\partial H} \tag{1.47}$$

On obtient l'équation d'auto cohérence :

$$m = \tanh[\beta(Jqm + h)] \quad (1.48)$$

L'équilibre thermodynamique, caractérisé par le minimum de l'énergie libre  $F$  conduit à l'équation fondamentale de la théorie de champ moyen fournissant l'équation d'état de la substance ferromagnétique

$$\frac{\partial F}{\partial m} = 0 \Rightarrow m = \tanh(\beta Jqm) \quad (1.49)$$

**Solution graphique de l'équation auto-cohérente :**

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

Si  $h = 0$ , il y a deux cas :

$\beta Jq > 1$ : il y a deux solutions (symétriques) en plus de  $m = 0$  (courbe en bleu)

$\beta Jq < 1$ : La seule solution est  $m = 0$  (courbe en vert)

L'équation (1.49) est une équation transcendante que l'on peut résoudre graphiquement. Ainsi, comme le montre, les solutions de cette équation de la température font apparaître l'existence d'une transition pour la température critique  $T_c$  définie par  $:KT_c = qJ$

Si  $T > T_c$ , l'équation d'état admet une unique solution pour le paramètre d'ordre :  $m=0$

Si  $T < T_c$ , l'équation d'état possède une solution nulle et deux solutions non nulles et opposées. Cependant, en utilisant la contrainte sur l'énergie libre, seule les deux solutions non nulles correspondent à une situation d'équilibre. [7]

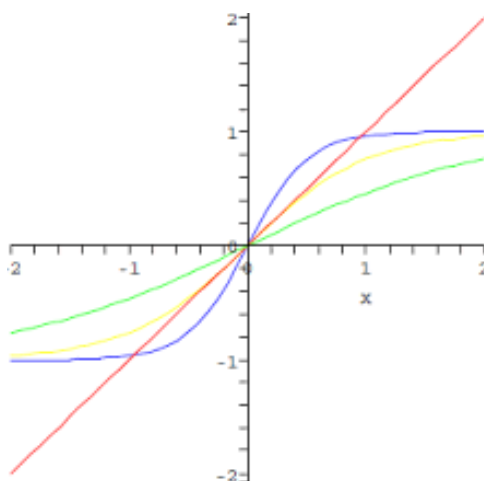


Figure 1.5 : résolution graphique de l'équation auto cohérente avec  $j=1$ ,  $q=6$ ,  $h=0$

#### 4.4 Susceptibilité

La susceptibilité par spin est donnée par :

$$\chi = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\partial m}{\partial h} \quad (1.50)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1 - \tan^2 h^2 (Jqm/kT)}{kT - Jq(1 - \tan^2 h^2 (Jqm/kT))} \\
&= \frac{1 - m^2}{kT - Jq(1 - m^2)}
\end{aligned}$$

Pour  $T > T_C$  nous avons  $m = 0$  et  $\chi$  dans (0.50) se réduit :

$$\chi = \frac{1}{k(T - T_C)} \quad ; \quad (T > T_C, h = 0) \quad (1.51)$$

Pour  $T < T_C$  nous avons ça ( ) :

$$\begin{cases} m^2 \approx 3(T_C - T)/T_C \\ (1 - m^2) = (3T - 2T_C)/T_C \end{cases} \quad (1.52)$$

On obtient :

$$\begin{aligned}
\chi &= \frac{1}{k[T - T_C(1 - m^2)]} \\
&= \frac{1}{k[T - 3T + 2T_C]}
\end{aligned} \quad (1.53)$$

D'où :

$$\chi = \frac{1}{2k(T_C - T)} \quad ; \quad (T \leq T_C, h = 0) \quad (1.54)$$

On obtient donc une divergence de la susceptibilité magnétique au point critique. De plus, on a un comportement symétrique

$$\chi(0, T) \sim |T_C - T|^{-\gamma} \quad (1.55)$$

Avec un exposant = **1** .

