

PROJET FINAL

Reproduction de phénoménologie ferromagnétique par modèle d'Ising

par

Pierre Breton (537 083 238)

Arthur Légaré (536 912 299)

Samuel Nadeau (536 950 199)

Remis à

Antoine Allard

pour le cours

PHY-3500 – Physique numérique

en ce 29 avril 2025

Abrégé

Ce rapport présente un projet de session portant sur le modèle de vitre de spins d'Ising en 2D. La simulation de dynamique de relaxation par l'algorithme stochastique Metropolis-Hasting a permis de mettre en évidence des phénoménologies propres au ferromagnétisme, telle l'hystérésis magnétique ainsi que la transition de phase suivant une magnétisation. Une comparaison quantitative entre les aires des boucles issues des simulations et celles prévues par une approximation de type Landau donne un écart quadratique moyen (RMS) de 0,36, montrant une bonne cohérence entre le modèle phénoménologique et la dynamique simulée. Ce cadre ouvre la voie à des extensions vers d'autres systèmes critiques en neurosciences, où des couplages entre réseaux de type Ising pourraient modéliser certains comportements émergents de l'activité neuronale collective.

Code GitHub : <https://github.com/arlegare/physnum25.git>

Table des matières

1	Introduction	1
2	Théorie	1
2.1	Hamiltonien du modèle d'Ising en 2D avec champ magnétique externe	2
2.2	L'ensemble canonique	2
2.3	Lien avec les observables	3
2.4	Solutionnement du modèle d'Ising à 2D	4
2.5	Approximation de champ moyen pour le modèle d'Ising	4
3	Méthode	6
3.1	Mise en contexte	6
3.2	Les chaînes de Markov	7
3.3	Implémentation de l'algorithme de Metropolis	8
4	Résultats	10
4.1	Simulation unique	10
4.2	Boucle d'hystérèse	11
4.3	Travail magnétique selon la température	11
5	Discussion	14
5.1	Phénoménologie ferromagnétique et paramagnétique	14
5.2	Comparaison avec la théorie de Landau	14
5.3	Limitations et perspectives	14
6	Conclusion	15
	Références	16
	Annexes	17
A	Étude de la convergence à long terme du processus de relaxation de l'algorithme Metropolis-Hastings	17
A.1	Autocorrélation d'une observable	17
A.2	Spectre de la matrice de transition d'états	17
B	Ajustement du modèle de Landau	18

1 Introduction

Dès l'Antiquité, certains penseurs se sont attelés à la non mince tâche de comprendre la matière en l'approchant comme une composition d'entités élémentaires. Personnage notable de cette mouvance, Démocrite d'Abdère, qui vécut autour du 5^{ème} siècle av. J.-C., avançait alors que toute chose était constituée d'atomes indivisibles, se mouvant dans le vide [1]. Bien que cette intuition des plus avant-gardistes ait traversé les siècles avec brio, elle n'aura guère dépassé le seuil de spéculation, à défaut d'être dotée d'assises expérimentales. Ce n'est qu'à la fin du 19^{ème} siècle, avec le développement de la physique moderne, que la structure atomique fut confirmée, amorçant ainsi un profond bouleversement dans les fondements de la physique. Le philosophe des sciences Thomas S. Kuhn qualifiera plus tard une telle rupture épistémologique de *changement de paradigme* [2], qui a ouvert la voie à une vision probabiliste et collective des phénomènes naturels.

C'est dans ce contexte qu'émerge la physique statistique, qui s'impose au tournant du 20^{ème} siècle comme cadre théorique d'importance pour comprendre les comportements émergents de la matière. Initialement conçu pour étudier le ferromagnétisme [3], le modèle d'Ising joue un rôle fondateur : il montre qu'un système décrit à l'échelle microscopique par des règles très simples peut engendrer des changements de phase macroscopiques, autrefois seulement décrits empiriquement par la thermodynamique. En cela, il réalise le rêve de Démocrite, à savoir celui d'expliquer certains changements brutaux de la nature par des changements microscopiques à l'échelle des constituants de la matière. Ce modèle, pourtant très simpliste – qui consiste en la mise en interaction de spins pouvant prendre deux orientations dans un réseau –, s'avère étonnamment fécond. Non seulement il donne un sens contemporain aux "saveurs" d'atomes que Démocrite évoquait [1], mais il sert aujourd'hui de pont entre diverses disciplines, inspirant notamment des recherches en neurosciences, en apprentissage machine, voire même en écologie [4, 5, 6] – comme quoi les modèles les plus simples peuvent parfois être porteurs des intuitions les plus profondes !

Dans un premier temps, ce document présente les fondements théoriques du modèle d'Ising, en détaillant la signification physique des variables, la construction de son hamiltonien et la démarche menant aux équations caractéristiques dans l'approximation de champ moyen. Dans un deuxième temps, la méthode de simulation stochastique employée, basée sur l'algorithme Metropolis-Hastings, est exposée. Son implémentation permet de reproduire certaines phénoménologies propres aux matériaux ferromagnétiques, notamment l'apparition d'hystérèse. Ce travail identifie aussi les régimes menant à l'hystérèse par une étude de stabilité, puis propose une caractérisation numérique en variant les paramètres critiques comme la température. De manière complémentaire, une validation par comparaison au modèle théorique de Landau est également présentée. Enfin, une discussion portant sur les résultats obtenus, sur les limitations du présent simulateur mais aussi sur les pistes intéressantes pour aller plus loin dans l'étude du modèle d'Ising tant d'un point de vue numérique qu'analytique conclura le présent rapport.

2 Théorie

D'abord posé comme un problème purement théorique par Wilhelm Lenz afin de modéliser les aimants d'une manière simpliste [7], le modèle d'Ising a été étudié sous sa forme en 1D par le scientifique éponyme, qui l'a résolu analytiquement en 1925 [3]. Cette avancée, bien que fort importante dans le domaine, fut néanmoins la seule pour Ising, qui fit là un *succès sans lendemain*. Sa méthode de solutionnement ingénieuse, basée sur les matrices de transfert [8], mit de l'avant qu'un changement de phase n'était pas admissible en se limitant à une dimension [9]. Ce ne fut qu'en 1945, avec Onsager, que la solution analytique pour le modèle à deux dimensions fut obtenue. Un changement de phase était dès lors possible, ce qui raviva l'intérêt pour les modèles d'Ising [7, 10] ! À partir d'une température critique, désormais, un système de spins corrélés présentait un comportement différent : la transition de phase.

Ce phénomène critique est particulièrement marquant dans le modèle d'Ising en deux dimensions, où, à haute température, les spins désordonnés présentent un comportement paramagnétique, tandis qu'à basse température, les spins tendent à s'aligner collectivement – donnant ainsi naissance à un ordre spontané, propre à l'état ferromagnétique. Cette transition, marquée par l'émergence d'une aimantation macroscopique, et ce, sans champ externe, illustre de

manière frappante comment un comportement collectif peut surgir à partir d'interactions locales des plus simples. C'est dans ce contexte que le présent projet s'intéresse au modèle d'Ising en deux dimensions. Il en a effet l'avantage d'être un modèle des plus simples à exhiber tout de même une phénoménologie riche et complexe ¹.

2.1 Hamiltonien du modèle d'Ising en 2D avec champ magnétique externe

Le modèle d'Ising à deux dimensions avec un champ magnétique externe est défini sur une grille carrée de taille $N \times N$, où chaque site (i, j) porte une variable de spin $s_{i,j} \in \{-1, +1\}$. Le hamiltonien \mathcal{H} [12] du système s'écrit

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j;k,l \rangle} s_{i,j} s_{k,l} - H \sum_{i,j} s_{i,j}, \quad (1)$$

où :

- J est le couplage d'interaction entre spins voisins;
- H est l'intensité du champ magnétique externe appliqué uniformément ². Celui-ci est habituellement choisi arbitrairement pour qu'il pointe dans la direction z , soit dans le même axe que les spins;
- la première somme $\sum_{\langle i,j;k,l \rangle}$ porte sur toutes les paires de spins voisins (interactions entre sites adjacents horizontalement et verticalement);
- la seconde somme $\sum_{i,j}$ est une somme sur tous les sites du réseau de spins.

