

Modèle d'Ising:

Simulation python des interactions entre spins d'électrons sur un réseau bidimensionnel

Solal Lemoine, Etienne Roger

Décembre 2023

Abstract

Le modèle d'Ising est un outil fondamental en physique statistique pour étudier les propriétés ferromagnétiques des matériaux. Ce rapport présente l'implémentation et l'analyse de ce modèle dans le cas bidimensionnel, via une simulation en langage python se basant sur l'algorithme de Metropolis. L'étude des interactions entre spins, soumis à différents paramètres comme le champ magnétique externe, la température, ou l'intensité des interactions entre spins, montre des différences nettes dans l'évolution du système selon sa configuration initiale et rend compte de l'existence de "transitions de phase" dues à la température. On profitera de la librairie matplotlib de python pour représenter graphiquement ces phénomènes ainsi que les bilans d'énergie et de magnétisation du système.

1 Théorie physique

Le modèle d'Ising en 2D consiste en une grille de spins (dipôles magnétiques) dans des états up (+1) ou down (-1). Les spins s'influencent mutuellement et la température tend à augmenter le chaos. Le système favorise une évolution décroissante de son énergie totale

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (1)$$

où J est l'intensité de l'interaction entre spins, s_i est le spin sur le site i, $\sum_{\langle i,j \rangle}$ indique la somme sur les plus proches voisins et B est la valeur du champ magnétique externe. Pour des raisons de simplicité, nous considérons que seuls les spins voisins (verticalement et horizontalement) interagissent entre eux.

2 Algorithme de Metropolis

Pour simuler les changements successifs des spins et énergies locales, nous avons recours à l'algorithme de Metropolis qui s'articule comme suit:

1. Création d'une configuration initiale $S_0 = (s_1, s_2, \dots, s_n)$ de $n = N^2$ spins si N est la taille de la grille NxN.
2. Modification aléatoire d'un spin de la grille initiale.
3. Validation ou rejet du changement, selon la différence d'énergie $\Delta E = E_1 - E_0$ entre les deux configurations: validation immédiate si $\Delta E < 0$, validation conditionnelle de probabilité $w = e^{-\Delta E/T}$ si $\Delta E > 0$, où T est la température du système.
4. Répétition par boucle des étapes 2 et 3 (suffisamment de fois pour obtenir des résultats physiquement intéressants).

3 Mode d'emploi des programmes

3.1 Fichiers

Le dossier comporte 4 modules de fonctions et 3 programmes "à exécuter".

1. Metropolis.py : implémentation de l'algorithme de Metropolis ainsi que quelques autres fonctions utiles (module "outils").
2. Initialize.py : fonctions qui initialisent une simulation càd qui demandent à l'utilisateur les paramètres de la simulation souhaitée (module "outils").

3. Fixed_temp.py : simulation pour une température fixe, représentation visuelle de la grille, graphes de l'énergie et de la magnétisation au cours du temps (module "simulation").
4. Range_temp.py : simulation pour une série de températures croissantes et graphes des énergies et magnétisations finales selon la température (module "simulation").
5. Ising_main.py : programme de simulation du modèle d'Ising, laissant l'utilisateur choisir les paramètres de via une série d'inputs (module "exécutable").
6. Fix_demo.py : programme "démon" pour une simulation Fixed_temp particulière avec paramètres prédéfinis (module "exécutable").
7. Range_demo.py : programme "démon" pour une simulation Range_temp particulière avec paramètres prédéfinis (module "exécutable").

3.2 Packages utilisés

Dans ce projet, les packages suivants sont utilisés :

- numpy : pour la facilitation des opérations sur les matrices et le générateur pseudo-aléatoire;
- matplotlib : pour toutes les représentations graphiques;
- tqdm : pour afficher une barre de progression de la simulation.

Ceux-ci doivent donc être installés si ce n'est déjà fait dans l'ordinateur de l'utilisateur pour qu'il puisse correctement exécuter les programmes.

3.3 Exécution

Le fichier principal du projet est Ising_main.py. Lancé simplement par un "python Ising_main.py" dans le terminal, il permet à l'utilisateur de choisir exactement chaque paramètre et configuration de la simulation souhaitée du modèle d'Ising.

Les fichiers Fix_demo.py et Range_demo.py eux, sont des programmes sans input et peuvent donc être exécuter sans interaction de la part de l'utilisateur. Chacun simule un cas intéressant des modèles à température respectivement fixe et variable.

Notons que ces 3 fonctions produisent toutes des graphiques, sauvegardés automatiquement : Ising_main.py dans le cas d'une simulation à T fixe (model = "f") et Fix_demo.py produisent FixT.energy_magnet.png et lattice_evolution.png. Ising_main.py dans le cas d'une simulation à T variable (model = "r") et Range_demo.py produisent RangeT.energy_magnet.png.

Attention, l'utilisateur doit fermer les fenêtres des graphes pour que le programme prenne "réellement" fin.