#### 4.5 Capacité calorifique

On déduit la capacité à partir de la dérivée de l'énergie :

$$C_V = \frac{\partial e}{\partial T} = \frac{Jq}{2} \frac{\partial m^2}{\partial T} \quad (1.56)$$

Au voisinage de  $T = T_C$ ,  $m$  est très petit on peut donc développer l'équation auto-cohérente :

$$\tan h x \approx x - \frac{x^3}{3} \quad (1.57)$$

Injectons  $x$  dans le développement on obtient :

$$m = \beta(jqm + h) - \beta^3 \frac{(jqm + h)^3}{3} \quad (1.58)$$

Quand ( $h = 0$ ) en absence de champ magnétique extérieur on tire  $m$ :

$$\begin{aligned}
m &= \beta jqm - \frac{\beta^3 j^3 q^3 m^3}{3} \\
\Rightarrow m^2 &\approx \frac{3(\beta jq - 1)}{\beta^3 j^3 q^3}
\end{aligned} \quad (1.59)$$

$$m^2 \approx \frac{3\left(\frac{T_C}{T} - 1\right)T^3}{T_C^3} \approx 3\left(1 - \frac{T}{T_C}\right) \quad (1.60)$$

$$\begin{cases} T < T_c, & c_v = \frac{3k_b}{2} \\ T > T_c, & c_v = 0 \end{cases} \quad (1.61)$$

#### 4.6 Energie moyenne

L'énergie moyenne par site est donnée par :

$$e = \frac{E}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \quad (1.62)$$

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 + \tan \beta (Jqm + h) + \frac{\partial m}{\partial \beta} [-\beta Jqm + \beta Jq \tanh(Jqm + h)] \quad (1.63)$$

or il est facile de vérifier l'identité :

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial m} = -\beta Jqm + \beta Jq \tanh(Jqm + h) \quad (1.64)$$

On remplace dans l'équation (1.63), on obtient :

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 + \tan \beta (Jqm + h) + \frac{\partial \ln Z}{\partial m} \frac{\partial m}{\partial \beta} \quad (1.65)$$

L'équation auto-cohérente permet d'éliminer la **tan h** et l'énergie libre ( $F = -K_B T \ln Z$ ) stationnaire par rapport à  $m$ , alors le second terme s'annule donc :

$$e = -J \frac{q}{2} m^2 \quad (1.66)$$

## Chapitre 2. Simulation de monte Carlo et algorithme de Métropolis

### 1. Introduction :

La méthode de Monte Carlo (MC) Metropolis a été introduite en physique de la matière condensée par Metropolis et coll. en 1953 Elle est basée sur l'utilisation de nombres aléatoires, C'est-à-dire des techniques probabilistes. La simulation de Monte Carlo est une classe très importante de méthodes stochastiques pour calculer les propriétés thermiques des systèmes à plusieurs particules ce sont sans doute les techniques numériques les plus importantes en physique statistique. Les méthodes de simulation de Monte Carlo sont liées aux méthodes d'intégration élémentaire, mais qui sont basées sur un échantillonnage non uniforme plus efficace régimes. En utilisant l'échantillonnage d'importance, les configurations (positions des particules, directions de spin, etc...) d'un système à plusieurs corps fini peuvent être générées selon la distribution de Boltzmann, de sorte que les valeurs moyennes thermiques sont obtenues en tant que moyennes arithmétiques des fonctions mesurent « de la configurations » [8]

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 :

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

Ou  $Z(T)$  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 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. Pour illustrer simplement les avantages de l'échantillonnage MC non uniforme, considérons une intégrale unidimensionnelle similaire à une valeur d'attente thermique en physique statistique (la discussion ici peut être directement généralisé aux intégrales multidimensionnelles)

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

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

Où  $\mathbf{P}(\mathbf{x})$  est une distribution de probabilité arbitraire. En échantillonnant au hasard  $M$  points  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_M$  dans l'intervalle la valeur moyenne est estimée à :

$$\langle A \rangle \approx \frac{2L}{M} \sum_{i=1}^M P(x_i) A(x_i) \quad (2.3)$$

Si  $\mathbf{P}(\mathbf{x})$  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 échantillonnons plutôt les points selon une distribution de probabilité  $\mathbf{W}(\mathbf{x})$ , à savoir la probabilité de choisir un point dans un intervalle infiniment  $[\mathbf{x}, \mathbf{x} + d\mathbf{x}]$ , l'estimation de la valeur moyenne est :

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

Les fluctuations statistiques ici sont moins que l'estimation (2.3) de l'échantillonnage uniforme si  $\mathbf{W}(\mathbf{x})$  est culminé dans la même région que  $\mathbf{P}(\mathbf{x})$  et si la fonction  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  est régulière dans le sens d'être raisonnablement lisse et pas très petite où  $\mathbf{P}(\mathbf{x})$  est grand et vice versa.