Le premier terme du hamiltonien favorise l'alignement des spins voisins lorsque $J > 0$, soit dans le cas d'un matériau dit ferromagnétique, tandis que le second terme tend à aligner les spins avec la direction imposée par le champ magnétique externe H . Une compétition entre ces deux contributions, modulée par la température grâce au facteur $\beta = \frac{1}{k_B T}$, gouverne les propriétés de ce modèle. En pratique, si l'on considère seulement les interactions entre chaque spin et ses quatre plus proches voisins (haut, bas, gauche, droite), on peut écrire :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left(s_{i,j} s_{i+1,j} + s_{i,j} s_{i,j+1} \right) - H \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N s_{i,j}. \quad (2)$$

Dans la première somme, chaque paire de voisins est comptée une seule fois afin d'éviter les doubles comptages. De plus, pour limiter les effets de bord et mieux approcher le comportement d'un système infini, dit « thermodynamique » ³, des conditions frontières périodiques sont adoptées dans le présent projet numérique. Mathématiquement, ces dernières périodiques peuvent être vues comme

$$s_{N+1,j} = s_{1,j}, \quad (3)$$

$$s_{i,N+1} = s_{i,1}. \quad (4)$$

Mais le sort de ces spins nous semble jusqu'ici bien lointain de quantités physiques davantage palpables, notamment l'énergie et la magnétisation. Heureusement, un outil central de la physique statistique permet de relier la microscopie du système de spins à ses propriétés macroscopiques : la fonction de partition (6).

2.2 L'ensemble canonique

Afin de décrire notre système de spins, il convient de faire appel à la physique statistique, puisqu'elle permet de faire le pont entre le microscopique et le macroscopique. Dans le cadre du modèle d'Ising, on pose un nombre de spins qui est

1. La notion de complexité, bien que difficile à définir rigoureusement, est souvent reconnue dans le comportement émergent des grilles de spins [11].

2. À propos du champ magnétique, notez que certains auteurs ont tendance à inclure la constante μ devant le champ H . Cette dernière correspond à la norme du moment magnétique. Dans notre cas, on absorbe cette constante dans le champ magnétique, de sorte que H possède des unités d'énergie.

3. La limite thermodynamique jugée satisfaisante dans la cadre de ce présent projet consiste davantage en $N \gg 1$.

constant et on suppose que le système est en contact avec un réservoir de chaleur à une température T , de sorte que le système subit des fluctuations de température, mais qu'en moyenne la température demeure constante. C'est dans une telle situation qu'on peut utiliser l'ensemble canonique.

Avant de plonger dans les caractéristiques de l'ensemble canonique, effectuons quelques définitions par rapport à des concepts de base en physique statistique. Lorsqu'on se concentre sur des systèmes de particules ou d'entités microscopiques, on parle souvent de microétat. On peut définir un microétat comme étant une configuration spécifique des particules microscopiques qui définissent notre système macroscopique. Par exemple, pour un gaz parfait, on pourrait définir un microétat par la quantité de mouvement de chacune des particules, ainsi que leur position. Pour le modèle d'Ising, il s'agit simplement de la configuration des différents spins dans la grille. Il y a cependant une certaine dégénérescence dans les différentes configurations possibles. En effet, pour une énergie totale donnée, on peut retrouver plusieurs configurations possibles, dont le nombre est associé à l'entropie du système. Lorsqu'on utilise l'ensemble canonique, la probabilité de retrouver un microétat s d'énergie E_s se calcule à l'aide de la distribution de Boltzmann,

$$P_s = \frac{e^{-\beta E_s}}{Z}, \quad (5)$$

où $\beta = 1/k_B T$, k_B étant la constante de Boltzmann et T étant la température du réservoir de chaleur. La variable Z est quant à elle d'une grande importance, puisqu'elle permet de faire le pont entre la disposition microscopique d'un système et les quantités macroscopiques qui nous intéressent [9]. On la nomme la fonction de partition. Celle-ci est une constante de normalisation qui se détermine en sommant sur tous les microétats possibles [9], ce qui va comme

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}. \quad (6)$$

Dans le cadre du modèle d'Ising, E_i correspond au hamiltonien donné à l'équation 2.

2.3 Lien avec les observables

À partir de la fonction de partition (6), ou, de manière équivalente, de l'énergie libre de Helmholtz,

$$F = -k_B T \ln Z, \quad (7)$$

on peut sonder l'état d'un système en accédant à ses observables macroscopiques, lesquelles sont la magnétisation moyenne,

$$\langle M \rangle = -\frac{\partial F}{\partial h}, \quad (8)$$

et l'énergie interne moyenne,

$$\langle E \rangle = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta}. \quad (9)$$

La magnétisation moyenne peut également se définir de la façon suivante dans le contexte du modèle d'Ising :

$$\langle M \rangle = \mu \sum_i^N s_i, \quad (10)$$

où N est le nombre total de spins et μ est la norme du moment magnétique. Dans le cadre de ce travail, on utilisera plutôt la magnétisation moyenne spécifique $m \in [-1, 1]$, définie par :

$$m = \frac{\langle M \rangle}{\mu N} = \frac{1}{N} \sum_i s_i = \langle s \rangle. \quad (11)$$

En guise d'allègement, la magnétisation moyenne référera métonymiquement dans le reste du document à cette magnétisation moyenne spécifique (11).

2.4 Solutionnement du modèle d'Ising à 2D

La solution exacte du modèle d'Ising en deux dimensions sans champ externe, c'est-à-dire lorsque $H = 0$, a été obtenue par Lars Onsager en 1944 [13], révélant en particulier l'existence d'une transition de phase à température finie. La méthode originale reposait astucieusement sur la manipulation de matrices de transfert, tout comme Ising l'avait fait en 1925 pour la solution à une dimension [3]. Aujourd'hui, de nouvelles approches permettent de solutionner exactement ces modèles, comme celle du *nibbling* [8]. Ces méthodes de solutionnement exactes ont entre autres permis de situer la température critique [9] à

$$k_B T_c / J = \frac{2}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2,269. \implies \beta J \approx 0,441. \quad (12)$$

On la nomme également la température de Curie. C'est cette dernière qui détermine le point à partir duquel on peut retrouver une magnétisation spontanée. Le phénomène a lieu lorsque $T < T_c$ [14, 8, 9]. Un tel matériau est dit ferromagnétique, puisqu'il est capable de garder sa magnétisation en l'absence d'un champ externe. Lorsque le système dépasse cette température, l'énergie thermique des spins est trop grande pour que la force de couplage entre les spins puisse ramener le système à l'ordre. On verra plus loin que si on ajoute un champ magnétique suffisamment fort pour aligner les spins, le matériau ne gardera pas son champ magnétique s'il est au-dessus de T_c et qu'on élimine le champ. Ce comportement correspond au paramagnétisme.

2.5 Approximation de champ moyen pour le modèle d'Ising

Tel que mentionné précédemment, le modèle d'Ising en deux dimensions admet une solution analytique seulement en l'absence de champ magnétique externe. En présence d'un champ ou encore pour les modèles en trois dimensions (avec 6 spins voisins interagissant ensemble), on doit recourir à des théories approximatives. À ce chapitre, l'approximation de champ moyen est l'une des plus simples : à la place de considérer les corrélations entre les spins, on moyenne leur effet et on les combine au champ externe, de sorte que chaque spin subit un champ magnétique effectif H_{eff} . Afin de dériver l'expression du champ effectif, on doit poser que les effets de corrélations sont nuls. Ceci revient à dire que les fluctuations à un site i ne causent pas de fluctuations à un autre site j . Les fluctuations Δ autour de la moyenne pour un spin s_i donné sont données par

$$\Delta = s_i - \langle s \rangle, \quad (13)$$

où $\langle x \rangle$ est la valeur moyenne thermique de la quantité x mesurée. Dans notre cas, on veut que

$$(s_i - \langle s \rangle)(s_j - \langle s \rangle) = 0, \quad (14)$$

alors on développe l'équation, si bien que

$$s_i s_j - s_i \langle s \rangle - \langle s \rangle s_j + \langle s \rangle \langle s \rangle = 0 \implies s_i s_j = s_i \langle s \rangle + s_j \langle s \rangle - \langle s \rangle^2. \quad (15)$$

On peut remplacer l'expression dans le deuxième terme du hamiltonien 2, de sorte que :

$$\mathcal{H} = -H \sum_i s_i - J \left(\sum_{\langle i,j \rangle} s_i \langle s \rangle + \sum_{\langle i,j \rangle} s_j \langle s \rangle - \sum_{\langle i,j \rangle} \langle s \rangle^2 \right). \quad (16)$$