Paramètres de simulation

Voici quelques paramètres à utiliser dans Ising_main.py pour obtenir des graphiques de simulations physiquement intéressantes :

- B nul : $N=100$, matrix_type = r, $J = 1$, $B = 0$, model = f, $T = 0.5$, edge = c
- B fort : $N = 100$, matrix_type = r, $J = 1$, $B = 1$, model = f, $T = 0.5$, edge = c
- J nul : $N = 100$, matrix_type = d, $J = 0$, $B = 1$, model = r, edge = t
- J fort : $N = 100$, matrix_type = u, $J = 2$, $B = 0$, model = r, edge = c

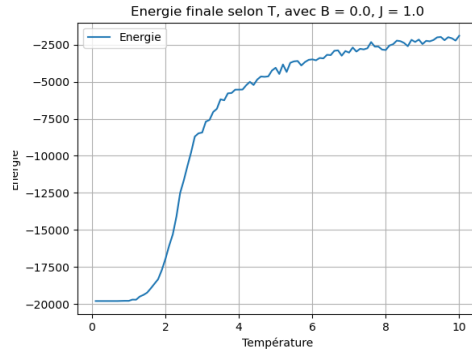
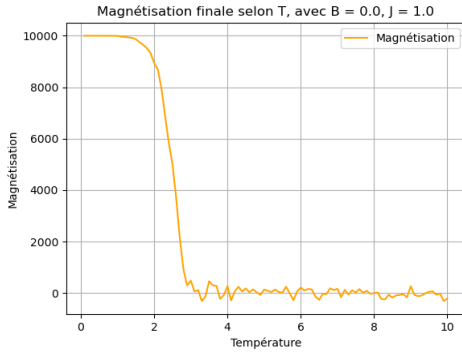
4 Résultats des simulations et conclusions physiques

4.1 Impact de la température sur le système

Les graphiques ci-dessous montrent les graphes de l'énergie et la magnétisation finale du système (après une évolution complète de la grille), selon la température (avec un pas de 0.1 pour la température). On étudie de cette manière l'impact de la température sur l'état final d'une grille.

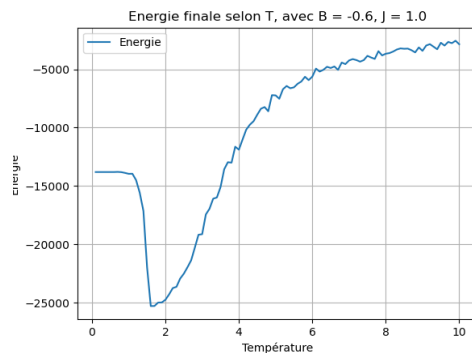
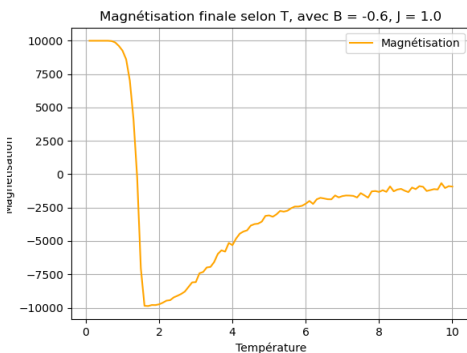
4.1.1 Cas 1 : $B = 0$

Pour une matrice initiale up, on observe clairement une discontinuité dans la magnétisation à une certaine température critique. Lorsque la température est trop faible, la matrice a beaucoup de mal à évoluer à cause de la valeur de J qui est non nul. En effet, un changement de spin impliquerait une forte hausse d'énergie et comme la température est faible, la probabilité d'accepter ce changement est encore plus faible. En revanche, lorsque la température devient plus élevée, la probabilité d'acceptation des spins devient plus grande. Il suffit d'un seul spin qui se retourne, alors ses voisins pourront plus facilement être retournés à leur tour. Il y a donc une réaction en chaîne qui se produit et ce jusqu'à ce que la magnétisation totale devienne nulle. Cependant, même si la magnétisation est nulle et est donc constante au delà de la température critique, l'énergie totale, elle, continue à augmenter. Cela se passe parce que, malgré la magnétisation nulle, il y a toujours une structure dans le système et celle-ci devient de moins en moins présente au fur et à mesure que la magnétisation augmente.