Il est impossible dans la pratique pour trouver  $\mathbf{W}(\mathbf{x})$  optimale qui minimise les fluctuations, une très bonne solution est d'utiliser  $\mathbf{W}(\mathbf{x}) = \mathbf{P}(\mathbf{x})$ , la valeur moyenne est alors juste simple moyenne arithmétique de  $\mathbf{A}(\mathbf{x})$  par rapport à la configuration échantillonnée :

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

En physique statistique,  $\mathbf{P}$  est une fonction exponentielle fortement culminé  $e^{-E/K_B T}$  et de l'énergie  $\mathbf{A}$  est typiquement une fonction polynomiale linéaire ou d'ordre inférieur des degrés de liberté du système. Les fluctuations de  $\mathbf{P}$  sont donc très importantes par rapport à ceux de  $\mathbf{A}$  et dans l'échantillonnage en utilisant comme la distribution de probabilité elle 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 MC est dans les études des transitions de phase et les phénomènes critiques.

## 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.

### 2.1 Particules dans l'espace continu :

Un système de  $N$  particules, avec des coordonnées de position  $\mathbf{x}_i$  et  $\mathbf{p}_i$  impulsions dans un espace en  $d$ -dimensions, la valeur moyenne  $\mathbf{A}$  d'une grandeur thermique pour ce système à la température  $T$  est donnée par :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d A(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) e^{-H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/K_B T} \quad (2.6)$$

Où  $Z$  est la fonction de partition :

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d \int \prod_{i=1}^N dp_i^d A(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) e^{-H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\})/K_B T} \quad (2.7)$$

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

$$H(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i=1}^N U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j} V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \quad (2.8)$$

Si l'observable  $A$  est indépendante de la vitesse (une fonction que des positions  $\mathbf{x}_i$ ), les intégrales de moment s'annulent en (2.6), conduisant à

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \int \prod_{i=1}^N dx_i^d A(\{\vec{x}_i, \vec{p}_i\}) e^{E(\{\vec{x}_i\})/K_B T} \quad (2.9)$$

$$Z = \int \prod_{i=1}^N dx_i^d e^{E(\{\vec{x}_i\})/K_B T} \quad (2.10)$$

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

$$E_p(\{\vec{x}_i\}) = \sum_{i=1}^N U(\vec{x}_i) + \sum_{i \neq j} V(\vec{x}_i, \vec{x}_j) \quad (2.11)$$

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

$$K_i = \left\langle \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d \frac{p_i^2}{2m} e^{-\frac{p_i^2}{2mK_B T}} \quad (2.12)$$

$$Z_p = \frac{1}{Z_p} \int dp_i^d e^{-\frac{p_i^2}{2mK_B T}} \quad (2.13)$$

Etant donné que toutes les intégrales sauf ceux sur  $\vec{p}_i$  sont nulles. Le théorème d'équipartition est :

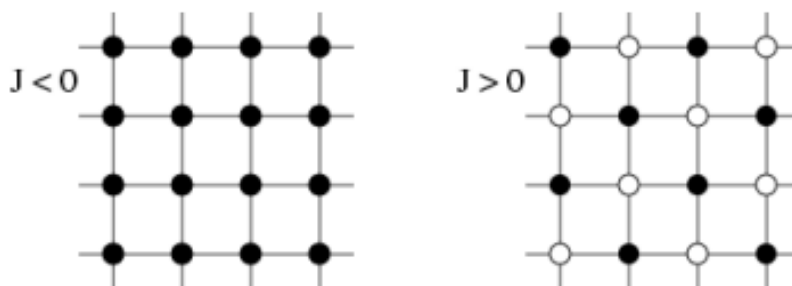
$$K_i = \frac{d}{2} K_B T \quad (2.14)$$

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 MC, 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 le plus simple des modèles sur réseaux, qui est le modèle d'Ising.

## 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 d'Ising, dans lequel les spins ont seulement deux orientations possibles le long d'un axe choisi ; "haut" ou "bas".



**Figure 2.1** : États-basse énergie du modèle d'Ising bidimensionnel avec interactions ferromagnétiques (à gauche) et interactions antiferromagnétiques (à droite). 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 les plus proches voisins.