Les deux premiers termes dans l'expression du couplage ne dépendent que d'un seul indice, alors que le troisième ne possède aucune dépendance en i ou en j . En définissant le nombre de voisins de chaque spin par q et en introduisant un facteur $1/2$ pour éviter de compter deux fois les mêmes combinaisons, on obtient

$$\mathcal{H} = -H \sum_i s_i - \frac{J}{2} \left(\sum_i \sum_j^q s_i \langle s \rangle + \sum_j \sum_i^q s_j \langle s \rangle - \sum_i \sum_j^q \langle s \rangle^2 \right), \quad (17)$$

$$\mathcal{H} = -H \sum_i^N s_i - J \left(\frac{q\langle s \rangle}{2} \sum_i^N s_i + \frac{q\langle s \rangle}{2} \sum_j^N s_j - \frac{qN}{2} \langle s \rangle^2 \right). \quad (18)$$

Les indices sont muets, ce qui permet d'additionner les deux premiers termes dans la contribution liée au couplage :

$$\mathcal{H} = -H \sum_i^N s_i - Jq\langle s \rangle \sum_i^N s_i - \frac{qNJ}{2} \langle s \rangle^2. \quad (19)$$

On peut regrouper les deux premiers termes sous une même sommation. De plus, on remarque qu'on retrouve la définition de m donnée par 11, si bien que

$$\mathcal{H} = - \sum_i^N s_i (H + Jqm) - \frac{JNm^2}{2}. \quad (20)$$

Le deuxième terme est une constante, ce qui signifie qu'on peut l'omettre puisque le hamiltonien est invariant sous une translation. On retrouve donc simplement :

$$\mathcal{H} = - \sum_i^N s_i (H + Jqm). \quad (21)$$

Il est possible de définir le champ effectif :

$$H_{\text{eff}} = H + Jqm. \quad (22)$$

Chaque spin peut donc prendre deux valeurs possibles d'énergie, soit $E_1 = -H_{\text{eff}}$ et $E_2 = H_{\text{eff}}$. Ceci permet de calculer la fonction de partition. Pour un seul spin, on a

$$Z_1 = \sum_i e^{-\beta E_i} = e^{\beta H_{\text{eff}}} + e^{-\beta H_{\text{eff}}} \implies Z_1 = 2 \cosh(\beta(Jqm + h)). \quad (23)$$

Puisque les spins sont maintenant indépendants, la fonction de partition du système peut donc être calculée facilement par

$$Z_N = (Z_1)^N = [2 \cosh(\beta(Jqm + h))]^N, \quad (24)$$

d'où l'on peut déduire l'énergie libre de Helmholtz (7) du système ainsi que les quantités d'intérêt avec les relations 8, 11 et 9 :

$$F = -\frac{N}{\beta} \ln Z = -Nk_B T \ln [2 \cosh(\beta(Jqm + h))], \quad (25)$$

$$m = \tanh(\beta(Jm + h)), \quad (26)$$

$$u = -Jqm^2 - Hm. \quad (27)$$

où l'on a défini $u = \langle E \rangle / N$. On remarque que l'équation 26 a une forme transcendante. Celle-ci peut être résolue avec des méthodes numériques comme celle de Newton-Raphson [15]. Il peut être montré que si $H = 0$, des solutions non nulles de m existent lorsque $q\beta J \geq 1$ [9]. C'est ce qui permet de définir la température critique lorsque le champ externe est nul :

$$k_B T_c = Jq. \quad (28)$$

En dessous de cette température, m possède deux solutions stables, soit $m = 1$ et $m = -1$, alors qu'au-dessus de celle-ci, la seule solution stable est $m = 0$ [9]. On peut observer celles-ci à la figure 1 a). La solution $m = 0$ existe cependant dans les deux régimes, mais elle est instable quand $T \leq T_c$ [9]. Dans notre cas, chaque spin possède quatre voisins immédiats, ce qui implique qu'à T_c ,

$$\beta J = 0,25. \quad (29)$$

La valeur trouv  e est donc du m  me ordre de grandeur que la solution analytique de T_c pour le mod  le d'Ising en 2D sans champ externe (  quation 12), bien qu'une diff  rence significative subsiste. Cela indique que le mod  le par champ moyen parvient    capturer le comportement global du syst  me, bien qu'il ne reproduise pas fid  lement les corr  lations entre les spins    cause qu'on a moyenn   leurs effets.

D  s qu'un champ externe est appliqu  , il n'est plus possible de trouver une expression analytique pour T_c , mais l'  quation peut n  anmoins   tre r  solue num  riquement. Les figures 1b et 1c montrent que la pr  sence d'un champ externe tend    favoriser la solution de m ayant le m  me signe que le champ lorsque l'on se situe en dessous de T_c . Au-dessus de T_c , la solution stable, normalement situ  e    $m = 0$, est d  cal  e dans la direction du champ. De plus, on observe que lorsque βJ est l  g  rement sup  rieur    sa valeur critique, l'application d'un champ externe emp  che l'existence d'une solution de magn  tisation oppos  e au champ.    plus basse temp  rature, lorsque βJ est plus   lev  , l'effet du couplage entre les spins devient suffisamment important pour   ventuellement contrebalancer la contribution du champ externe, rendant ainsi accessible la solution de magn  tisation qui est oppos  e au champ.

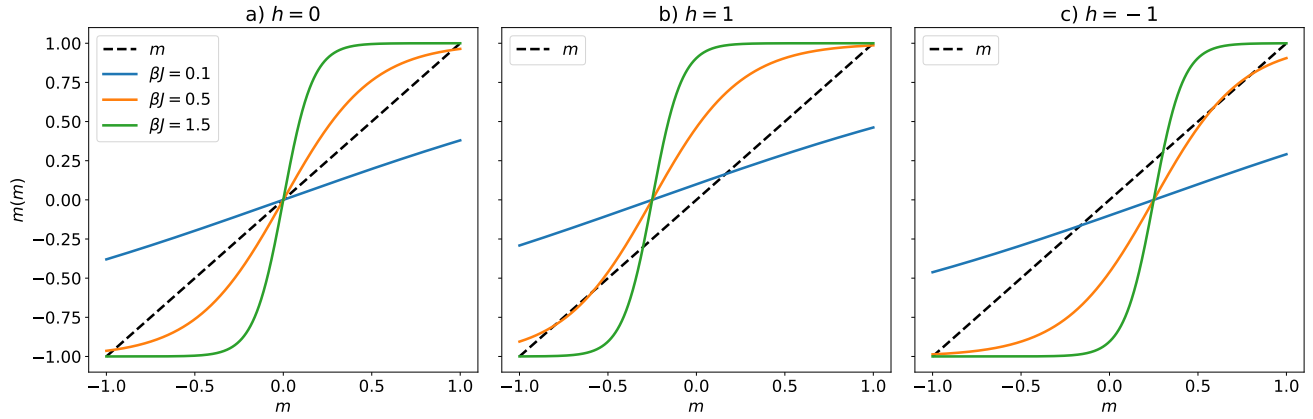


Figure 1 – Graphiques de m et du c  t   droit de l'  quation 26 pour diff  rentes valeurs de champ externe normalis   ($h = H/J$) ainsi que pour diff  rentes valeurs de βJ . Un nombre de voisins imm  diats de quatre a   t   choisi, puisqu'on s'int  resse au mod  le d'Ising en 2D. Les interceptions correspondent aux solutions : a) $h = 0$. b) $h = 1$. c) $h = -1$.

3 M  thode

3.1 Mise en contexte

Malgr   l'ing  niosit   derri  re la solution d'Onsager pour le mod  le d'Ising en deux dimensions, aucune solution analytique n'a pu   tre obtenue lorsqu'on ajoute un champ magn  tique externe au syst  me [16], de m  me que pour un nombre de dimensions sup  rieur    deux. En effet, tel qu'abord      la section 2.2, la fonction de partition correspond    une somme sur tous les micro  tats possibles. Sans avoir une expression analytique, il serait inconcevable de la calculer explicitement en   num  rant tous ces   tats, surtout lorsqu'on cherche      tudier le comportement du syst  me dans la limite o   celui-ci est compos   d'un grand nombre de spins. De plus, bien que l'approximation du champ moyen permette d'avoir une id  e du comportement du syst  me, elle laisse    d  sirer au niveau de l'exactitude, tel que discut      la section 2.5. Ainsi, pour contourner ces limitations, il devient pertinent d'utiliser une approche num  rique qui permet de d  crire le syst  me sans avoir    calculer la fonction de partition compl  te. De plus, une telle m  thode offre l'avantage de visualiser directement l'  volution temporelle de la configuration des spins et d'acc  der aux observables d'int  r  t. Les sections suivantes pr  senteront les concepts th  oriques sous-jacents    l'algorithme utilis   ainsi que les d  tails de son impl  mentation.

