



TRANSITIONS DE PHASE

SUR UNE ÉTUDE NUMÉRIQUE ET ANALYTIQUE DU MODÈLE D'ISING À DEUX DIMENSIONS

Maxime MARCHAND, Université de Genève, 3^e année de Bachelor

Sous la supervision de

Giacomo MORPURGO, Université de Genève, Département de physique de la matière quantique (DQMP)

Résumé

Ce rapport résume le travail effectué dans la cadre des laboratoires de physique de troisième année dans le département de physique de la matière quantique de l'Université de Genève. Ce travail consiste en une étude des transitions de phase qui apparaissent sur un modèle d'Ising. Deux études menées parallèlement, l'une portant sur des méthodes numériques, l'autre sur une approche analytique, ont permis d'étudier le modèle d'Ising à deux dimensions, et le comportement des grandeurs qui le caractérisent – comme la magnétisation, la susceptibilité magnétique et les fonctions de corrélation – sous des variations du champ magnétique et de la température. Les modélisations ont permis de confirmer l'apparition d'une transition de phase à la température prédite par les calculs analytiques.

Table des matières

1	Introduction	1
2	Quelques rappels de mécanique statistique	1
3	Transition de phase	1
4	Le modèle d'Ising	2
5	Étude analytique	3
5.1	Fonction de partition et énergie libre	3
5.2	Magnétisation et susceptibilité magnétique	7
5.3	Exposants critiques	8
5.3.1	Dérivation de la magnétisation	8
5.3.2	Dérivation de la susceptibilité magnétique	9
6	Modélisation numérique	9
6.1	Méthode de Monte Carlo	10
6.1.1	Algorithme	10
6.1.2	Calcul d'observables	12
6.2	Étude de la magnétisation moyenne	13
6.3	Fonctions de corrélation	14
7	Modélisation du modèle analytique	15
8	Conclusion	16
A	Les limites de la méthode de Monte Carlo	17
B	Méthodes Stochastiques	17
C	Méthode de la selle	18

1 Introduction

Certains systèmes, sous l'influence de contraintes externes, sont susceptibles de présenter des changements spontanés de réponse à ceux-ci. On parle alors d'une transition de phase. Ce phénomène est caractérisé par des discontinuités dans les dérivées des équations d'état du système. Un des modèles les plus élémentaires sur lequel peut s'effectuer une transition de phase est le modèle d'Ising, sur lequel nous porterons notre intérêt. L'étude de ce système au moyen d'outils de mécanique statistique, notamment la détermination de la fonction de partition permet de déterminer de façon analytique ses équations d'état. D'autre part, ce système peut être modélisé numériquement, grâce à des algorithmes permettant de s'affranchir des contraintes dues à la grande taille du système.

2 Quelques rappels de mécanique statistique

Nous rappelons dans cette section quelques notions de mécanique statistique. Nous considérons un système \mathcal{S} placé dans un thermostat \mathcal{T} , permettant ainsi l'échange d'énergie. Cette configuration décrit l'ensemble canonique.

Nous notons Ω l'ensemble des configurations dans lequel peut se trouver le système. L'énergie du système est décrite par un hamiltonien $H[\omega] \equiv H$, dont la valeur dépend de la configuration ω . Nous définissons la fonction de partition Z du système :

$$Z = \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H[\omega]} \quad (1)$$

Où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ est l'inverse de la température, et k_B la constante de Stefan-Boltzmann.¹

L'énergie libre $F(T, h, N) \equiv F$ est reliée à la fonction de partition par :

$$F(T, h, N) = -k_B T \log(Z) \quad (2)$$

Ce qui nous permet, en effectuant les dérivées partielles de F , de calculer les grandeurs du système, telles que la magnétisation molaire (à gauche) et la susceptibilité magnétique (à droite) :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} \Big|_{h=0} ; \quad \chi = \frac{\partial^2 F}{\partial h^2} \Big|_{h=0} \quad (3)$$

La valeur moyenne d'une observable \mathcal{O} est donnée par :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{\sum_{\omega \in \Omega} \mathcal{O} e^{-\beta H[\omega]}}{Z} = \frac{\sum_{\omega \in \Omega} \mathcal{O} e^{-\beta H[\omega]}}{\sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H[\omega]}} \quad (4)$$

3 Transition de phase

Une transition de phase est caractérisée par une discontinuité dans l'énergie libre d'un système, ou dans l'une de ses dérivées. Physiquement, ce phénomène donne lieu à un changement spontané de comportement du système. L'exemple le plus connu est la transition de la phase liquide à gazeuse d'un fluide, dont le diagramme de phase est illustré sur la Figure 1. Ce diagramme permet de visualiser les différentes transitions en fonction de la pression et de la température.

On retrouve également des transitions de phase dans les propriétés magnétiques de certains métaux. Ces changements de comportement sont induits par des influences externes : un aimant amené à une température assez élevée perdra ses propriétés magnétiques et ne se fixera plus à un autre aimant. L'étude des transitions de phase a donné lieu à une théorie complète décrivant ces phénomènes.

1. Dans le cadre de cette expérience, nous poserons $k_B = 1$. Comme les unités de k_B sont $[k_B] = E/T$, la température aura les dimensions d'une énergie.

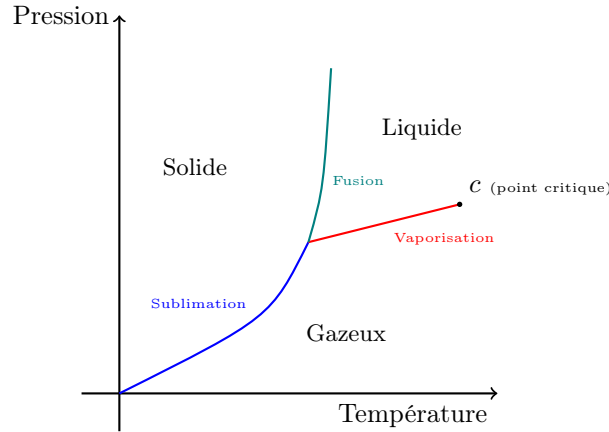


FIGURE 1 — Le diagramme de phase d'un fluide. On peut représenter l'état du fluide par un point à la position relative à la température et à la pression. Une transition de phase a lieu lorsque ce point traverse une des courbes. Cette transition sera caractérisée par une discontinuité dans une dérivée première de l'énergie du système (On parle alors d'une transition de phase du premier ordre). Ce diagramme illustre aussi l'existence de points critiques, qui donnent lieu à des discontinuités dans les dérivées secondes de l'énergie (On parle alors d'une transition de phase du second ordre).

Le modèle d'Ising, qui sera introduit dans la prochaine section, est un objet sur lequel une transition de phase peut apparaître à une certaine température. La discontinuité apparaît sur la courbe de la susceptibilité magnétique. La Figure 2 illustre le comportement de la magnétisation et de la susceptibilité magnétique en fonction de la température.

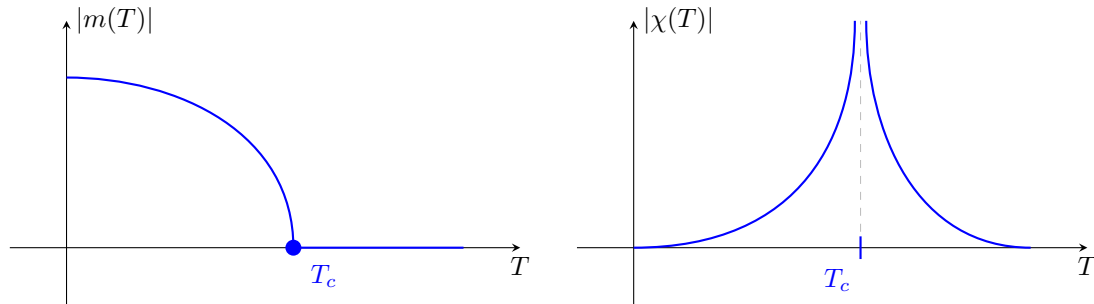


FIGURE 2 — Deux courbes théoriques. À gauche, la magnétisation en fonction de la température. Le point T_c correspond à la transition d'un régime ferromagnétique à un régime paramagnétique. Avant ce point, le système est magnétisé. Après, les fluctuations thermiques ne permettent plus aux spins de s'orienter dans la direction du champ magnétique externe. La figure de droite correspond à la courbe théorique de la susceptibilité magnétique d'un tel système. Nous nous attendons à observer une discontinuité au point T_c .

4 Le modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est défini par un réseau d-dimensionnel de N sites, sur chacun desquels se trouve un spin entier σ_i , $i \in \mathbb{N}$ pouvant prendre les valeurs $\sigma_i = \pm 1$. Dans le cadre de ce travail, nous nous concentrons sur un modèle carré à deux dimensions². Un tel système est illustré sur la Figure 3. Nous allons distinguer deux modèles différents. Dans le premier cas, nous considérons que chaque spin est influencé par ses quatre voisins les plus proches, comme illustré dans la Figure 4.