Les degrés de liberté sont les spins  $\sigma_i = \pm 1$ , l'énergie est :

$$E = \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (2.15)$$

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 (anisotropie uni-axiale), par exemple, seulement,  $\sigma_i^Z \sigma_j^Z$  peut devoir être pris en considération. Considérant seulement les interactions entre ppv, l'énergie est (en absence de champ) :

$$E = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.16)$$

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

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} A(\sigma) e^{-E(\sigma)/T} \quad (2.17)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-E(\sigma)/T} \quad (2.18)$$

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 ( $J > 0$ ), 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). En dimensions  $d > 1$ , 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 :

$$m = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (2.19)$$

### 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 :

$$\langle A \rangle = \sum_{\sigma} P(C_i) A(C_i) \quad (2.20)$$

$$P(C_i) = \frac{1}{Z} e^{-E(C_i)/T} \quad (2.21)$$

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 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 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  $\mathbf{C}_{i(k)}$  à  $\mathbf{C}_{i(k+1)}$  ne dépend pas de la façon dont nous sommes arrivés à  $\mathbf{C}_i(\mathbf{k})$  (son histoire). Nous allons discuter des conditions sur les probabilités de transition  $\mathbf{P}(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)$  pour la distribution désirée  $\mathbf{P}(\mathbf{C})$  à atteindre. Il convient de noter que  $\mathbf{P}$  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 de considéré un ensemble d'un grand nombre de configurations. Si cet ensemble est distribué selon  $\mathbf{P}$ , alors le nombre  $N_0(\mathbf{C}_i)$  configurations  $\mathbf{C}_i$  dans l'ensemble est proportionnel à  $\mathbf{P}(\mathbf{C}_i)$ . A un moment donné (étape), nous appliquons un certain régime pour changer (mise à jour) les configurations, avec la probabilité de changer  $\mathbf{C}_i$  à  $\mathbf{C}_j$  noter  $(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)$ . Le nombre de configurations  $\mathbf{C}_i$  après mise à jour des toutes les configurations sont :

$$N_1(\mathbf{C}_i) = N_0(\mathbf{C}_i) + \sum_{j \neq i} [N_0(\mathbf{C}_j)P(\mathbf{C}_j \rightarrow \mathbf{C}_i) - N_0(\mathbf{C}_i)P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)] \quad (2.22)$$

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

$$\sum_{j \neq i} [N_0(\mathbf{C}_j)P(\mathbf{C}_j \rightarrow \mathbf{C}_i) - N_0(\mathbf{C}_i)P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)] = 0 \quad (2.23)$$

Et puisque  $N_0(\mathbf{C}_i) \propto \mathbf{P}(\mathbf{C}_i)$ :

$$\sum_{j \neq i} [P(\mathbf{C}_j)P(\mathbf{C}_j \rightarrow \mathbf{C}_i) - P(\mathbf{C}_i)P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)] = 0 \quad (2.24)$$

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

$$P(\mathbf{C}_j)P(\mathbf{C}_j \rightarrow \mathbf{C}_i) - P(\mathbf{C}_i)P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j) = 0 \quad (2.25)$$

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

$$\frac{P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)}{P(\mathbf{C}_j \rightarrow \mathbf{C}_i)} = \frac{P(\mathbf{C}_j)}{P(\mathbf{C}_i)} \quad (2.26)$$

Dans la mécanique statistique la probabilité des configurations  $\mathbf{P}(\mathbf{C}_i)$  est donnée par :

$$P(\mathbf{C}_i) = \frac{1}{Z} W(\mathbf{C}_i) \quad (2.27)$$

$$W(\mathbf{C}_i) = e^{-E(\mathbf{C}_i)/T} \quad (2.28)$$

Où  $W(\mathbf{C}_i)$  est désigné comme étant le poids de la configuration, la fonction de partition disparaît dans le rapport sur le côté droit de ces équations. on peut aussi écrire :

$$\frac{P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)}{P(\mathbf{C}_j \rightarrow \mathbf{C}_i)} = \frac{W(\mathbf{C}_j)}{W(\mathbf{C}_i)} \quad (2.29)$$

La probabilité de transition  $P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)$  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  $\sigma$ ) et l'autre pour exercer effectivement le changement (accepter). Nous écrivons donc :

$$P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j) = P^{\text{attempt}}(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)P^{\text{accept}}(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j) \quad (2.30)$$