3.2 Les cha  nes de Markov

Un outil tr  s utile pour   viter d'  crire la fonction de partition de notre syst  me de spins est la cha  ne de Markov. On peut d  finir celle-ci comme une s  quence d'  tats (ou de variables al  atoires) pour laquelle la probabilit   de passer d'un   tat    un autre d  pend uniquement de l'  tat actuel, sans tenir compte des   tats ant  rieurs. Un exemple permettant d'illustrer une cha  ne de Markov est pr  sent      la figure 2, o   l'on consid  re un marcheur al  atoire pouvant se trouver dans trois emplacements possibles et n'effectuant qu'un d  placement    la fois entre ceux-ci. Sur cette figure, la probabilit   de passer de l'  tat 1    l'  tat 3 d  pend uniquement de l'  tat 1, et non de la mani  re dont le syst  me est parvenu    l'  tat 1. De plus, le marcheur ne garde pas en m  moire la position pr  c  dente, signifiant qu'il peut retourner    l'  tat pr  c  dent avec une certaine probabilit  . On associe ainsi une probabilit   de transition T_{ij} pour passer d'un   tat i    chacun des autres   tats j , de sorte que :

$$\sum_j T_{ij} = 1. \quad (30)$$

On note que dans certaines cha  nes de Markov, il est permis de ne pas effectuer de d  placement, ce qui implique que la probabilit   de transition T_{ii} est non nulle dans cette situation.

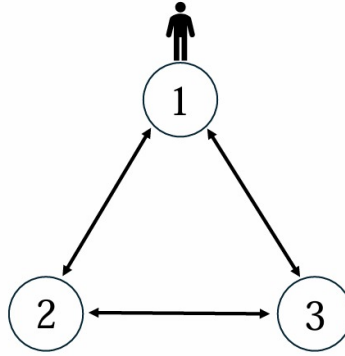


Figure 2 – Sch  ma d'un marcheur al  atoire

Si l'on revient maintenant au mod  le d'Ising, il est facile de constater que celui-ci peut   tre mod  lis   comme une cha  ne de Markov. En effet, on peut consid  rer chaque micro  tat comme une variable al  atoire, o   un micro  tat se distingue par la configuration de spins up et down sur notre grille 2D. La probabilit   de transition T_{ij} pour passer d'un   tat i    un   tat j devra cependant   tre choisie de mani  re    respecter l'  quation suivante :

$$\frac{T_{ij}}{T_{ji}} = \frac{P(E_j)}{P(E_i)} = \frac{e^{-\beta E_j} / Z}{e^{-\beta E_i} / Z} = e^{-\beta(E_j - E_i)}. \quad (31)$$

Cela garantit qu'   chaque   tape de la s  quence, la probabilit   d'atteindre un   tat donn   est conforme    la distribution de Boltzmann. Plus pr  cis  ment, la probabilit   d'obtenir un   tat sp  cifique j    partir de n'importe quel   tat i est donn  e par :

$$\sum_i T_{ij} P(E_i), \quad (32)$$

de sorte qu'en combinant avec les   quations 31 et 44, on obtient :

$$\sum_i T_{ij} P(E_i) = \sum_i T_{ji} P(E_j) = P(E_j). \quad (33)$$

Ainsi,    chaque pas, la distribution des   tats suit celle donn  e par l'ensemble canonique. Comme mentionn   pr  c  demment, il peut exister une probabilit   non nulle que l'  tat i reste inchang   lors d'un pas dans la cha  ne de Markov. Pour d  finir

les probabilit  s de transition, on permet alors    l  tat i de ne pas changer et on introduit une probabilit   d'acceptation pour passer d'un   tat i    un   tat j :

$$P_{\text{acc}} = \begin{cases} 1 & \text{si } E_j \leq E_i \\ e^{-\beta(E_j - E_i)} & \text{si } E_j > E_i. \end{cases} \quad (34)$$

Cela revient    choisir le nouvel   tat uniquement s'il diminue l'  nergie du syst  me ou, sinon,    l'accepter avec une certaine probabilit  . Cette condition d'acceptance est au coeur de l'algorithme Metropolis. Son impl  mentation sera discut  e plus en d  tail dans la section 3.3.

Si l'on consid  re un   tat o   $E_j > E_i$, en se fiant    l'  quation 34, les probabilit  s de transition deviennent :

$$T_{ij} = \frac{1}{M} e^{-\beta(E_j - E_i)} \quad T_{ji} = \frac{1}{M} \quad (35)$$

o   M est le nombre d'  tats j possibles    partir de i . T_{ij} correspond donc    la probabilit   totale de choisir une transition particuli  re parmi tous les   tats possibles. On constate que l'  quation 31 est respect  e :

$$\frac{T_{ij}}{T_{ji}} = \frac{e^{-\beta(E_j - E_i)} / M}{1/M} = e^{-\beta(E_j - E_i)}, \quad (36)$$

ce qui garantit que les   tats g  n  r  s sont des   chantillons de la distribution de Boltzmann.

3.3 Impl  mentation de l'algorithme de Metropolis

Afin de simuler le mod  le d'Ising de fa  on num  rique, l'algorithme M  tropolis est utilis  . Tel que mentionn      la section pr  c  dente, celui-ci repose sur l'  quation 34. On commence d'abord par g  n  rer une grille de spins avec un pourcentage de spins up et down en particulier et on calcule l'  nergie de ce micro  tat. Par la suite, on change le signe d'un spin al  atoire et on calcule la variation d'  nergie associ  e    ce nouveau micro  tat. Si l'  nergie a diminu  , on accepte celui-ci et on change le micro  tat, sinon, on accepte seulement l'  tat avec une probabilit   donn  e par $e^{-\beta(E_f - E_i)}$, o   E_f est l'  nergie associ  e au potentiel micro  tat final. Le processus est par la suite r  p  t   pour un nombre d'it  rations donn   ou jusqu'   ce qu'on atteigne l'  quilibre.

Dans le cadre de ce projet, il est judicieux de normaliser l'  nergie par la constante de couplage. Ceci est le cas pour deux raisons en particulier. Tout d'abord, il est g  n  ralement pr  f  rable de travailler avec des quantit  s dimensionn  es afin de relativiser le probl  me    la place d'effectuer des choix arbitraires de J et de H . De plus, la constante de Boltzmann $k_B \approx 1,38 \times 10^{-23}$ J/K est pr  sente dans le facteur β , ce qui fait perdre la pr  cision puisqu'on doit utiliser des facteurs de J qui sont de l'ordre de 100 eV afin d'obtenir des comportements de paramagn  tisme. En effet, si on se fie    l'  quation 12, si on prend une constante de couplage $J = 1$, on aurait $T_c \approx 7 \times 10^{22}$ K. On perdrait donc de la pr  cision    cause de l'erreur machine qui a lieu lorsqu'on divise des petits nombres ensemble. L'  nergie totale d'un micro  tat sera donc maintenant donn  e par :

$$E/J = - \sum_{\langle i,j;k,l \rangle} s_{i,j} s_{k,l} - h \sum_{i,j} s_{i,j} \quad (37)$$

o   $h = H/J$. L'expression pour la probabilit   d'acceptation lorsque $E_f > E_i$ devient donc :

$$P_{E_f > E_i} = e^{-\beta J(E_f - E_i)}. \quad (38)$$

Les param  tres    initialiser pour notre simulation seront donc βJ , h et le pourcentage de spins up ou down.

Pour le calcul de l'  nergie du micro  tat initial, une astuce pratique pour acc  l  rer le temps de compilation consiste    utiliser la m  thode `convolve` de `scipy.ndimage`. On peut g  n  rer un masque de dimension 3×3 , de mani  re   

considérer un spin ainsi que ses voisins immédiats. On assigne la valeur `True` aux voisins les plus proches, et la valeur `False` au spin lui-même ainsi qu'aux voisins situés aux coins de la matrice 3×3 . Par la suite, on applique la fonction `convolve` à ce masque et à la grille de spins pour calculer la contribution de l'énergie due aux corrélations entre les spins. L'argument `wrap` permet d'imposer des conditions aux frontières périodiques. Ce procédé est efficace car la convolution retourne une grille de même dimension que celle des spins, où chaque élément correspond à la somme des spins voisins associés à chaque site de la grille. On multiplie ensuite ce résultat par -1 fois la grille de spins elle-même, ce qui revient à effectuer une multiplication par $-s_i$ pour chaque spin. Finalement, on additionne cette contribution à celle provenant du champ externe pour obtenir l'énergie totale du microétat.