L'hamiltonien de ce modèle est donné par :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (5)$$

2. Il existe de nombreuses variantes du modèle d'Ising, qui se différencient par la topologie du réseau, et les conditions aux bords. D'un point de vue plus abstrait, un modèle d'Ising peut être défini comme un graphe, voir [1] pour une définition plus formelle.



FIGURE 3 — Un réseau de spins entiers, dont les valeurs sont représentées par des carrés noirs ou blancs.

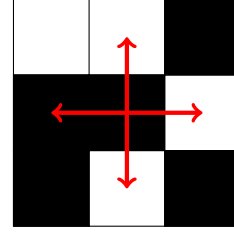


FIGURE 4 — Chaque spin est influencé par ses quatre voisins les plus proches (Nord, Est, Sud, Ouest). Les couplages sont quantifiés grâce aux coefficients J_{ij} , où i est l'indice du spin central, et $j \in \{N, E, S, W\}$ l'indice pour les quatre voisins.

La première somme prend en compte pour chaque spin l'influence de ses quatre voisins. La constante de couplage J est constante pour chaque paire de spins. Supposons le cas de deux spins non alignés, $\sigma_m = +1$ et $\sigma_n = -1$. Dans ce cas le premier terme de l'hamiltonien sera $+J$, alors qu'il sera égal à $-J$ si les deux spins sont alignés. Nous voyons donc très clairement que le système va avoir tendance à aligner ses spins afin de minimiser son énergie³. Le deuxième terme permet de prendre en compte l'influence du champ magnétique h sur chaque spin. En effet, on observe que les spins vont avoir tendance à s'aligner à celui-ci ($\sigma_i = +1$ pour $h > 0$, et vice versa) afin de minimiser l'énergie totale du système. Avoir imposé $k_B = 1$ signifie que la température T sera exprimée en unités de la constante de couplage J .

Le deuxième modèle, quant à lui, va considérer que chaque spin est influencé par l'ensemble des autres spins. L'hamiltonien de ce modèle, très similaire au précédent, est donné par :

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (6)$$

La première somme est normalisée par le nombre de sites N afin que l'énergie ne diverge pas dans la limite thermodynamique où $N \gg 1$. Le terme $\frac{1}{2}$ permet d'éliminer les doublons ($\sigma_i \sigma_j \leftrightarrow \sigma_j \sigma_i$).

5 Étude analytique

Nous présentons maintenant la dérivation analytique du modèle d'Ising, en considérant l'hamiltonien donné par la formule (6). Le modèle prend en compte tous les duos $\sigma_i \sigma_j$ possibles. En considérant l'égalité $\sum_i \sum_j \sigma_i \sigma_j = (\sum_i \sigma_i)^2$, nous pouvons ré-écrire l'hamiltonien sous la forme :

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (7)$$

$$= -\frac{J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 - h \sum_i \sigma_i \quad (8)$$

5.1 Fonction de partition et énergie libre

En partant de la relation (8), nous voulons donc trouver une expression analytique pour la fonction de partition Z :

3. Nous allons voir qu'en réalité, il s'agit de son énergie libre qui est minimisée

$$Z = \sum_{\omega \in \Omega} e^{-\beta H[\omega]} \quad (9)$$

$$= \sum_{\omega \in \Omega} \exp \left\{ \frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i \right)^2 + \beta h \sum_i \sigma_i \right\} \quad (10)$$

En identifiant $x = \sum_i \sigma_i$, nous reconnaissons un polynôme du type $ax^2 + bx + c$ dans l'exponentielle, dont les coefficients sont donnés par :

$$a = \frac{\beta J}{2N} \quad ; \quad b = \beta h \quad ; \quad c = 0 \quad (11)$$

Nous complétons le carré :

$$ax^2 + bx + c = a \left(x + \frac{b}{2a} \right)^2 - \frac{b^2}{4a} + c \quad (12)$$

Ce qui nous permet de ré-exprimer la fonction de partition comme :

$$Z = \sum_{\omega \in \Omega} \exp \left\{ \frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i + \frac{hN}{J} \right)^2 - \frac{h^2 N \beta}{2J} \right\} \quad (13)$$

Pour calculer cette expression, nous pouvons utiliser le résultat de l'intégration d'une fonction gaussienne standard :

$$\sqrt{\frac{a}{\pi}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ax^2 + bx + c} dx = e^{\frac{b^2}{4a} + c} \quad (14)$$

Nous pouvons donc identifier les deux expressions :

$$\frac{\beta J}{2N} \left(\sum_i \sigma_i + \frac{hN}{J} \right)^2 - \frac{h^2 N \beta}{2J} = \frac{b^2}{4a} + c \quad (15)$$

Ce qui nous permet de déduire les coefficients a , b , et c :

$$a = \frac{N}{2\beta J} \quad ; \quad b = \left(\sum_i \sigma_i + \frac{hN}{J} \right) \quad ; \quad c = -\frac{h^2 N \beta}{2J} \quad (16)$$

Nous pouvons donc écrire la fonction de partition comme le terme de gauche de l'équation (14) :

$$Z = \sum_{\omega \in \Omega} \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\frac{N}{2\beta J} x^2 + \left(\sum_i \sigma_i + \frac{hN}{J} \right) x - \frac{h^2 N \beta}{2J} \right\} dx \quad (17)$$

$$= \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\frac{N}{2\beta J} x^2 - \frac{h^2 N \beta}{2J} \right\} \sum_{\omega \in \Omega} \exp \left\{ \left(\sum_i \sigma_i + \frac{hN}{J} \right) x \right\} dx \quad (18)$$

Nous calculons maintenant la somme sur les configurations :

$$\sum_{\omega \in \Omega} \exp \left\{ \left(\sum_i \sigma_i + \frac{hN}{J} \right) x \right\} = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \exp \left\{ \left(\sum_i \sigma_i + \frac{hN}{J} \right) x \right\} \quad (19)$$

$$= \exp \left\{ \frac{hN}{J} x \right\} \left(\sum_{\sigma = \pm 1} \exp \{ \sigma x \} \right)^N \quad (20)$$

$$= \exp \left\{ \frac{hN}{J} x \right\} (e^x + e^{-x})^N \quad (21)$$

$$= \exp \left\{ \frac{hN}{J} x \right\} (2 \cosh(x))^N \quad (22)$$

On trouve finalement :

$$Z = \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\frac{N}{2\beta J} x^2 + \frac{hN}{J} x - \frac{h^2 N \beta}{2J} \right\} (2 \cosh(x))^N dx \quad (23)$$

$$= \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -\frac{N}{2\beta J} x^2 + \frac{hN}{J} x - \frac{h^2 N \beta}{2J} + N \log(2 \cosh(x)) \right\} dx \quad (24)$$

$$= \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}} \int_{\mathbb{R}} \exp \left\{ -N \left(\frac{x^2}{2\beta J} - \frac{h}{J} x + \frac{h^2 \beta}{2J} - \log(2 \cosh(x)) \right) \right\} dx \quad (25)$$

Nous pouvons maintenant résoudre cette intégrale avec la méthode de la selle⁴, dont la formule est donnée par :

$$\int dx e^{-Nf(x)} \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x_0)}} e^{-Nf(x_0)} \quad (26)$$

Où f est une fonction à valeurs réelles, et x_0 un minimum global de f . Dans notre cas, la fonction $f(x)$ et ses deux premières dérivées sont données par :

$$f(x) = \frac{x^2}{2\beta J} - \frac{h}{J} x + \frac{h^2 \beta}{2J} - \log(2 \cosh(x)) \quad (27)$$

$$f'(x) = \frac{x}{\beta J} - \frac{h}{J} - \tanh(x) \quad (28)$$

$$f''(x) = \frac{1}{\beta J} - \frac{1}{\cosh^2(x)} \quad (29)$$

Pour trouver les extremas globaux de f , nous pouvons poser $h = 0$ sans perte de généralité. Nous devons donc résoudre :

$$f'(x) = \frac{x}{\beta J} - \tanh(x) = 0 \iff \frac{x}{\beta J} = \tanh(x) \quad (30)$$

La Figure 5 illustre les fonctions $f_1(x) = \frac{x}{\beta J}$ et $f_2(x) = \tanh(x)$:

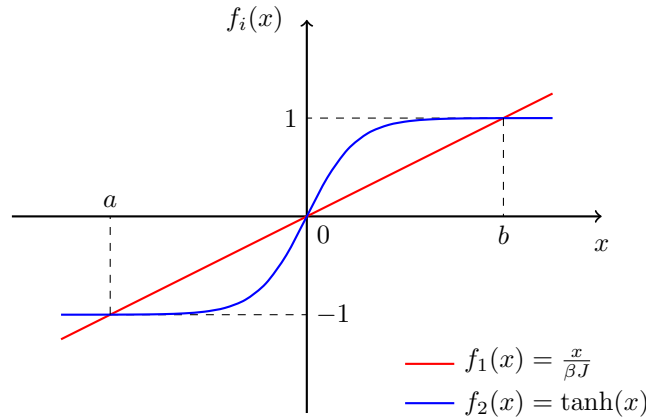


FIGURE 5 — Graphe des fonctions $f_1(x) = \frac{x}{\beta J}$ et $f_2(x) = \tanh(x)$. On distingue deux cas possibles. Si $f'_1(x) > f'_2(x)$, il y a un seul point d'intersection en $x_0 = 0$. Si $f'_1(x) < f'_2(x)$, dans ce cas il y a trois points d'intersection a , 0 et b .