Il est souvent le cas, car la probabilité d'une tentative  $P^{\text{attempt}}(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)$  de chacune des mises à jour possibles trivialement est uniforme, à savoir  $P(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j) = \text{const.}$ , indépendante de  $\mathbf{i}, \mathbf{j}$ . Cette partie de la probabilité de transition tombe alors sur la condition de bilan détaillé (2.29) et on se retrouve avec une condition bilan détaillé pour les probabilités d'acceptation :

$$\frac{P^{\text{accept}}(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)}{P^{\text{accept}}(\mathbf{C}_j \rightarrow \mathbf{C}_i)} = \frac{W(\mathbf{C}_j)}{W(\mathbf{C}_i)} \quad (2.31)$$

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

$$P^{\text{accept}}(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j) = \min \left[ \frac{W(\mathbf{C}_j)}{W(\mathbf{C}_i)}, 1 \right] \quad (2.32)$$

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 (3.30). Pour déterminer si ou non la mise à jour sera acceptée lorsque  $P(\mathbf{C}) < 1$ , la probabilité d'acceptation peut être comparé avec un pseudo-nombre (random number)  $r \in [0, 1]$ , si  $r < P^{\text{accept}}(\mathbf{C}_i \rightarrow \mathbf{C}_j)$  la mise à jour est acceptée, et sinon elle est rejetée. Si une mise à jour est rejetée, l'ancienne  $\mathbf{C}_i$  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 Métropolis. Une autre probabilité d'acceptation souvent utilisé avec l'algorithme de Métropolis est :

$$p^{accept}(C_i \rightarrow C_j) = \frac{W(C_j)}{W(C_i) + W(C_j)} \quad (2.33)$$

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

$$p^{accept}(C_{j(k)}) = \frac{W(C_{j(k)})}{\sum_{l=1}^m W(C_{j(l)})} \quad (2.34)$$

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  $l = 1, \dots, m$  est toujours choisi, selon les probabilités ci-dessus.

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

Dans le cas du modèle d'ising une mise à jour de la configuration revient à sélectionner un spin au hasard et à le retourner avec probabilité  $p^{accept}(C_i \rightarrow C_j)$ . Lors de la mise à jour d'une Configuration Ising  $C \rightarrow C'$ , en inversant n'importe quel nombre de tours, le rapport de poids  $w(C')/w(C)$  dans le la probabilité d'acceptation est donnée explicitement par :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[ -\frac{J}{T} \sum_{\langle i,j \rangle} (\sigma'_i \sigma'_j - \sigma_i \sigma_j) + \frac{h}{T} \sum_i (\sigma'_i - \sigma_i) \right] \quad (2.35)$$

Où  $\{\sigma'_i\}$  sont les spins de la configuration mise à jour. En retournant un seul spin  $J$ , nous obtenons :

$$\frac{W(C')}{W(C)} = \exp \left[ \frac{2J}{T} \sigma_j \left( \sum_{\delta[j]} \sigma_{\delta[j]} - \frac{h}{J} \right) \right] \quad (2.36)$$

Où  $\delta[j]$  désigne un ppv du site  $J$  (qui sont  $2d$  sur un réseau cubique de dimension  $d$ ). A cause du critère d'acceptation / rejet on, fait à comparer le rapport ci-dessus avec un nombre aléatoire  $0 \leq r < 1$ , ces rapports peuvent être utilisés directement sans prendre le minimum avec 1, ce qui est requis dans la probabilité effective (2.32).

#### 5. Mesure des observables physiques :

Une grandeur d'intérêt naturel dans le cadre du modèle d'Ising ferromagnétique est la magnétisation, qui est le paramètre d'ordre de la transition de phase se produisant à une température  $T_c > 0$  en deux et trois dimensions. On note  $M$  la magnétisation complète et par  $m$  la grandeur normalisée :

$$M = \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad ; \quad m = \frac{M}{N} \quad (2.37)$$

Puisque 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 mesuré  $\langle m \rangle \neq 0$ . Il est mieux de mesurer  $\langle |m| \rangle$  ou  $\sqrt{\langle m^2 \rangle}$

puisque, dans la limite thermodynamique elle égale  $\langle m \rangle = 0$  de symétrie brisée. Une autre quantité de grand intérêt est la susceptibilité magnétique, définie comme :

$$\chi = \frac{d\langle m \rangle}{dh} = \frac{1}{N} \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle |M| \rangle^2) \quad (2.38)$$

Une autre quantité très importante est la capacité calorifique (ou chaleur spécifique) qui est donnée par :

$$C = \frac{1}{N} \frac{dE}{dT} = \frac{1}{N} \frac{d}{dT} \sum_C E(C) e^{-E(C)/T} = \frac{1}{N} \frac{1}{T} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (2.39)$$

Comme la susceptibilité, la capacité calorifique diverge au point de la transition de phase ferromagnétique.