Après avoir obtenu l'énergie totale du microétat initial, il n'est plus nécessaire de la recalculer entièrement à chaque itération de la simulation. Puisqu'on ne modifie qu'un seul spin à la fois, il suffit de calculer la variation d'énergie associée à ce changement pour déterminer si la probabilité d'acceptation favorise le retournement du spin. La nouvelle énergie est ensuite obtenue en additionnant cette variation à l'énergie totale initiale. Pour évaluer la variation d'énergie, on effectue d'abord la somme S sur les voisins les plus proches du spin s_k choisi aléatoirement, puis on applique le calcul suivant :

$$\Delta E = E_f - E_i = -s_{k,f}h - s_{k,f}S - (-s_k h - s_k S) \implies \Delta E = -2s_k(h + S), \quad (39)$$

puisque $s_k = -s_{k,f}$.

Pour ce qui est du comportement probabiliste de l'algorithme, il est important d'utiliser un générateur de nombres permettant d'associer un identifiant (communément appelé *seed* en anglais) à une séquence spécifique de nombres aléatoires afin de rendre les simulations reproductibles. À cette fin, on utilise la classe `Generator` de *numpy* lorsque cela est possible.

3.3.1 Optimisation de l'algorithme

La principale manière d'améliorer le temps d'exécution de l'algorithme est d'utiliser la méthode *numba* de la librairie *Numba*. Cette méthode permet de convertir une fonction Python en langage C, ce qui augmente la vitesse de calcul, le langage C étant plus proche du langage machine. L'inconvénient est qu'il devient impossible d'utiliser certaines librairies comme *Scipy*, et que l'utilisation des classes est très limitée. La boucle principale de l'algorithme de Metropolis a donc dû être déplacée à l'extérieur d'une classe, à l'intérieur d'une fonction à laquelle on a appliqué le décorateur *numba*. De plus, il a été nécessaire de concevoir une fonction spécifique pour générer un identifiant (*seed*) et une séquence de nombres aléatoires associée, puisque *Numba* ne supporte pas directement le générateur de nombres aléatoires de *Numpy* permettant de sauvegarder les *seeds*.

Une autre manière d'optimiser le temps de calcul consiste à définir un critère de convergence permettant d'arrêter la simulation lorsque le système atteint l'équilibre. Le critère retenu repose sur les fluctuations relatives par rapport à la moyenne, calculées selon :

$$\frac{\sigma_E}{\langle E \rangle} \quad (40)$$

où σ_E est l'écart type de l'énergie sur l'échantillon considéré et $\langle E \rangle$ est la moyenne de l'énergie sur cet échantillon. À chaque itération, on calcule les fluctuations observées sur un certain nombre des dernières itérations et on met fin au programme lorsque celles-ci deviennent suffisamment faibles pour considérer que le système est à l'équilibre. Après plusieurs tests, il a été établi qu'un échantillon d'environ 5000 itérations et une valeur de fluctuations relatives de l'ordre de 0,002 étaient suffisants. Il fut cependant constaté que lorsque *Numba* était utilisé, il était préférable de ne pas ajouter cette condition puisque le calcul supplémentaire ralentissait le temps d'exécution plus que si on essaie de diminuer le nombre d'itérations. Une version lente du code sans *Numba* a tout de même été conservée avec cette condition, puisque l'approche demeure pertinente d'un point de vue pédagogique ainsi que dans un contexte où elle pourrait accélérer une éventuelle nouvelle mouture du présent simulateur.

4 R  sultats

4.1 Simulation unique

Une premi  re application de l'algorithme Metropolis-Hastings sur une grille comportant des conditions initiales particuli  res peut   tre caract  ris  e par un temps de convergence, ce qui est affich      la figure 3.

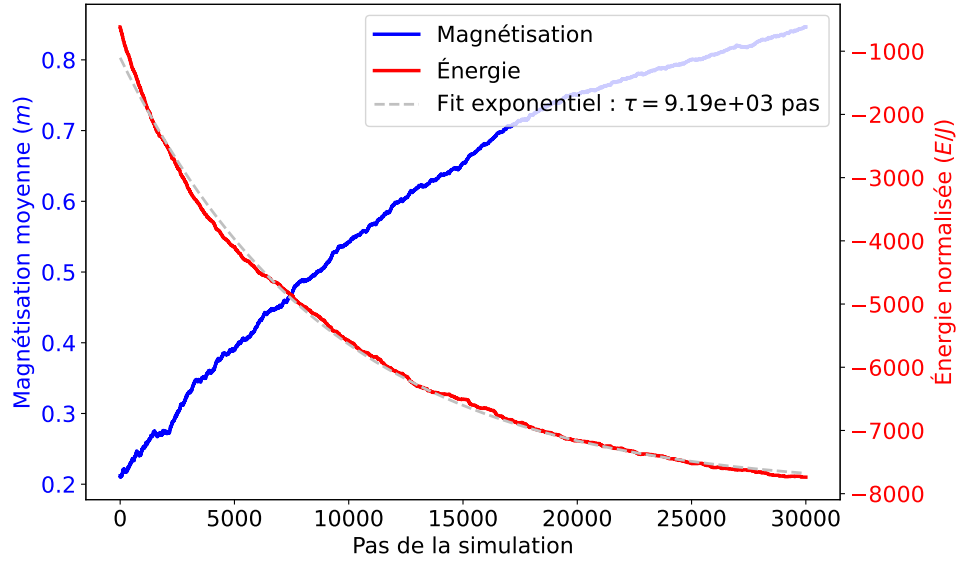


Figure 3 – Exemple de simulation d'un mod  le d'Ising en 2D avec l'algorithme Metropolis-Hastings pour $h = 0.1$, $\beta J = 1$ et une proportion initiale de spins "up" (+1) de 0,6. Cette s  rie temporelle permet d'appliquer la m  thode de d  termination de la dur  e de convergence par ajustement d'une fonction    d  croissance exponentielle, ce qui est math  matiquement   quivalent    l'autocorr  lation (voir   quation (43) en annexe A.1) dans la mesure o   l'ajustement poss  de deux degr  s de libert   suppl  mentaires pour l'  nergie finale et pour l'  nergie initiale.

La figure 4 compare quant    elle la configuration initiale des spins    la configuration finale, une fois l'algorithme appliqu  .

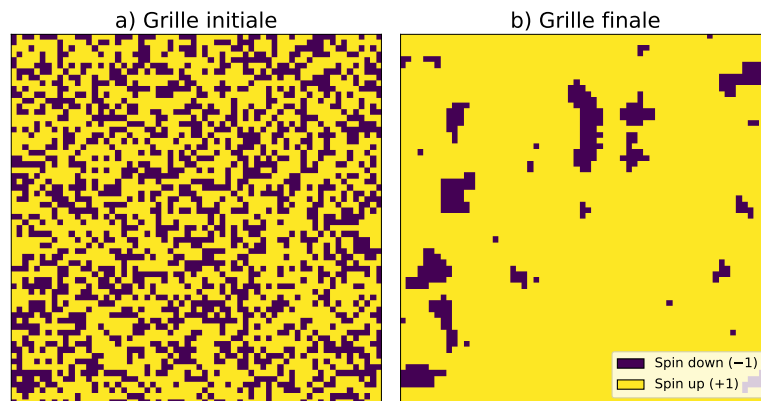


Figure 4 – Exemple de grille avant et apr  s la simulation du mod  le d'Ising en 2D avec Metropolis-Hastings pour $h = 0.1$, $\beta J = 1$ et une proportion initiale de spins "up" (+1) de 0,6.

4.2 Boucle d'hyst  r  se

Un aspect important d'un mat  riau ferromagn  tique est    sa propension    l'hyst  r  se. Or, dans le cadre th  orique actuellement pr  sent  , les solutions n'admettaient pas de bifurcation, permettant ainsi d'emprunter plusieurs branche et g  n  rant ainsi une aire. Physiquement, cette aire correspond au travail exerc   par le champ externe sur le mat  riau.