Nous voulons maintenant déterminer lesquels de ces trois points sont des candidats pour être les minimums globaux x_0 de f . Par définition, en posant x_1 et x_2 tels que $x_1 < x_0 < x_2$, nous pouvons dire que x_0 est un minimum global si :

$$\begin{aligned} x_1 < x_0 &\Rightarrow f'(x_1) < 0 \Rightarrow \frac{x}{\beta J} < \tanh(x) \\ x_2 > x_0 &\Rightarrow f'(x_2) > 0 \Rightarrow \frac{x}{\beta J} > \tanh(x) \end{aligned} \quad (31)$$

4. La démonstration de cette formule se trouve dans l'annexe C

La Figure 5 nous permet donc de conclure que les minimums globaux de f se trouvent aux points $x_0 \in \{a, b\}$. Grâce à l'équation (26), la fonction de partition est donc donnée par :

$$Z = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{\beta J}{\cosh^2(x_0)}}} \exp \left\{ -N \left(\frac{x_0^2}{2\beta J} - \frac{hx_0}{J} + \frac{\beta h^2}{2J} - \log(2 \cosh(x_0)) \right) \right\} \quad (32)$$

Nous pouvons maintenant calculer l'énergie libre F grâce à la relation (2) :

$$F = -k_B T \log(Z) \quad (33)$$

$$= \frac{1}{2} k_B T \log \left(1 - \frac{\beta J}{\cosh^2(x_0)} \right) + N k_B T \left(\frac{x_0^2}{2\beta J} - \frac{hx_0}{J} + \frac{\beta h^2}{2J} - \log(2 \cosh(x_0)) \right) \quad (34)$$

La magnétisation est obtenue en dérivant l'énergie libre molaire $f = \frac{F}{N}$ par rapport à h . Dans la limite thermodynamique, $N \gg 1$ et nous pouvons donc négliger le terme de gauche. Nous devons aussi prendre en compte le fait que, selon l'équation (28), x_0 dépend de h . L'énergie libre molaire peut donc être exprimée comme :

$$f \simeq k_B T \left(\frac{x_0^2}{2\beta J} - \frac{hx_0}{J} + \frac{\beta h^2}{2J} - \log(2 \cosh(x_0)) \right) \quad (35)$$

Le graphique de l'énergie libre pour différentes températures et champs magnétiques est illustré sur la Figure 6.

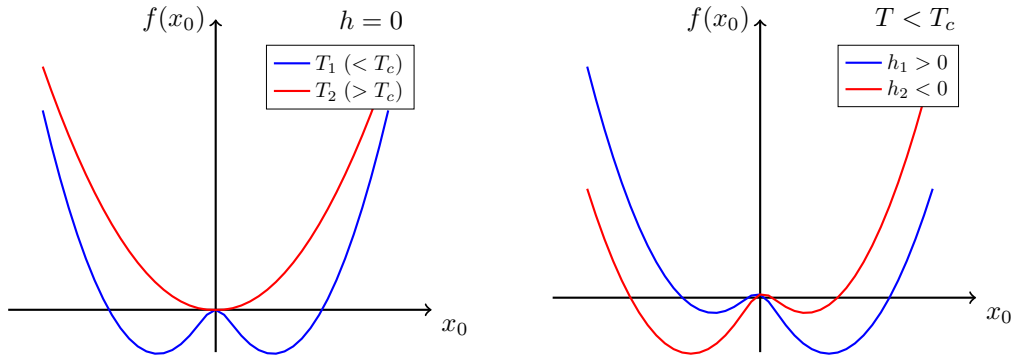


FIGURE 6 — Graphiques théoriques de l'énergie libre f donnée par la relation (35) pour différentes valeurs de la température (à gauche), et de champ magnétique (à droite). Les graphiques ne sont pas à l'échelle : les courbes ont été normalisées à leur maximum et décalées verticalement pour une visualisation plus aisée.

À gauche, la courbe en rouge représente l'énergie libre à une température en dessous de la température critique T_c . On observe deux minimums, qui correspondent aux deux configurations qui minimisent l'énergie libre, à savoir tous les spins orientés vers le haut ou vers le bas. Lorsque la température augmente et franchit le seuil T_c , la fonction ne possède plus qu'un minimum.

Le graphique de droite illustre l'énergie libre pour deux valeurs différentes du champ magnétique. On observe très bien que le champ magnétique creuse un des deux puits, en fonction de son signe. Cet effet a une influence sur le choix de l'orientation des spins. Cet effet est atténué à haute température.

Discussion sur la minimisation de l'énergie libre

Avant de calculer la magnétisation et la susceptibilité magnétique, il est intéressant de constater que l'expression pour l'énergie libre molaire donnée par l'équation (35) est similaire à l'expression de la fonction de partition sur laquelle nous avons appliqué la méthode de la selle. La fonction de partition est de la forme $\exp(-Nf(x))$. Dans la limite thermodynamique, cette expression va accentuer très fortement les minimums globaux de la fonction, l'énergie libre dans notre exemple. La Figure 7 illustre ce phénomène. L'analogie avec le principe de minimisation de l'énergie libre est directe. En effet, la fonction de partition contient l'information statistique du modèle, en indiquant pour chaque configuration la probabilité qu'elle a d'apparaître. Dans la limite thermodynamique, les configurations qui minimisent l'énergie libre seront donc exponentiellement plus probables.

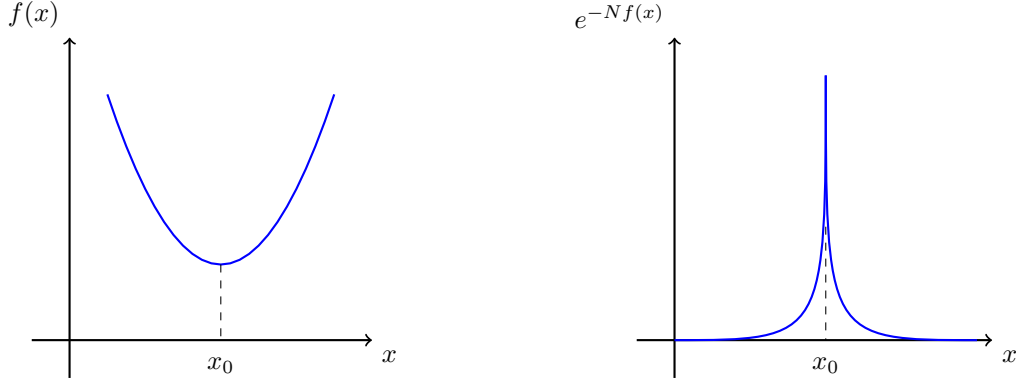


FIGURE 7 – Deux courbes théoriques, afin d'illustrer la méthode de la selle. À gauche un minimum global d'une fonction $f(x)$, à droite le graphique de $\exp(-Nf(x))$. Lorsque $N \gg 1$, les autres points deviennent exponentiellement négligeables face à x_0 .

5.2 Magnétisation et susceptibilité magnétique

Maintenant, nous calculons la magnétisation et la susceptibilité magnétique à partir de l'expression de l'énergie libre molaire (35).

$$m = - \left. \frac{\partial f}{\partial h} \right|_{h=0} \quad (36)$$

$$= k_B T \left. \frac{\partial}{\partial h} \left(-\frac{x_0^2}{2\beta J} + \frac{hx_0}{J} - \frac{\beta h^2}{2J} + \log(2 \cosh(x_0)) \right) \right|_{h=0} \quad (37)$$

$$= k_B T \left(-\frac{x_0}{\beta J} \frac{\partial x_0}{\partial h} + \frac{1}{J} \left(x_0 + h \frac{\partial x_0}{\partial h} \right) - \frac{\beta h}{J} + \tanh(x_0) \frac{\partial x_0}{\partial h} \right) \Big|_{h=0} \quad (38)$$

$$= \frac{1}{\beta} \left(\frac{x_0}{J} - \frac{\beta h}{J} \right) \Big|_{h=0} = \frac{x_0}{\beta J} - \frac{h}{J} \Big|_{h=0} = \frac{x_0}{\beta J} \quad (39)$$

Nous voyons très clairement le lien entre la magnétisation et la variable continue x introduite lors de la détermination de la fonction de partition. En faisant référence à la Figure 6, nous voyons très clairement que, en dessous de la température critique, les minimums de l'énergie libre se trouvent aux deux valeurs différentes que peut prendre la magnétisation, à savoir $+1$ et -1 , à un facteur βJ près.