## Chapitre 3. Dynamique 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 retournés 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 ( $\frac{1}{2}$  ou 1 selon la formulation). Nous considérons ici seulement le cas du champ magnétique nul ( $h = 0$ )

### 2. Algorithme de Swendsen-Wang

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

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

Avec  $|J| > 0$  est la constante d'interaction ferromagnétique. On utilise les énergies de liaison  $E_b$ , nous pouvons écrire la fonction de partition comme

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

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

$$\begin{cases} F_b(0) = 1 \\ F_b(1) = e^{-E_b/T} - 1 \end{cases}$$

Et écrire la fonction de partition comme

$$Z = \sum_{\sigma} \prod_{b=1}^{N_b} [F_b(0) + F_b(1)] \quad (3.3)$$

Nous introduisons maintenant un ensemble de variables  $\tau_b = \pm 1$  de liaison auxiliaire, 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  $\sigma$ . Nous pouvons maintenant écrire  $Z$  comme somme sur des spins et des liens :

$$Z = \sum_{\sigma} \sum_{\tau} \prod_{b=1}^{N_b} F_b(\tau_b) \quad (3.4)$$

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

$$F_b(0) = 1, \text{ indépendant de } \sigma_{i(b)}, \sigma_{j(b)} \quad (3.5)$$

$$F_b(1) = e^{E_b/T} - 1 = \begin{cases} e^{2J|/T} - 1, & \text{if } \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \\ 0 & , \text{if } \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \end{cases} \quad (3.6)$$

Pour une contribution non nulle à la fonction de partition (3.3), 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 (3.3) est :

$$P(\sigma, \tau) = \prod_{b=1}^{N_b} F_b(\tau) \quad (3.7)$$

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

$$P(\sigma, \tau) = (e^{2J|/T} - 1)^{N_1} \quad (3.8)$$

Où  $N_1$  est le nombre d'obligations remplies. Par conséquent, la configuration de rotation n'affecte le poids qu'imposera 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 (3.8). Pour une configuration de spin donnée, nous définissons la probabilité d'une configuration de liaison correspondant au poids (3.8) :

$$P(\tau) = \prod_b P_b(\tau_b) \quad (3.9)$$

Où la probabilité de lien individuel :

$$P(\tau_b) = \frac{F_b(\tau_b)}{F_b(0) + F_b(1)} \quad (3.10)$$

La probabilité d'une liaison remplie est donc :

$$P(\tau_b = 1) = 1 - e^{-2|J|/T}, \quad \sigma_{i(b)} = \sigma_{j(b)} \quad (3.11)$$

$$P(\tau_b = 1) = 0, \quad \sigma_{i(b)} \neq \sigma_{j(b)} \quad (3.12)$$

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 4. Résultats des mesures numériques et discussion

### 1. Caractéristiques des systèmes à simuler

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

Nous avons utilisé dans les simulations MC l'algorithme des clusters de Swendsen-Wang.

