PHQ404 - Devoir 4

Théo Lenoir (lent1201) - Yuhao Dong

1 Introduction

On s'intéresse ici à une grille 32x32 de spins, chacun pouvant être orienté en haut ou en bas. Chaque spin va intéragir directement avec ses voisins les plus proches, selon l'énergie suivante :

$$H(s) = -\sum_{<i,j>} s_i s_j \tag{1}$$

Le but de ce devoir est d'étudier les configurations de cette grille de spins au travers du modèle d'Ising et de l'algorithme de Metropolis. L'espace de toutes les configurations possibles pour cette grille étant effectivement beaucoup trop grand, il est obligatoire de trouver des méthodes alternatives pour trouver les états macroscopiques qui nous intéressent. Nous utiliserons ici la méthode du recuit en particulier, avec des températures fixées, et l'on fera évoluer aléatoirement la grille avec des probabilités d'acceptation dépendantes de la différence d'énergie engendrée, le but étant de minimiser l'énergie. On s'intéressera alors à deux grandeurs en particulier, l'énergie et l'aimantation.

2 Description du code

L'analyse de ce système se fera sous Python, en utilisant notamment deux classes principales : Ising et Observable. La première servira à décrire la grille de spins tandis que la deuxième permettra de faire l'analyse des observables, à savoir l'énergie et l'aimantation. Dans cette première classe sont présents une description de la grille à travers le nombre de spins et la température, ainsi que plusieurs méthodes permettant notamment de simuler un réchauffement du système (par algorithme de Metropolis), ou de calculer les observables. La deuxième classe utilise la méthode du binning pour calculer les observables, en utilisant les données collectées pour calculer des moyennes intermédiaires qui seront de moins en moins corrélées jusqu'à ne laisser que une valeur moyenne exploitable. Cette méthode permet également d'obtenir le temps d'autocorrélation des observables, représentatif de la corrélation des données collectées entre elles. Nous procédons alors au protocole suivant :

- On initialise le système à une température entre 1.0 et 4.0

- On effectue 1 000 000 d'itérations préliminaires pour réchauffer le système
- On récolte ensuite 2^{16} données avec des pas de 1000 itérations

Ce processus se déroule dans le code principal MONTE_CARLO.PY et utilise les classes définies dans le fichier principal ISING.PY. Les données de moyenne, variance et temps d'autocorrélations des deux observables sont ensuite enregistrées dans des fichiers txt correspondants. On peut ensuite tracer l'évolution des moyennes d'énergie et d'aimantation, ainsi que leur temps d'autocorrélation :

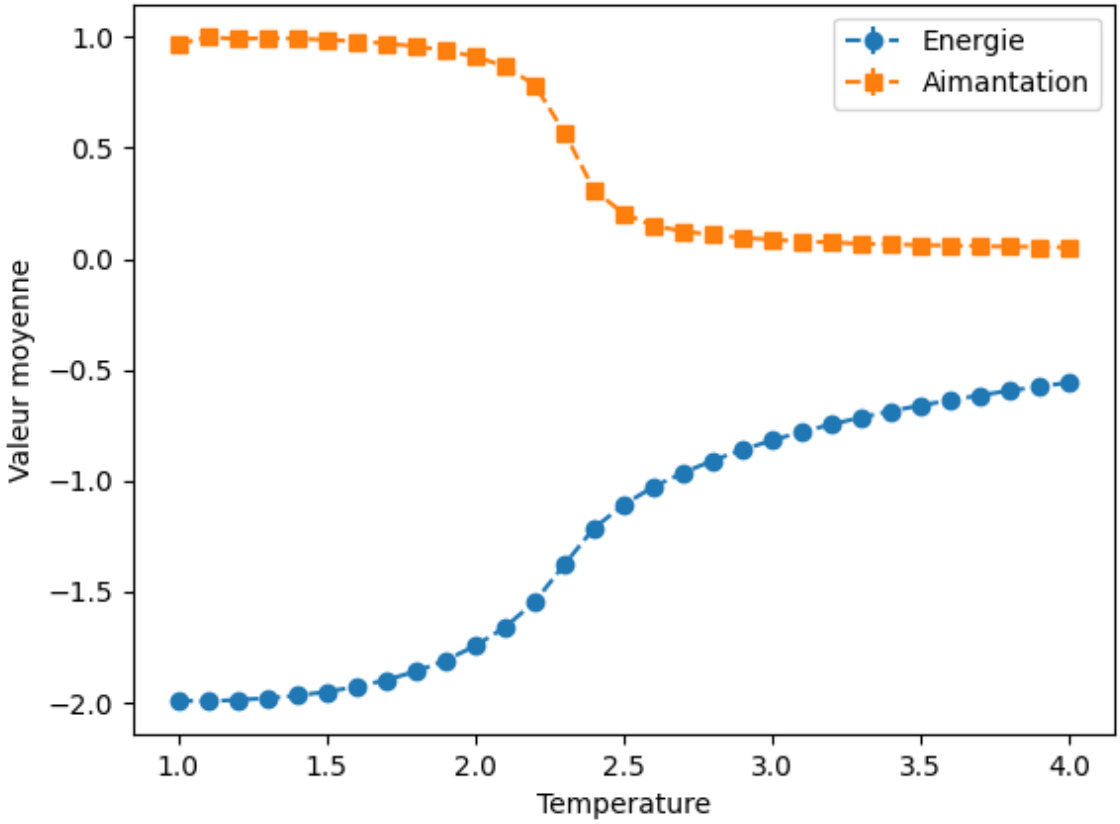

Figure 1: Valeurs moyennes d'énergie et aimantation en fonction de la température