Pour calculer la susceptibilité magnétique, nous pouvons tout d'abord déterminer $\frac{\partial x_0}{\partial h}$ grâce à la relation (28) :

$$\left. \frac{\partial x_0}{\partial h} \right|_{h=0} = \beta J \left(\frac{1}{J} + (1 - \tanh^2(x_0)) \frac{\partial x_0}{\partial h} \right) \Big|_{h=0} = \frac{\beta}{1 - \beta J + \beta J \left(\frac{x_0}{\beta J} - \frac{h}{J} \right)^2} \Big|_{h=0} \quad (40)$$

$$= \frac{\beta}{1 - \beta J + \beta J \left(\frac{x_0^2}{\beta^2 J^2} - \frac{2x_0 h}{\beta J} + \frac{h^2}{J^2} \right)} \Big|_{h=0} = \frac{\beta}{1 - \beta J + \frac{x_0^2}{\beta J}} \quad (41)$$

On trouve donc :

$$\chi = \left. \frac{\partial m}{\partial h} \right|_{h=0} = \left. \frac{\partial}{\partial h} \left(\frac{x_0}{\beta J} - \frac{h}{J} \right) \right|_{h=0} = \frac{1}{\beta J} \left. \frac{\partial x_0}{\partial h} - \frac{1}{J} \right|_{h=0} \quad (42)$$

$$= \frac{1}{J} \left[\frac{1}{1 - \beta J + \frac{x_0^2}{\beta J}} - 1 \right] = \frac{1}{J} \left[\frac{\beta J \left(1 - \frac{x_0^2}{\beta^2 J^2} \right)}{1 - \beta J \left(1 - \frac{x_0^2}{\beta^2 J^2} \right)} \right] \quad (43)$$

$$= \frac{\beta(1 - m^2)}{1 - \beta J(1 - m^2)} \quad (44)$$

Il est intéressant d'étudier la relation (44) aux alentours de la température critique T_c . Tout d'abord, nous pouvons trouver l'expression de J grâce à la relation (30). En considérant $x_0 \ll 1$, nous pouvons assumer $\tanh(x_0) \simeq x_0$. Nous trouvons donc :

$$m = \frac{x_0}{\beta J} = \tanh(x_0) \simeq x_0 \Rightarrow \frac{1}{\beta J} = 1 \Rightarrow J = \frac{1}{\beta} = T \quad (45)$$

Cette relation est valide dans un voisinage de T_c . Nous pouvons donc évaluer $\chi(T = T_c)$:

$$\chi(T = T_c) = \frac{\beta}{1 - \beta J} = \frac{\beta}{0} = \infty \quad (46)$$

Où nous avons utilisé le fait que $m(T = T_c) = 0$. Il y a donc bien une discontinuité en $T_c = 1$.

5.3 Exposants critiques

La magnétisation et la susceptibilité magnétique peuvent aussi être exprimées au moyen de développements analytiques autour de la température critique T_c . L'expression qui en résulte correspond donc à une puissance de $(T - T_c)$:

$$m = A(T) \cdot (T - T_c)^\alpha \quad (47)$$

$$\chi = B(T) \cdot (T - T_c)^\gamma \quad (48)$$

Les coefficients α et γ sont appelés exposants critiques, et décrivent le comportement de la magnétisation et de la susceptibilité magnétique au voisinage de la température critique T_c . Une présentation plus détaillée des exposants critiques peut être trouvée dans l'ouvrage de YEOMAN [2].

5.3.1 Dérivation de la magnétisation

Nous partons de l'expression trouvée dans la Section 5 :

$$m = \frac{x_0}{\beta J} = \tanh(x_0) \quad (49)$$

Dans la limite $x_0 \ll 1$, nous pouvons utiliser le développement de Taylor de $\tanh(x_0)$:

$$\tanh(x_0) = x_0 - \frac{x_0^3}{3} + \mathcal{O}(x_0^5) \quad (50)$$

Nous voulons étudier m lorsque la température approche la température critique : $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} T_c - \varepsilon$. On a donc :

$$m_c = \frac{x_0(T_c - \varepsilon)}{J} = x_0 - \frac{x_0^3}{3} \iff \frac{(T_c - \varepsilon)}{T_c} = 1 - \frac{x_0^2}{3} \quad (51)$$

En remplaçant la définition de $\varepsilon = T_c - T$, nous trouvons :

$$\frac{T_c - T_c + T}{T_c} = 1 - \frac{x_0^2}{3} \quad (52)$$

$$\frac{T}{T_c} = 1 - \frac{x_0^2}{3} \quad (53)$$

$$\frac{T_c}{T} = 1 - \frac{m^2 \cdot \left(\frac{T_c}{T}\right)^2}{3} \quad (54)$$

Ce qui nous permet de déterminer :

$$m = \sqrt{3} \frac{T^{1/2}}{T_c} (T_c - T)^{1/2} \quad (55)$$

Nous trouvons donc $\alpha = \frac{1}{2}$. Au voisinage de T_c , la magnétisation évolue donc comme une racine.

5.3.2 Dérivation de la susceptibilité magnétique

Nous partons de l'expression trouvée dans la section 5 :

$$\chi = \frac{\beta(1 - m^2)}{1 - \beta J(1 - m^2)} \quad (56)$$

Et remplaçons l'expression de la magnétisation en exposant critique déterminée dans la section précédente :

$$\chi = \frac{\beta \left(1 - \frac{3T^2}{T_c^3} (T - T_c)\right)}{1 - \beta J \left(1 - \frac{3T^2}{T_c^3} (T - T_c)\right)} = \frac{\frac{1}{T} \left(1 + 3\frac{T^2}{T_c^3} \varepsilon\right)}{1 - \frac{T_c}{T} \left(1 + \frac{3T^2}{T_c^3} \varepsilon\right)} = \frac{1 + \frac{3T^2}{T_c^3} \varepsilon}{T - T_c \left(1 + \frac{3T^2}{T_c^3} \varepsilon\right)} \quad (57)$$

$$= \frac{1 + \frac{3T^2}{T_c^3} \varepsilon}{-\varepsilon + \frac{3T^2}{T_c^3} \varepsilon} = \frac{1 + \frac{T^2}{T_c^3} \varepsilon}{\varepsilon \left(\frac{3T^2}{T_c^3} - 1\right)} = \frac{1 + \frac{T^2}{T_c^3} \varepsilon}{2(T_c - T)} \quad (58)$$

On trouve finalement :

$$\chi = \left(\frac{1}{2} + \frac{T^2}{2T_c^3} \varepsilon\right) (T_c - T)^{-1} \simeq \frac{1}{2} (T_c - T)^{-1} \quad (59)$$

Nous trouvons donc $\gamma = -1$. Au voisinage de T_c , la susceptibilité magnétique évolue donc comme $\chi \sim \frac{1}{x}$.

6 Modélisation numérique

Nous voulons maintenant simuler numériquement le modèle d'Ising à deux dimensions, afin de calculer des grandeurs telles que la magnétisation ou les fonctions de corrélation. Il sera question du modèle des plus proches voisins, qui est très complexe à résoudre analytiquement. L'hamiltonien de ce modèle est rappelé ci-dessous :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \quad (60)$$

Nous nous retrouvons cependant confrontés à deux problèmes majeurs. Le premier est qu'il sera impossible de prendre en compte toutes les configurations. En effet, en considérant que chaque spin peut se trouver dans deux états différents, le nombre de configurations pour un réseau de N sites est de l'ordre de 2^N . Ce nombre croît de façon exponentielle avec la taille du réseau, et nous sommes intéressés à des tailles de l'ordre de 50×50 spins. Il sera donc impossible de calculer la moyenne d'une observable au moyen de la formule (4). Nous voudrions donc nous inspirer de la formule analytique d'une moyenne :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum \mathcal{O} p(\mathcal{O}) \quad (61)$$

Une solution serait de prendre un grand nombre de configurations différentes, et de calculer la valeur moyenne de cette observable. Nous pourrions donc tendre vers l'équation (61) en moyennant sur les résultats obtenus :

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \mathcal{O}_i \quad (62)$$

Mais cette méthode soulève un second problème. En général, les configurations d'un système ne sont pas équiprobables. En effet, selon la mécanique statistique, un système tend à privilégier les configurations faibles en énergie. Nous voulons donc créer des configurations qui sont plus favorables d'apparaître, car celles-ci sont plus représentatives de l'état moyen du système. Comment donc créer ces configurations en prenant en compte ce paramètre ? Pour cela, nous utiliserons la méthode de Monte Carlo, dont le fonctionnement nous permettra de surmonter ce problème.