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

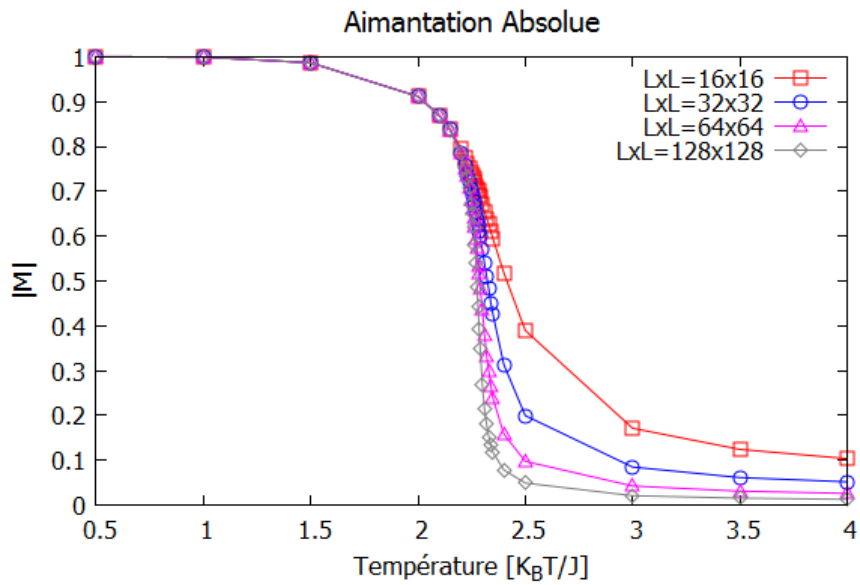
### 2. Présentation des résultats

Nous avons calculé l'aimantation absolue moyenne par site  $|m| = |\langle \sigma \rangle|$  par la dynamique de des clusters de Swenden-Wang pour des réseaux de tailles indiqué précédemment, les résultats sont illustrés dans les Figures ci-dessous (Fig. 4.1).

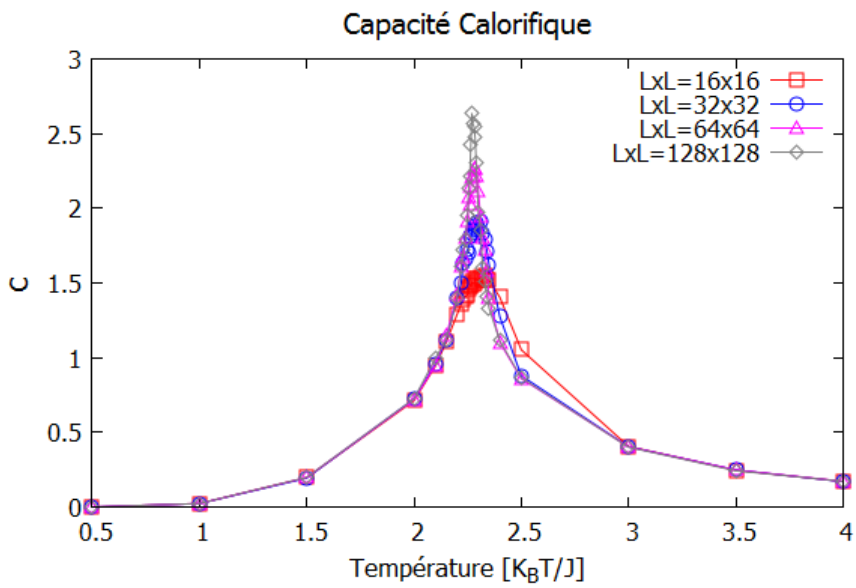
Nous avons obtenus la capacité calorifique  $C = \frac{1}{N} \frac{dE}{dT} = \frac{1}{N T} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$  par la distribution de l'ensemble des pas MC sur des bins (ici on a préféré de prendre 10 bins, en général, dans les simulations MC le nombre de bins préférable varie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

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

Les simulations montrent que la capacité calorifique diverge aux alentours de la température critique, les résultats de simulations montrent que plus le système est large plus la divergence de la capacité calorifique est rapide aux alentours de la température critique, et plus le système est large plus la température de divergence est très proche de celle d'Onsager ;  $T_c = 2/\ln(1 + \sqrt{2}) \cong 2.269$ , qui correspond à un système de taille infinie (Fig. 4.2), ce qui reflète l'effet de taille.