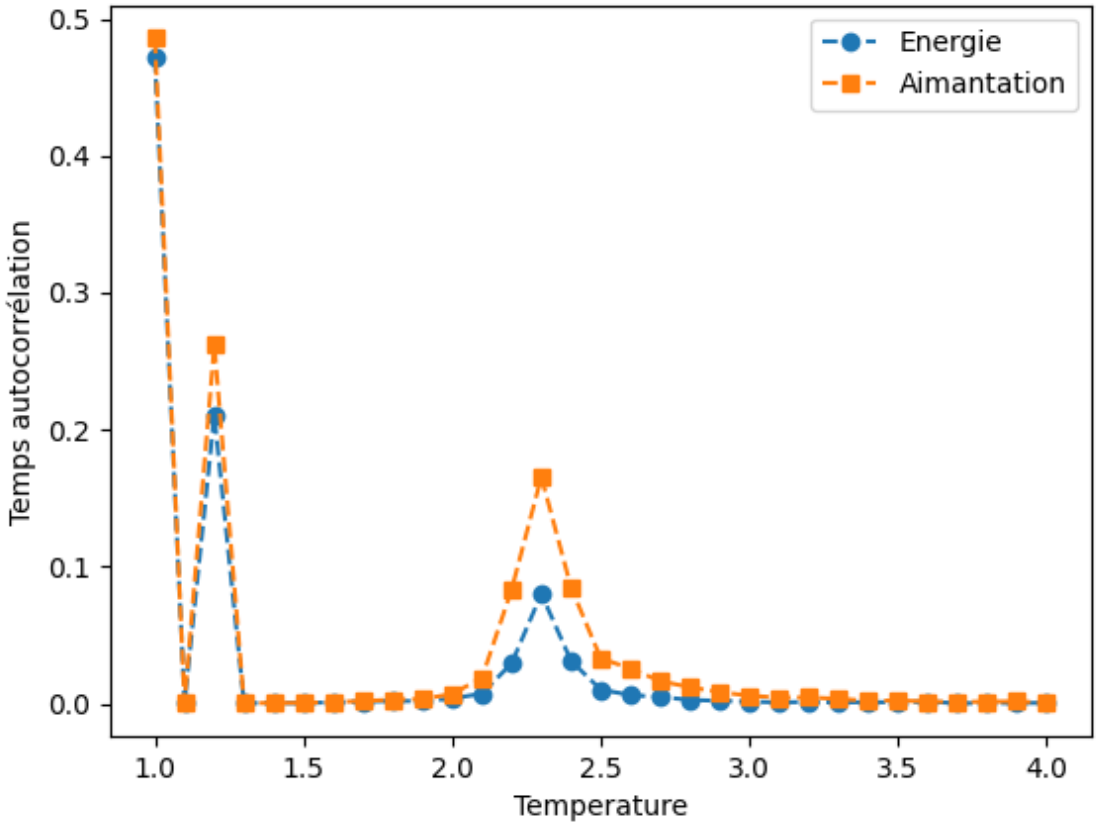

Figure 2: Temps d'autocorrélation d'énergie et aimantation en fonction de la température

On observe sur le graphe des valeurs moyennes un changement de phase autour de la température 2.5, où les spins passent d'un état "alignés" à un état "désordonné". Ce changement s'éloigne de l'état d'énergie minimale. On peut associer ce changement à la hausse de température, qui donne plus d'énergie à chaque spin et leur permet de se détacher des énergies de liaison avec leurs voisins. Ce changement de phase apparaît aussi sur la figure des temps d'autocorrélation sous la forme d'un pic à cette température, bien que deux autres pics non représentatifs soient aussi présents à plus basses températures.

3 Conclusion

Nous avons donc vu dans ce devoir l'application de la méthode Monte Carlo et de l'algorithme de Metropolis à un cas simple de grille de spins interagissant faiblement. Cette méthode permet d'analyser le système assez rapidement, au moins en comparaison avec ce que donnerait une analyse de tous les états possibles (qui est ici inconcevable

!). Cette analyse nous a permi de tracer et d'étudier l'évolution de deux observables, l'énergie et l'aimantation, en fonction de la température. Cette étude a mis en évidence un changement de phase aux alentours de la température 2.5.