6.1 Méthode de Monte Carlo

Introduite par Nicolas METROPOLIS et Stanislaw ULAM [3], la méthode de Monte Carlo naît du besoin de prédire numériquement l'évolution de systèmes dont la résolution analytique n'est pas évidente. On la retrouve par exemple dans l'étude du problème de percolation, l'étude de molécules, ou encore l'étude de systèmes hors-équilibre et de processus irréversibles (voir [4]). Les résultats obtenus par cette méthode sont construits sur la base du comportement moyen de nombreux systèmes construits aléatoirement.

Dans ce travail, nous appliquons cette méthode pour modéliser le comportement d'un modèle d'Ising. Nous présentons dans la section suivante l'algorithme implémenté dans cet objectif.

6.1.1 Algorithme

La méthode de Monte Carlo appliquée au modèle d'Ising est schématisée sur la Figure 8. Il s'agit de l'algorithme de METROPOLIS :

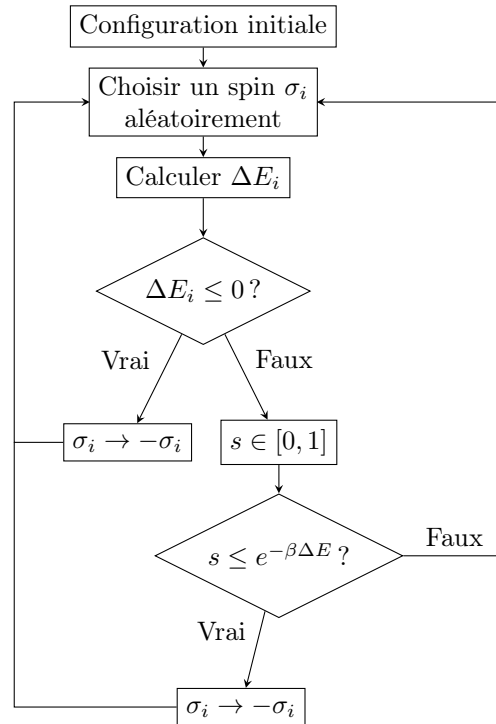


FIGURE 8 — Algorithme de Metropolis pour le modèle d'Ising. La boucle est itérée autant de fois que nécessaire.

Un réseau de spins est d'abord créé aléatoirement, uniformément (par exemple le système illustré sur la Figure 3). En itérant autant de fois que nécessaire, un spin est choisi aléatoirement. La quantité $\Delta E_i = H[-\sigma_i] - H[\sigma_i]$, qui correspond à la différence d'énergie du système si l'orientation du spin est

inversée, est calculée. Si ΔE_i est négatif, alors il est plus favorable énergétiquement d'inverser le spin. Nous devons également considérer le fait que notre système est plongé dans un thermostat, et que les fluctuations thermiques permettent également d'orienter les spins de façon à ce que le système gagne de l'énergie. Pour prendre ce phénomène en compte, si ΔE_i est positif, nous offrons la chance au spin d'inverser son orientation en choisissant un nombre réel $s \in [0, 1]$. Si $s < e^{-\beta \Delta E_i}$, alors il peut changer son orientation.

Inverser l'orientation d'un spin si ΔE_i est négatif permet de faire tendre le système vers une configuration à basse énergie. La condition $s < e^{-\beta \Delta E_i}$ peut être interprétée en étudiant les valeurs de l'exponentielle pour différentes températures. En effet, à température nulle, $\lim_{T \rightarrow 0} e^{-\frac{1}{T} \Delta E_i} = 0$ et donc il n'y a aucune chance que le spin change d'orientation spontanément (car $s < 0$ est impossible). Dans la limite où T devient arbitrairement grand, alors $\lim_{T \rightarrow \infty} e^{-\frac{1}{T} \Delta E_i} = 1$. Le spin a donc d'autant plus de chances d'inverser son orientation que la température augmente.

À noter que, puisque les spins ne sont couplés qu'avec leurs plus proches voisins, alors la différence d'énergie ΔE ne dépend que de ceux-ci. En effet, si nous calculons la différence d'énergie du système, en inversant un spin σ_l , dont les quatre voisins sont dénotés par $\sigma_N, \sigma_E, \sigma_S$ et σ_W :

$$\Delta E_l = H[-\sigma_l] - H[\sigma_l] \quad (63)$$

$$= -J \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i \neq l}} \sigma_i \sigma_j + J \sigma_l (\sigma_N \cdot \sigma_E \cdot \sigma_S \cdot \sigma_W) - h \sum_{i \neq l} \sigma_i + h \sigma_l \quad (64)$$

$$+ J \sum_{\substack{\langle i,j \rangle \\ i \neq l}} \sigma_i \sigma_j + J \sigma_l (\sigma_N \cdot \sigma_E \cdot \sigma_S \cdot \sigma_W) + h \sum_{i \neq l} \sigma_i + h \sigma_l \quad (65)$$

$$= 2 \sigma_l (J \cdot \sigma_N \cdot \sigma_E \cdot \sigma_S \cdot \sigma_W + h) \quad (66)$$

La Figure 9 illustre l'évolution d'un système à différentes itérations.

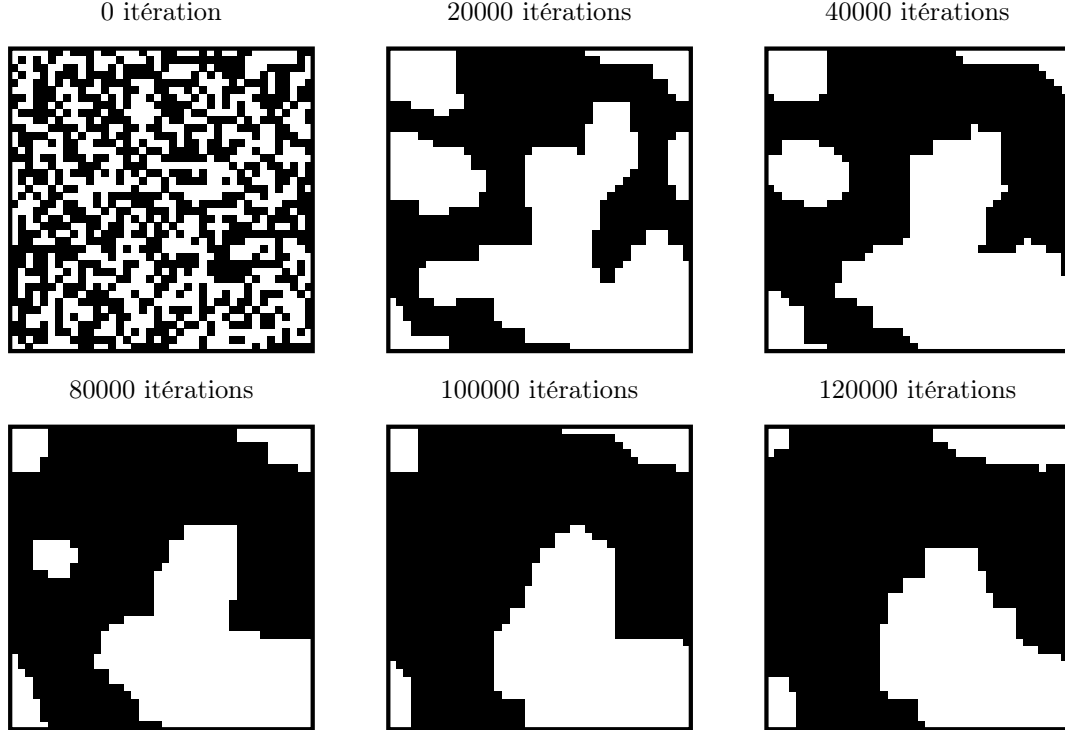


FIGURE 9 — Configuration d'un réseau de spins à différentes itérations de l'algorithme de Monte Carlo. Les conditions aux bords sont périodiques. Les paramètres du réseau sont : $N = 40 \times 40$, $T = 0.0$, $h = 0.0$, $J = 1.0$. On observe clairement que les spins tendent à tous s'aligner dans le même sens. Avec assez d'itérations, les spins vont tous s'aligner dans le même sens. On observe cependant que l'évolution a tendance à ralentir. En effet, lorsque les spins commencent à former des zones d'alignement, l'algorithme choisira en moyenne plus de spins qui sont entourés de voisins avec le même alignement et il n'y aura aucun changement. Cet effet se fait d'autant plus ressentir que le système est grand.