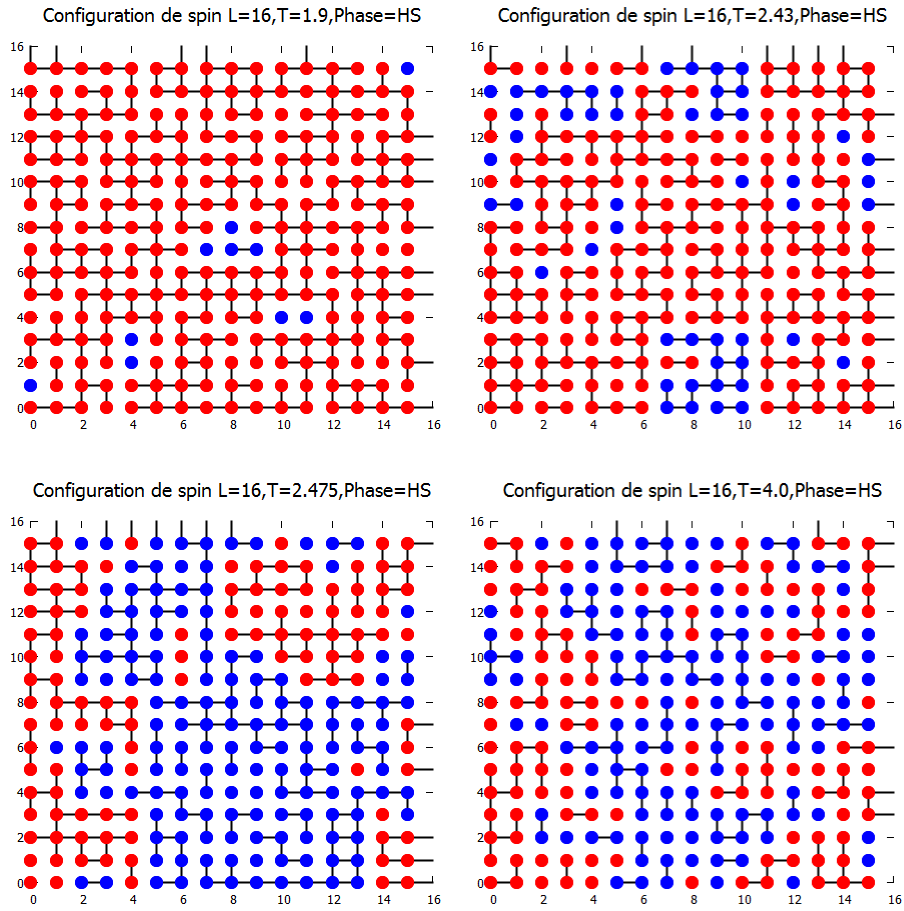


**Figure 4.1 :** Etats-basses Aimantation absolu en fonction de la température pour un réseau carré de taille  $L=16, 32, 64$  et  $128$ .  $L=16, 32$  et  $64$  respectivement.



**Figure 4.2 :** Capacité calorifique en fonction de la température pour un réseau carré de taille  $L=16, 32, 64$  et  $128$ .

Nous avons aussi mis en évidence la configuration finale du système pour quelques valeurs des températures (Fig. 4.3).



**Figure 4.3 :** 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.

## ***Conclusion***

Nous avons étudié, dans ce mémoire, le modèle d'Ising bidimensionnel par les techniques des simulations de MC en utilisant la dynamique des clusters de Swendsen-Wang, où nous avons mesurés l'aimantation absolue du modèle et la capacité calorifique.

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

Les résultats de simulations montrent que la capacité calorifique diverge aux alentours de la température de transition de phase, plus le système est large plus la divergence de la capacité calorifique est rapide aux alentours de cette température, et plus le système est large plus la température de divergence est très proche de celle d'Onsager, qui correspond à un système de taille infinie

## ***RÉFÉRENCES***

1. Nicolas Vandewalle et Stephane Dorbolo. *Introduction à la Physique Statistique*. Université de Liège (2006).
2. Ismail ZERGOUG. *Modèle d'Ising dilué*. p. 20. (2015).
3. Gulminelli Francesca. *Mécanique statistique des transitions de phase*. Caen, France (2007).
4. Harvey Gould and Jan Tobochnik. Magnetic Systems. *Thermal and Statistical Physics*. (2015).
5. P. De Los Rios. *physique statistique iii*. (2008).
6. Julie Fraval. *Modèle d'Ising*. Juin 2018.
7. Vincent Pouthier. *introduction aux phenomenes critiques*. : notes de cours DEA.
8. Anders W. Sandvik, *Monte Carlo simulations in classical statistical physics*. S. Boston University (2013).

## 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 la capacité calorifique.

## ملخص

درسنا نموذج ايزينغ ثنائي الابعاد بواسطة محاكاة مونت كارلو عبر ديناميكيات مجموعات سواندسنغ وانغ حيث قمنا بقياس المغنطة المطلقة للنظام و السعة الحرارية.