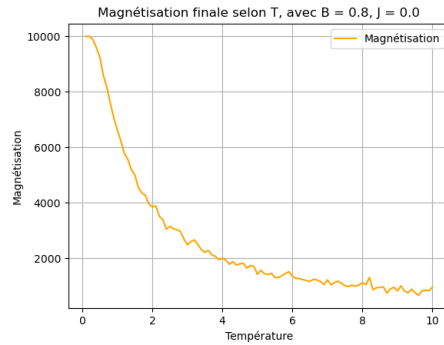
4.1.2 Cas 2 : B grand

Lorsque B est non nul, les spins tendent à s'aligner avec le champ magnétique extérieur. Le graphe ci-dessous montre la magnétisation finale de la matrice initialement up (tout les spins sont égaux à +1) sous l'influence d'un champ magnétique extérieur négatif. Puisque le champ extérieur est opposé aux spins de la matrice, un autre point critique apparaît : à partir d'une certaine température qui plus basse que la température critique, la magnétisation totale du système s'inverse complètement. En effet, lorsque celle-ci est trop basse, le système a du mal à évoluer et reste donc constant. Par contre, lorsque la température est assez élevée, certains vont pouvoir changer de signe et ceux-ci sont beaucoup plus stables que les précédents car ils sont de même signe que le champ magnétique. On observe donc aussi une chute d'énergie à cette température. Comme le cas précédent, lorsque la température continue à monter, le désordre s'installe dans le système, mais moins bruyamment parce que la champ magnétique extérieur rend la transition plus douce.



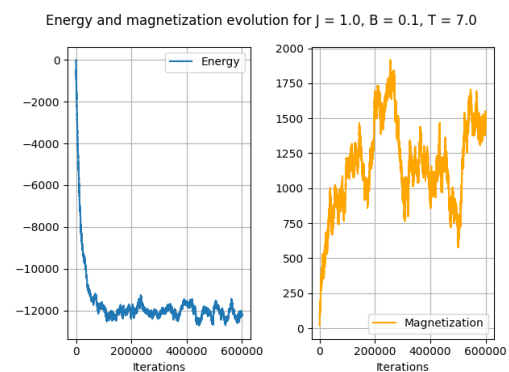
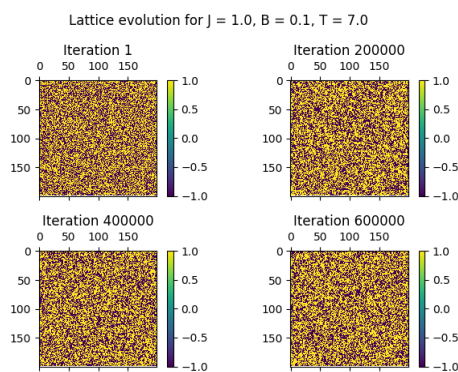
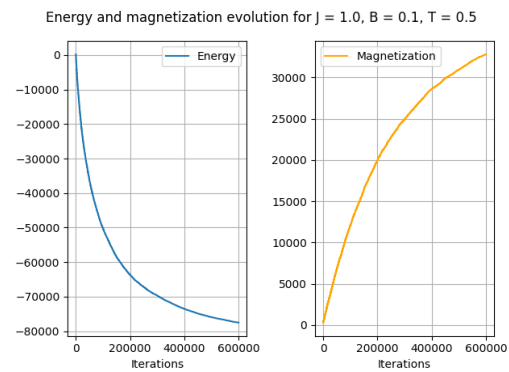
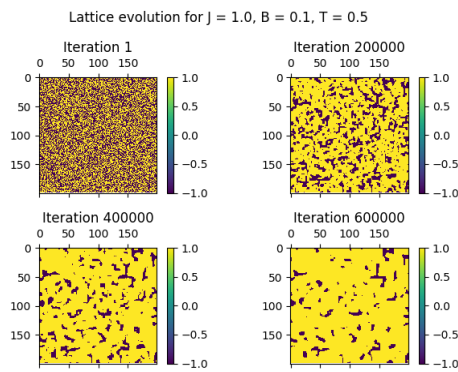
4.1.3 Cas 3 : $J = 0$

Le graphique ci-dessous montre l'évolution de la magnétisation finale pour une matrice initiale down (tous les spins égaux à -1). On observe clairement qu'en fait, la configuration initiale de la matrice n'a aucune importance parce que J est nul, ce qui implique que les spins n'ont aucune difficulté à se retourner si la matrice est complètement homogène. La seule chose qui compte pour les spins est le champ magnétique extérieur et non pas les voisins, ceux-ci s'alignent donc avec ce champ pour minimiser l'énergie.



4.2 Simulation pour une température fixe

Intéressons-nous à présent à une simulation à température fixe. On étudie ici l'évolution d'une seule matrice initialement aléatoire et soumise à un faible champ magnétique extérieur. Lorsque la température du système est en dessous de la température critique, le système tend à minimiser l'énergie totale en alignant les spins avec le champ magnétique extérieur (faisant ainsi augmenter la magnétisation) et en créant une sorte de structure d'îlots dans la matrice, îlots qui disparaissent peu à peu sous l'influence du champ magnétique. Cependant, lorsque la température est trop élevée, le système n'arrive pas à s'ordonner complètement. Tout au début, on observe quand même une chute de l'énergie et une augmentation de la magnétisation, mais ils tendent rapidement à être constants (on observe même des petites oscillations).



Contributions individuelles au projet

Etienne Roger : calculs physiques des énergies, conclusions physiques, modules "simulation".

Solal Lemoine : représentations graphiques, structuration en dépôt de modules, modules "outils", modules "exécutables".