6.1.2 Calcul d'observables

Les obstacles auxquels nous sommes confrontés ont été mentionnés au début de la Section 6. La méthode de Monte Carlo nous permet donc de générer des configurations probables, ce qui résout maintenant les problèmes soulevés.

Il s'agit maintenant de calculer des observables, au moyen de la formule (62). Celle-ci suggère de calculer la moyenne de l'observable sur une grande quantité de systèmes différents. Ceci n'est pas la méthode la plus optimale, car faire converger chaque système vers une configuration stable est très demandant en temps de calcul. Ce problème peut être résolu en créant un système, et en effectuant les mesures à intervalles assez espacés pour pouvoir considérer que les différentes configurations sont indépendantes. De plus, nous devons nous assurer que le système ait convergé vers une configuration stable avant de calculer la moyenne des mesures. Nous pouvons vérifier ceci en assumant que, lorsque le système aura convergé, la différence entre deux mesures $\mathcal{O}_{i+1} - \mathcal{O}_i$ sera assez faible. Afin d'implémenter cette condition, nous pouvons vérifier que le système a convergé si au moins Δ valeurs sont arbitrairement proches les unes des autres. Plus formellement, posons $\Sigma_i = \{\mathcal{O}_n, n \in \llbracket i, i + \Delta \rrbracket\}$ un ensemble de Δ mesures. Nous considérons que le système a convergé si :

$$|\mathcal{O}_n| < \max \left(\frac{\overline{\Sigma_i}}{100}, \varepsilon_{\text{abs}} \right) \quad \forall n \in \llbracket i, i + \Delta \rrbracket \quad (67)$$

Où $\overline{\Sigma_i}$ dénote la moyenne de Σ_i : $\overline{\Sigma_i} = \frac{1}{\Delta} \sum_{n=1}^{\Delta} \mathcal{O}_n$.

En partant de $i = 0$, nous itérons sur toutes les mesures, et déterminons le temps de convergence à $t_c = i$ pour le premier i tel que la condition (67) est respectée.

Dans notre modélisation, nous posons $\Delta = 10$, et $\varepsilon_{\text{abs}} = 1/100$. La Figure 10 illustre la méthode générale de mesure d'une observable.

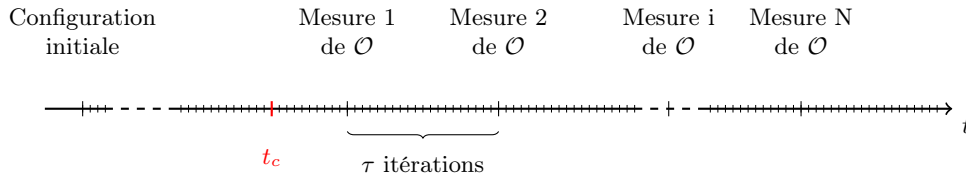


FIGURE 10 – Illustration de la procédure de calcul d'une observable. La longue flèche représente les itérations successives. Une configuration initiale est créée aléatoirement. Le système évolue, et le calcul de l'observable s'effectue toutes les τ itérations, où τ est choisi assez grand pour pouvoir admettre que chaque mesure provient d'une configuration indépendante. À une certaine itération t_c , le système a convergé vers une configuration stable, et la moyenne de l'observable est ensuite calculée : $\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \mathcal{O}_i$ pour toutes les mesures \mathcal{O}_i après t_c .

Afin d'illustrer l'évolution d'une observable, la Figure 11 montre la magnétisation moyenne au fil des différentes itérations. On observe très clairement la convergence du système à une certaine itération t_c . C'est à partir de ce point que nous moyennons toutes les magnétisations. Comme nous pouvons le voir, la magnétisation est un très bon indicateur de convergence du système. Lorsque nous calculons d'autres observables comme la susceptibilité magnétique et la fonction de corrélation, c'est la magnétisation que nous utiliserons pour déterminer le temps de convergence t_c .

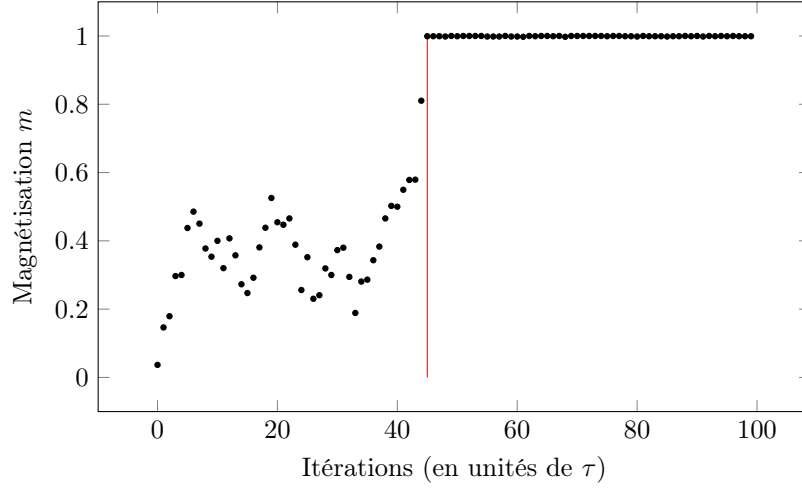


FIGURE 11 — Évolution de la magnétisation au fur et à mesure des itérations successives. Les paramètres de la modélisation sont : $N = 50 \times 50$, $T = 1.0$, $h = 0.0$, $J = 1.0$, $t_c = 45$, $\tau = 2.5 \cdot 10^5$. On observe très clairement le point où le système a convergé vers un état stable (en rouge).

6.2 Étude de la magnétisation moyenne

Nous voulons désormais calculer la magnétisation moyenne $|\langle m \rangle|$ du modèle d'Ising, et étudier son comportement en fonction de la température et du champ magnétique. La Figure 12 illustre le résultat obtenu de la magnétisation en fonction de la température :

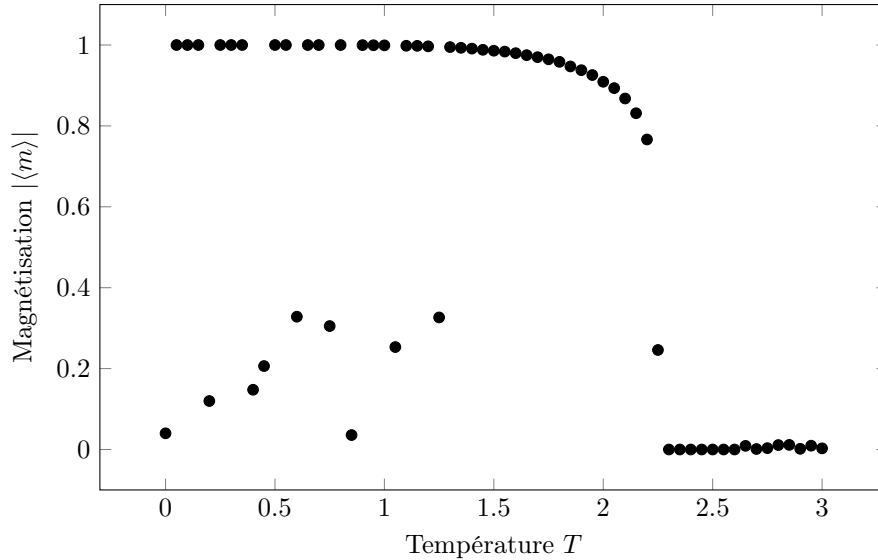


FIGURE 12 — Évolution de la magnétisation en fonction de la température. Les paramètres de la modélisation sont : $N = 50 \times 50$, $T_{\min} = 0.0$, $T_{\max} = 3.0$, $T_{\text{step}} = 0.05$, $J = 1.0$, $h = 0.0$, $\tau = 2.5 \cdot 10^5$. La magnétisation a été normalisée au nombre de spins : $m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i$.

Le graphique représente la valeur absolue de la magnétisation en fonction de la température. On retrouve bien le comportement illustré sur la Figure 2. À $T = 0$, les spins tendent à tous s'aligner dans la même direction, ce qui confirme que la méthode de Monte Carlo fait converger le système vers une configuration basse en énergie. On retrouve cependant quelques points en dessous de la courbe, entre 0 et 1.5 de température. Ceux-ci correspondent à des systèmes qui n'ont pas bien convergé, voir l'annexe A pour une discussion des limites de la méthode de Monte Carlo. On observe que, pour le modèle des plus proches voisins, la transition de phase a lieu à $T_c \simeq 2.25$.

La Figure 13 illustre le comportement de la magnétisation en fonction de la température et du champ magnétique.