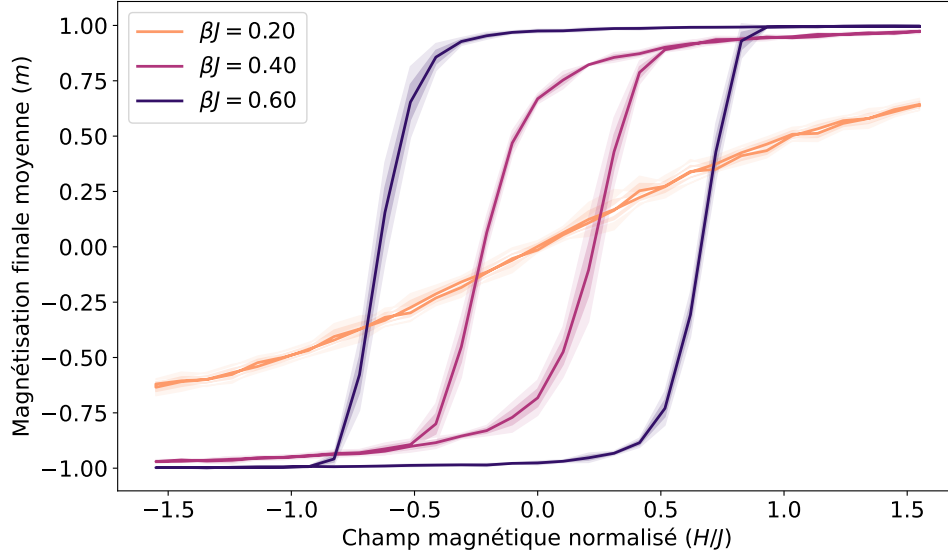


Figure 5 – Boucles d'hyst  r  se moyennes obtenues par la m  thode de Metropolis-Hastings pour diff  rentes valeurs de βJ . Les couleurs plus chaudes (vers le rouge) correspondent    des temp  ratures plus   lev  es, tandis que les couleurs plus froides (vers le bleu) correspondent    des temp  ratures plus basses. Les bandes ombr  es traduisent l'  tendue des fluctuations statistiques sur plusieurs r  alisations : la bande la plus fonc  e repr  sente un   cart-type, la plus p  le deux   carts-types.

4.3 Travail magn  tique selon la temp  rature

L'approche par champ moyen ne permet pas de d  crire le ph  nom  ne d'hyst  r  sis, car elle fournit une valeur d'aimantation m ind  pendante de l'historique du syst  me ⁴. Il en va de m  me pour la solution exacte d'Onsager.

Si la solution de m est unique, cependant, pour une valeur de champ donn  e, alors l'aire de la boucle serait nulle. Heureusement, on peut se r  concilier avec une pr  diction th  orique de l'aire de la boucle d'hyst  r  sis en faisant appel au mod  le de Landau, apte    d  crire les changements de phase de deuxi  me ordre des param  tres d'ordre.

Pour pr  dire th  oriquement l'aire de la boucle d'hyst  r  sis, nous pouvons aussi nous appuyer sur la th  orie ph  nom  nologique de Landau, qui propose d'exprimer l'  nergie libre de Landau Φ en fonction de la magn  tisation m sous la forme d'un d  veloppement en s  rie [17] ⁵. La m  thode de Landau est une m  thode g  n  rale permettant de d  crire les changements de phase d'ordre 2 subis par un param  tre d'ordre, ici m . En se limitant aux termes quadratique et quartique de ce d  veloppement pair, l'  quation d'  quilibre, obtenue en d  rivant par rapport    m , est donn  e par

$$\frac{\partial \Phi}{\partial m} = -h + 2am + 2bm^3, \quad (41)$$

o   h est le champ externe appliqu  , tandis que a et b sont des param  tres d  pendant de la temp  rature. Le coefficient a contr  le l'instabilit   de la phase paramagn  tique (pour $a > 0$) ou encore l'instabilit   vers l'  tat ferromagn  tique (pour

4. La valeur de m est obtenue par r  solution de l'  quation transcendante (26).

5. Une possible coquille trouv  e au terme quartique dans [17] (  quation 2.9) a   t   rep  r  e par l'auteur. C'est la forme corrig  e qui se retrouve dans l'  quation (41).

$a < 0$). En termes de dynamique non linéaire, il peut être vu comme le facteur modulant le terme dissipatif du système physique – ce qui est un ingrédient crucial dans un phénomène non réversible comme l’hystérésis. Le paramètre b , strictement positif, assure quant à lui la stabilité globale de l’énergie libre pour de grandes valeurs de m . À l’équilibre, c’est-à-dire lorsque $\frac{\partial \Phi}{\partial m} = 0$, le solutionnement revient à la minimisation de l’énergie libre de Landau, ce qui donne

$$h = 2am + 2bm^3. \quad (42)$$

Cette équation peut posséder plusieurs solutions de m pour une même valeur de h , ce qui est un pas dans la bonne direction! Mais ce ne sont pas nécessairement tous les minima locaux d'énergie libre qui correspondent aux branches stables de $m(h)$. Le diagramme de bifurcation 6 permet de mettre en évidence une bifurcation de type *supercritique*. En effet, des trois solutions,

- $m_0^* = 0$,
- $m_-^* = -\sqrt{-\frac{a}{b}}$,
- $m_+^* = +\sqrt{-\frac{a}{b}}$,

seules les solutions non nulles m_+^* et m_-^* sont stables pour $a < 0$, tandis que, pour $a > 0$, m_0^* devient la seule solution stable. Dans un contexte de magnétisation ferromagnétique, toutefois, seules les solutions réelles nous intéressent, alors nous nous restreignons à l'exploration de $a < 0$.

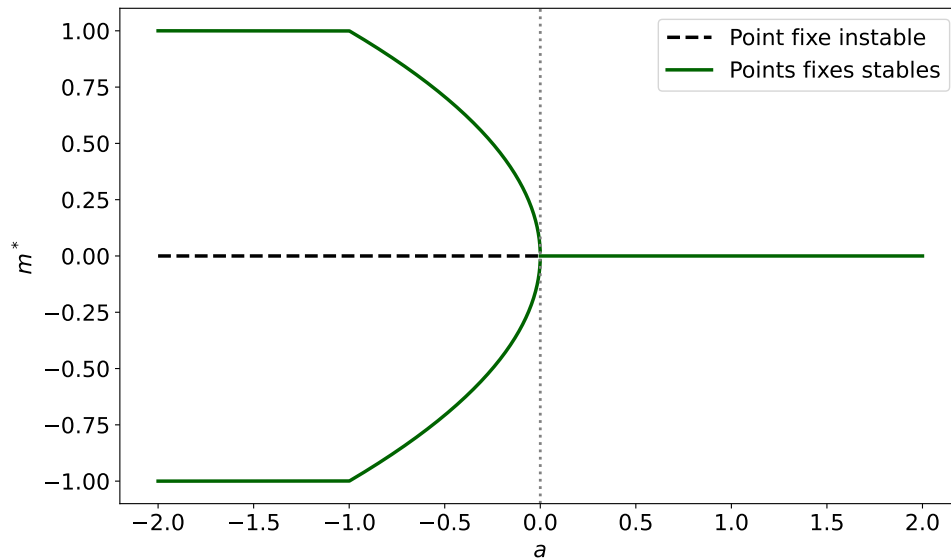


Figure 6 – Diagramme de bifurcation de la configuration stable de magnétisation moyenne m^* selon le paramètre a dans le modèle de Landau. Nous fixons $b = 1$, puisque la richesse phénoménologique est explorable par balayement de a . Ceci met en évidence qu'à $h = 0$, il existe deux solutions stables pour $a < 0$. Les solutions sortant du domaine de $m^* \in [-1, 1]$ ont été tronquées de manière respecter le domaine physique de (11). Lorsqu'un champ externe est introduit dans le modèle de Landau, l'allure des solutions de magnétisation moyenne m^* change considérablement (voir annexe 9).

L'hystérèse apparaît lorsque le système dynamique emprunte séquentiellement une branche stable puis l'autre, selon le sens dans lequel le paramètre a varie. La figure 7 montre un exemple de boucle d'hystérésis pouvant ainsi être obtenue avec le modèle de Landau.