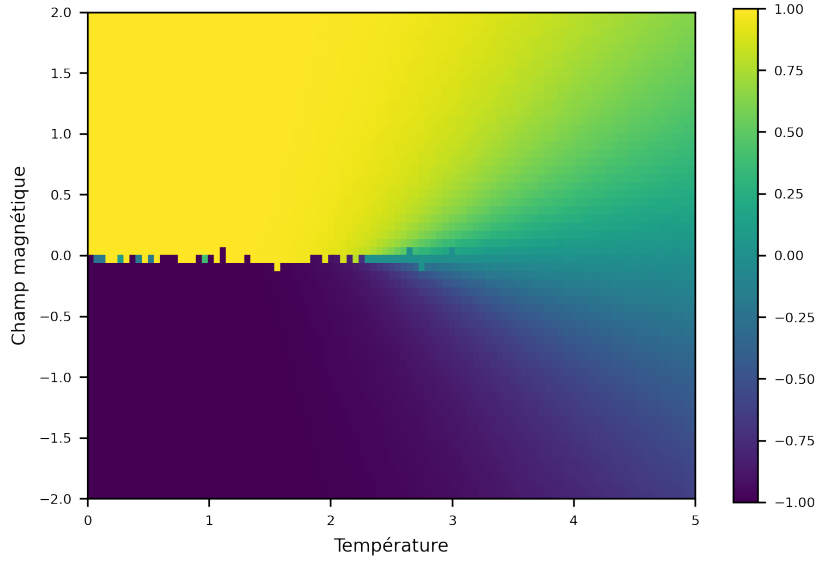


FIGURE 13 — Évolution de la magnétisation en fonction de la température et du champ magnétique. Les paramètres de la modélisation sont $N = 40 \times 40$, $T_{\text{step}} = 0.05$, $h_{\text{step}} = 0.05$, $J = 1$, $\tau = 32 \cdot 10^3$.

Il y a cette fois-ci une concurrence entre la température et le champ magnétique. À $h = 0$, on retrouve le comportement de la magnétisation trouvé sur la Figure 12. La configuration initiale choisie aléatoirement et l'évolution des spins décidera de la convergence du système vers une magnétisation de $+1$ ou de -1 .⁵ À température faible, il suffit d'un très petit champ magnétique pour faire basculer le système vers une magnétisation positive ou négative (zones jaune et violette). On observe cependant que, lorsque la température devient assez grande, le système profite de fluctuations thermiques qui lui permettent d'aligner ses spins dans le sens opposé au champ magnétique. À T grand, les fluctuations thermiques empêchent le système d'aligner ses spins dans le même sens et la magnétisation moyenne est donc nulle (zone verte).

6.3 Fonctions de corrélation

Nous présentons désormais les résultats obtenus pour la fonction de corrélation $C_{ij} = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle$. Cette quantité permet de se rendre compte de l'interdépendance qu'ont les spins avec les autres. En effet, si nous considérons un système dont tous les spins sont alignés, alors la fonction de corrélation sera égale à 1 (après normalisation). Si un système possède des spins dont l'orientation est distribuée aléatoirement, la fonction de corrélation sera égale à 0, car il y aura en moyenne autant de duos égaux à $+1$ que de duos égaux à -1 . La Figure 14 représente la fonction de corrélation en fonction de la distance L entre deux spins, pour différentes valeurs de la température. Le graphique est symétrique en raison des conditions aux bords périodiques implémentées. À faible température, la fonction de corrélation vaut 1 pour toutes les longueurs possibles. Le système est capable d'aligner tous ses spins dans la même direction, et la fonction de corrélation C_{ij} vaut $+1$ pour tous les duos possibles. On observe très bien que, dès que le système a dépassé la température critique, la fonction de corrélation tend vers 0, car les fluctuations thermiques engendrent un désordre qui annihilera l'interdépendance des spins entre eux.

⁵. La magnétisation montrée sur la Figure 12 n'illustre que des magnétisations positives, car elle est représentée en valeur absolue.

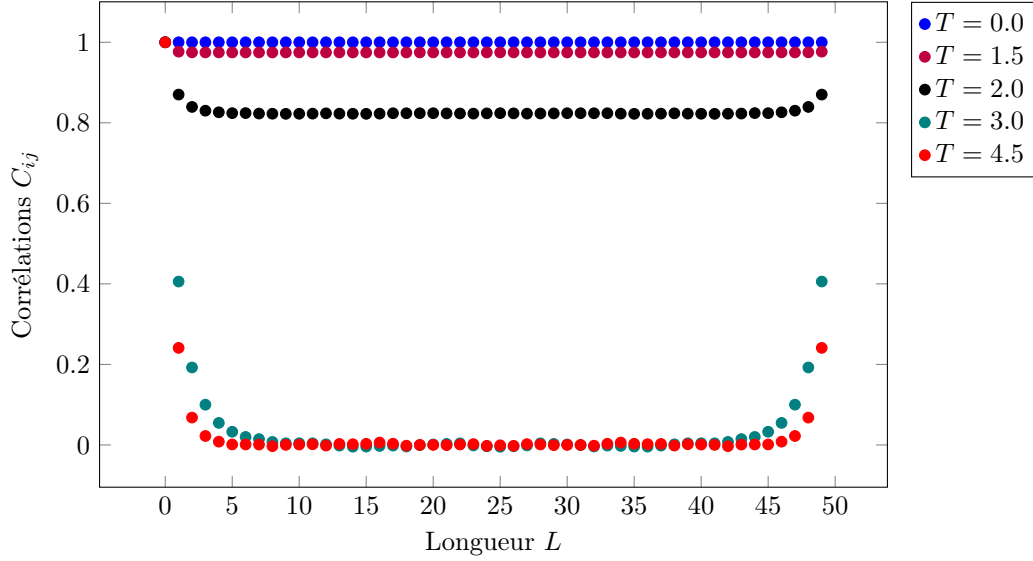


FIGURE 14 – Corrélations C_{ij} en fonction de la longueur L entre deux spins, pour différentes valeurs de la température.

7 Modélisation du modèle analytique

Les modélisations présentées dans la Section 6 ont simulé le comportement d'un modèle d'Ising dont les spins étaient influencés par leurs quatre voisins les plus proches. Les résultats nous ont permis de constater l'apparition d'une transition de phase à une température approximative de $T_c \simeq 2.5$. Ce modèle, dont l'hamiltonien est donné par la relation (5), est très complexe à résoudre analytiquement. C'est pourquoi nous avons préféré étudier analytiquement un modèle dont l'hamiltonien (équation (6)) prend en considération tous les duos de spins possibles. La démarche analytique nous a permis de déterminer la présence d'une transition de phase à $T_c = 1$ pour ce modèle. Ce deuxième modèle a été implémenté afin d'observer la magnétisation et la susceptibilité magnétique modélisées avec la méthode de Monte Carlo. La Figure 15 montre les graphiques obtenus :

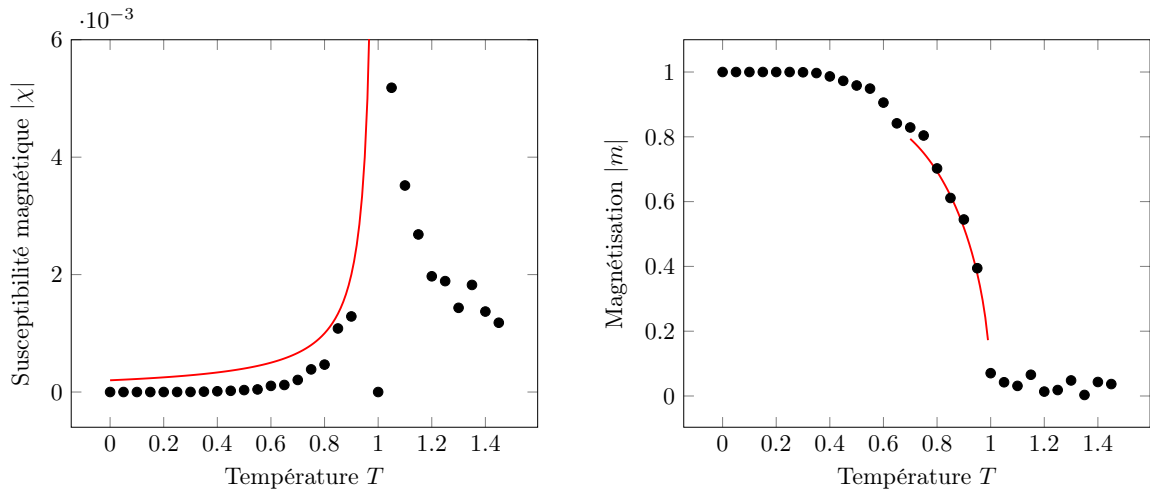


FIGURE 15 – Résultats de la modélisation pour le modèle d'Ising décrit par l'hamiltonien (6). À gauche, la susceptibilité magnétique définie par la relation $\chi = \beta(\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2)$. À droite, la magnétisation. Les points noirs résultent de la méthode de Monte Carlo, et les courbes rouges ont été implémentées selon les développements en exposants critiques donnés par les formules (55) et (59). Pour une meilleure lisibilité, le graphique de la susceptibilité a été limité à $6 \cdot 10^{-3}$.