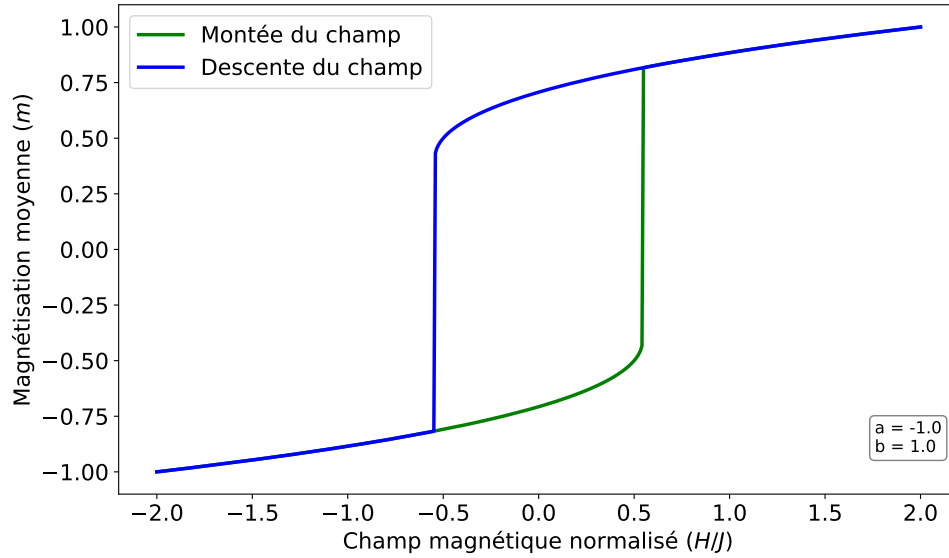


Figure 7 – Exemple de boucle d’hyst  r  sis obtenu pour $a = -1$ et $b = 1$ avec le mod  le de Landau.

Afin de confronter la pr  diction de la th  orie de Landau aux r  sultats de simulation, nous ajustons les param  tres a et b pour obtenir le meilleur recouvrement possible entre les aires de boucles d’hyst  r  sis calcul  es et celles extraites des donn  es simul  es en fonction de βJ . Le param  tre a est ajust   de mani  re    reproduire l’  volution principale de l’aire avec βJ , tandis que b est   galement optimis   pour raffiner l’accord sur l’amplitude globale.

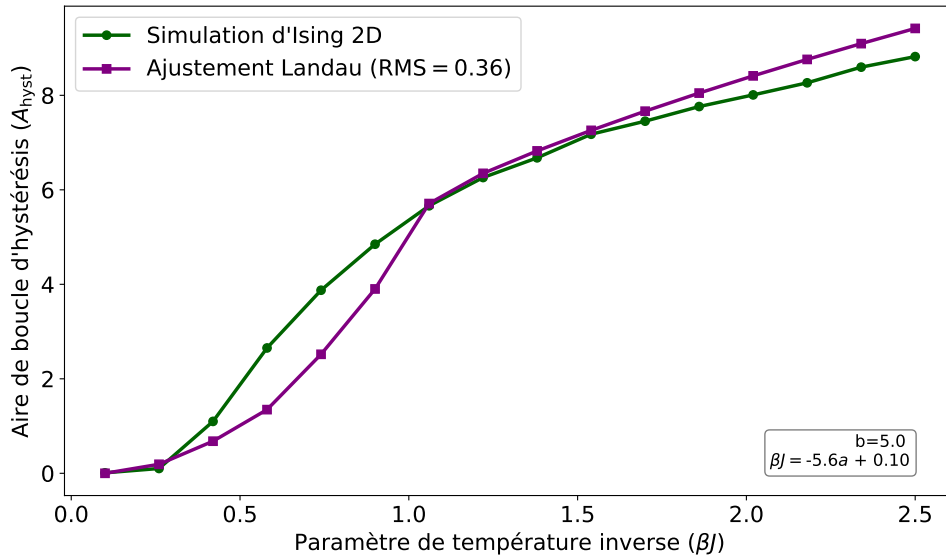


Figure 8 – Comparaison des aires de boucle d’hyst  r  sis (correspondant au travail exerc   par le champ magn  tique) pour les simulations du mod  le d’Ising avec celles du mod  le de Landau en fonction du param  tre inverse de temp  rature βJ . L’aire des boucles d’hyst  r  sis est calcul  e avec la m  thode des trap  zes. Les param  tres a et b sont ajust  s pour optimiser l’accord entre les deux courbes (quantifi   par l’  cart RMS) au moyen d’une recherche en grille (voir figure 10 en annexe B).    noter que la correspondance entre βJ et a pour comparer la courbe obtenue avec Landau    celle des donn  es de simulation est encapsul  e dans la relation lin  aire $\beta J = -5,6a + 0,1$.

5 Discussion

5.1 Phénoménologie ferromagnétique et paramagnétique

Les résultats obtenus à partir des simulations du modèle d'Ising en 2D via l'algorithme de Metropolis-Hastings reproduisent fidèlement les comportements typiques des matériaux ferromagnétiques. En effet, à basse température (βJ élevé), les boucles d'hystérésis observées à la figure 5 présentent une aire significative, indiquant une magnétisation rémanente. Ce comportement est attribuable à l'alignement spontané des spins en raison des interactions d'échange dominantes, ce qui conduit à une magnétisation moyenne nulle même en l'absence de champ externe. À mesure que la température augmente (valeurs décroissantes de βJ), une transition vers un comportement paramagnétique est observée. Dans ce régime, les boucles d'hystérésis s'amincissent jusqu'à devenir quasi inexistantes, reflétant une magnétisation moyenne nulle en l'absence de champ externe. Ce phénomène est cohérent avec la transition de phase de second ordre prédite par le modèle d'Ising, où la température critique marque le passage d'un très ordonné (ferromagnétique) à un état désordonné (paramagnétique).

5.2 Comparaison avec la théorie de Landau

La théorie phénoménologique de Landau, qui modélise l'énergie libre d'un paramètre d'ordre, la magnétisation moyenne m dans notre cas, offre un cadre analytique pertinent pour comprendre la transition de phase observée. Ainsi, en développant l'énergie libre en série de puissances paires de m , la théorie de Landau prédit l'existence de minima multiples de l'énergie libre en-dessous de la température critique, correspondant aux états ferromagnétiques stables.

L'ajustement grâce à une recherche en grille (voir B) des paramètres a et b du modèle de Landau aux résultats de simulation permet de reproduire qualitativement l'évolution de l'aire des boucles d'hystérésis en fonction de βJ , ce qui est mis en évidence à la figure 8. Cette bonne correspondance entre les deux tracés, qui se chiffre par une erreur quadratique moyenne de 0,36, suggère que malgré ses simplifications, la théorie de Landau capture les aspects essentiels de la transition de phase et de l'hystérésis dans le modèle d'Ising. Ceci confirme l'appartenance du paramètre d'ordre m à une quantité subissant un changement de phase de deuxième ordre, tel qu'approché par la théorie de Landau.

5.3 Limitations et perspectives

Il est important de noter que la taille finie de la grille utilisée dans les simulations, soit de 64×64 dans notre cas, peut introduire des effets de taille finie, notamment près de la température critique T_c . Bien que les conditions aux limites périodiques atténuent quelque peu ces effets, une analyse de la portée de corrélation des spins permettrait notamment de mieux comprendre l'effet de la taille sur les résultats. Ceci permettrait de fournir des résultats plus représentatifs du comportement dans la limite thermodynamique, tel que souhaité dans le présent contexte où nous souhaitons décrire les propriétés d'un matériau comportant un grand nombre de particules, par exemple de l'ordre de $N \sim 10^{23} \gg 1$.

Qui plus est, l'algorithme Metropolis-Hastings, bien qu'assez efficace, présente des limitations près du point critique (12) en raison du ralentissement critique. L'utilisation d'algorithmes concurrents pourrait possiblement améliorer l'efficacité dans cette région.

Enfin, l'extension du modèle d'Ising à des systèmes plus complexes, tels que les réseaux neuronaux, constitue une perspective intéressante. La capacité du modèle à reproduire des phénomènes d'hystérésis et de transition de phase en fait un outil pertinent pour l'étude de systèmes présentant des comportements collectifs émergents.

6 Conclusion

En somme, ce travail a permis de vérifier que le modèle d'Ising en 2D reproduit fidèlement la phénoménologie ferromagnétique attendue, c'est-à-dire l'apparition d'une magnétisation spontanée, de boucles d'hystérésis à basse température ainsi qu'une transition vers un comportement paramagnétique. Le modèle accomplit ainsi l'un des objectifs historiques pour lesquels il avait été introduit.