On retrouve en noir les résultats obtenus de la modélisation. Les courbes en rouge correspondent aux développements en exposants critiques trouvés dans la Section 5.3. Les deux courbes se superposent très bien au voisinage de la température critique, et la modélisation montre une transition de phase autour

de $T_c = 1$, ce qui confirme la prédiction avancée par les développements analytiques, et prouve l'efficacité de la méthode de Monte Carlo.

8 Conclusion

Dans ce travail, nous avons étudié la transition de phase qui a lieu sur un modèle d'Ising à deux dimensions. L'étude de deux modèles différents nous a permis d'étudier analytiquement et numériquement les observables comme la magnétisation, la susceptibilité magnétique et les fonctions de corrélation, et leur évolution en fonction de la température et du champ magnétique.

La modélisation numérique ne peut pas s'inspirer des formules analytiques de mécanique statistique, principalement en raison du grand nombre de configurations, qui engendre un temps de calcul considérable. La méthode de Monte Carlo, basée sur une approche stochastique, nous a permis de surmonter ce problème, en modélisant le comportement moyen de nombreux systèmes générés aléatoirement. Cette méthode a pu être confirmée en produisant des résultats similaires à ceux obtenus analytiquement.

Références

- [1] VELENIK Yvan. *Le modèle d'Ising*. <http://www.unige.ch/math/folks/velenik/cours.html>, 2008-2009. Accessed : 2022-04-24.
- [2] J. M. YEOMAN. *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Oxford Science Publications, 2002.
- [3] Nicolas METROPOLIS and Stanislaw ULAM. The monte carlo method. *Journal of the American Statistical Association*, 44, 1949.
- [4] David P. LANDAU and Kurt BINDER. *A guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. Cambridge University Press, 2021.

Les figures dont la source n'a pas été indiquée ont été réalisées personnellement grâce aux packages `TikZ` et `pgfplots`. Les modélisations ont été développées en `C++`.

A Les limites de la méthode de Monte Carlo

L'approche stochastique de la méthode de Monte Carlo permet de modéliser l'évolution d'un modèle d'Ising, et d'étudier les propriétés de la magnétisation, de la susceptibilité magnétique et des fonctions de corrélation. Malgré sa redoutable efficacité, cette méthode ne nous prémunit pas de faire converger un système tel que son énergie n'est pas minimisée. Un exemple d'une configuration est illustré sur la Figure 16.

À température nulle, il est très compliqué de se libérer de cette configuration. En effet, à chaque itération, un spin est choisi aléatoirement, et il est beaucoup plus probable de choisir un spin dont les quatre voisins sont orientés dans la même direction, que d'en choisir un à la frontière.

Ce phénomène se fait ressentir dans les résultats, notamment dans le calcul de la magnétisation. Il s'agit des points en dessous de la courbe principale dans la Figure 12. La Figure 16 donne un exemple de comportement des fonctions de corrélation, lorsqu'un système a mal convergé. Quand on calcule les corrélations verticales $C_{ij} = \sigma_i \sigma_j$, il y aura des spins de direction opposée qui ajouteront une contribution de -1 , ce qui va avoir tendance à diminuer la valeur des corrélations. Lorsque le système converge vers une configuration « en ligne », seules les corrélations perpendiculaires à la direction de la ligne seront impactés.

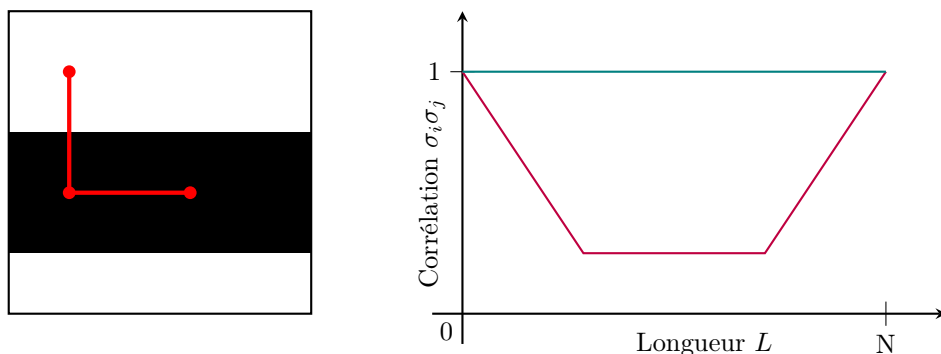


FIGURE 16 — À gauche, un exemple de système qui n'a pas convergé sur lequel les corrélations sont calculées. À droite, un diagramme théorique illustrant le comportement des corrélations horizontales (en vert) et verticales (en rouge) en fonction de la longueur.

La méthode de Monte Carlo n'est également pas optimale pour des températures proches de la température critique.

B Méthodes Stochastiques

Nous apportons dans cette annexe un peu plus d'intuition sur les raisons qui font de la méthode de Monte Carlo un outil très efficace pour modéliser des systèmes physiques. Comme ce qui a été avancé dans la Section 6, un obstacle auquel nous sommes confrontés est de pouvoir créer des systèmes dans des configurations *réalistes*, notamment celles qui minimisent l'énergie libre de ce système. Une solution serait de calculer la fonction de partition Z , mais le grand nombre de configurations nous empêche de la calculer numériquement.

Supposons que nous voulions calculer une intégrale de la forme :

$$\int_a^b f(x) dx \quad (68)$$

En analogie avec un système physique, x serait une configuration ($x \in \Omega$), dx un élément infinitésimal de l'espace des configurations et $f(x)$ serait la valeur d'une observable (donnée par f) dans la configuration x .

Nous introduisons une distribution de probabilité $P(x)$ respectant les axiomes classiques :

$$\int_a^b P(x) dx = 1 \quad (69)$$

$$P(x) > 0 \quad \forall x \in [a, b] \quad 6 \quad (70)$$

Nous pouvons donc établir la relation :

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^b \frac{f(x)}{P(x)} P(x) dx = \overline{\frac{f(x)}{P(x)}} \quad (71)$$

On définit la suite S_Q comme :

$$S_Q = \sum_{j=1}^Q \left(\frac{f(x_j)}{P(x_j)} \right) \quad (72)$$

Où les x_j sont distribués selon $P(x)$. La moyenne de S_Q est donnée par :

$$\overline{S_Q} = \sum_{j=1}^Q \overline{\left(\frac{f(x_j)}{P(x_j)} \right)} \quad (73)$$

En divisant des deux côtés par Q :

$$\frac{1}{Q} \overline{S_Q} = \frac{1}{Q} \sum_{j=1}^Q \overline{\left(\frac{f(x_j)}{P(x_j)} \right)} \quad (74)$$

Nous avons donc trouvé une expression discrète de l'intégrale initiale :

$$\int_a^b f(x) dx = \frac{1}{Q} \sum_{j=1}^Q \frac{f(x_j)}{P(x_j)} \quad (75)$$

Par le théorème limite central, dans la limite $Q \rightarrow \infty$, l'erreur sera donnée par $1/\sqrt{Q}$.

C Méthode de la selle

On démontre maintenant la relation utilisée lors du calcul de la fonction de partition :

Soit $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction à valeurs réelles, et soit $x_0 \in \mathbb{R}$ un minimum global de f . Alors, pour $N \in \mathbb{N}$ assez grand :

$$\int_{\mathbb{R}} dx e^{-Nf(x)} \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x_0)}} e^{-Nf(x_0)} \quad (76)$$

Démonstration – En effectuant un développement de Taylor de la fonction $f(x)$ au voisinage d'un minimum global x_0 :

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 + \mathcal{O}(x^3) \quad (77)$$

$$= f(x_0) + \frac{1}{2}f''(x_0)(x - x_0)^2 \quad (78)$$

Nous pouvons placer cette expression dans l'intégrale :

6. En général, il serait préférable d'écrire $P(x) \geq 0$, mais dans le cas d'un système physique, le coefficient de Boltzmann $e^{-\beta H}$ est toujours strictement positif (Un système peut se trouver dans toutes les configurations possibles).

$$\int_{\mathbb{R}} dx e^{-Nf(x)} = \int_{\mathbb{R}} dx e^{-Nf(x_0) - \frac{N}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2} = e^{-Nf(x_0)} \int_{\mathbb{R}} dx e^{-\frac{N}{2}f''(x_0)(x-x_0)^2} \quad (79)$$

$$= \sqrt{\frac{2\pi}{Nf''(x_0)}} e^{-Nf(x_0)} \quad (80)$$

Où, pour la dernière intégrale, nous avons utilisé le résultat de l'intégration d'une gaussienne.