Au-delà de cette validation qualitative, une analyse plus fine, notamment autour des exposants critiques, pourrait permettre de dégager les signatures d'universalité caractéristiques de certains systèmes complexes. Ce type d'approche est couramment exploré dans les études de verres de spin et de transition de phase en physique statistique.

Enfin, les phénomènes d'hystérésis et de transition collective ne se limitent pas qu'aux matériaux réputés magnétiques : on les retrouve aussi dans de nombreux systèmes dynamiques, y compris biologiques. Des applications en modélisation neuronale pourraient dès lors être considérées. On pourrait s'imaginer par exemple des réseaux de grilles d'Ising interconnectées, où la magnétisation locale jouerait le rôle d'un potentiel d'action projeté vers d'autres régions, à travers une matrice de couplage. Une telle perspective mériterait pour son fort potentiel interdisciplinaire d'être explorée, bien qu'elle présenterait plusieurs difficultés techniques dans la réalisation d'un couplage magnétique effectif.

Références

- [1] D. Laërte. « Vies et doctrines des philosophes – Démocrite (Livre IX, chapitre 7) ». 1847.
- [2] T. S. Kuhn. *La structure des révolutions scientifiques*. en. Flammarion.
- [3] E. Ising. « Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus ». de. *Zeitschrift für Physik* 31.1 (1925), p. 253-258.
- [4] T. K. Das et al. « Highlighting the Structure-Function Relationship of the Brain with the Ising Model and Graph Theory ». *BioMed Research International* 2014 (2014), p. 237898.
- [5] J. Laydevant, D. Marković et J. Grollier. « Training an Ising machine with equilibrium propagation ». en. *Nature Communications* 15.1 (2024), p. 3671.
- [6] V. R. Nareddy et al. « Dynamical Ising model of spatially coupled ecological oscillators ». *Journal of The Royal Society Interface* 17.171 (2020), p. 20200571.
- [7] S. G. BRUSH. « History of the Lenz-Ising Model ». *Reviews of Modern Physics* 39.4 (1967), p. 883-893.
- [8] J. S. Walker. *A Student's Guide to the Ising Model*. en. Cambridge University Press, 2023.
- [9] H. Gould et J. Tobochnik. *Statistical and Thermal Physics : With Computer Applications*. Princeton University Press, 2010.
- [10] M. Niss. « History of the Lenz-Ising Model 1920–1950 : From Ferromagnetic to Cooperative Phenomena ». en. *Archive for History of Exact Sciences* 59.3 (2005), p. 267-318.
- [11] D. L. Stein et M. M. Newman. *Spin Glasses and Complexity*. Princeton University Press, 2013.
- [12] T. D. SCHULTZ, D. C. MATTIS et E. H. LIEB. « Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions ». *Reviews of Modern Physics* 36.3 (1964), p. 856-871.
- [13] L. Onsager. « Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition ». *Physical Review* 65.3-4 (1944), p. 117-149.
- [14] G. F. Newell et E. W. Montroll. « On the Theory of the Ising Model of Ferromagnetism ». *Reviews of Modern Physics* 25.2 (1953), p. 353-389.
- [15] M. Newman. *Computational Physics*. CreateSpace Independent Publishing Platform, 2013.
- [16] A. J. Berlinsky et A. B. Harris. « The Ising Model : Exact Solutions ». en. *Statistical Mechanics*. Springer, Cham, 2019, p. 441-476.
- [17] P. C. Hohenberg et A. P. Krekhov. « An introduction to the Ginzburg–Landau theory of phase transitions and nonequilibrium patterns ». *Physics Reports. An introduction to the Ginzburg–Landau theory of phase transitions and nonequilibrium patterns* 572 (2015), p. 1-42.
- [18] D. A. Levin et Y. Peres. « Markov Chains and Mixing Times, second edition ». en (2009), p. 371.

Annexes

A   tude de la convergence    long terme du processus de relaxation de l'algorithme Metropolis-Hastings

A.1 Autocorr  lation d'une observable

Dans notre cas, l'  nergie convient particuli  rement bien, vu qu'elle est calcul  e    chaque it  ration de l'algorithme. Nous pouvons donc en faire une autocorr  lation, ce qui s'exprime comme

$$C(t) = \langle E(0)E(t) \rangle - \langle E \rangle^2 \propto e^{-t/\tau_{\text{convergence}}}. \quad (43)$$

Cette m  thode demande toutefois de se baser sur des applications pr  c  dentes de l'algorithme sous des m  mes conditions. En enregistrer un tableau r  pertoriant les   tats de la grille d'Ising, il est possible d'estimer la dur  e de convergence d'une grille initiale donn  e.    noter que l'ajustement d'une fonction    d  croissance exponentielle, m  ne    l'obtention de la m  me constante de temps τ , puisque (43) n'est que la forme centr  e et r  duite de la fonction exponentielle constat  e en 3.

Une autre m  thode, bas  e sur le spectre de la matrice de transition, est pr  sent  e en annexe A.2. N  anmoins, cette m  thode est impraticable dans notre cas, puisqu'elle requiert le traitement de matrices de taille $2^N \times 2^N$.

A.2 Spectre de la matrice de transition d'  tats

Dans un monde id  al, nous nous int  resserions uniquement    la matrice de transition de Markov, not  e T , o   T_{ij} encode la probabilit   de passer d'un micro-  tat i    un autre micro-  tat j . Par construction, cette matrice a pour propri  t   de pr  senter une somme des coefficients de chaque ligne   gale    1 :

$$\sum_{j=1}^N T_{ij} = 1. \quad (44)$$

D'apr  s la th  orie des processus de Markov discrets [18], toute matrice stochastique poss  de au moins une valeur propre $\lambda_1 = 1$ associ  e    un vecteur propre    composantes positives repr  sentant l'  tat stationnaire σ . En effet, ce vecteur satisfait :

$$\sigma^T T = \sigma^T. \quad (45)$$

De mani  re g  n  rale, la matrice T n'est pas sym  trique, car les probabilit  s T_{ij} et T_{ji} peuvent diff  rer. Dans ce cas, ses valeurs propres peuvent   tre complexes. Toutefois, dans le cas particulier o   la dynamique satisfait la condition de *r  versibilit  *, ce qui est bien le cas du mod  le d'Ising avec l'algorithme Metropolis-Hastings [18],

$$\sigma_i T_{ij} = \sigma_j T_{ji} \quad \forall (i, j), \quad (46)$$

il est possible de construire une matrice sym  trique *semblable*    T ,    un changement de base pr  s. Plus pr  cis  ment, en posant

$$S_{ij} := \sqrt{\sigma_i}^{-1} T_{ij} \sqrt{\sigma_j}, \quad (47)$$

on obtient une matrice S qui est sym  trique, c'est-  -dire que $S_{ij} = S_{ji}$. Or, deux matrices semblables poss  dent le m  me spectre. Ce faisant, T est semblable    une matrice sym  trique, ce qui garantit que toutes ses valeurs propres λ_i sont r  elles et de norme absolue inf  rieure    1. Ainsi, bien que T ne soit pas n  cessairement sym  trique, son spectre est r  el et son comportement spectral est bien contr  l  .

La diagonalisation aux valeurs propres de T prend la forme

$$T = P\Lambda P^{-1}, \quad (48)$$

o   Λ est une matrice diagonale contenant les valeurs propres λ_i et P est la matrice des vecteurs propres.

$$T = \sum_{l=1}^{2^N} \lambda_l \mathbf{v}_l \mathbf{v}_l^T, \quad (49)$$

o   \mathbf{v}_l est le vecteur propre associ      la valeur propre λ_l .

Par orthogonalit   de la matrice de changement de base P ,   lever T    la puissance n , revient simplement      lever    la puissance n la matrice Λ , si bien que

$$T^n = P\Lambda^n P^{-1}, \quad (50)$$

ce qui conduit au d  veloppement spectral :

$$T^n = \sum_{l=1}^{2^N} \lambda_l^n \mathbf{v}_l \mathbf{v}_l^T. \quad (51)$$

Chaque mode est donc pond  r   par λ_l , ce qui signifie que les modes associ  s aux valeurs propres de module strictement inf  rieur    1 d  croissent exponentiellement,    raison de λ_k^n pour $k > 1$. Pour   tudier la vitesse de convergence, nous nous int  ressons au second terme du spectre, contr  l   par λ_2 , la deuxi  me valeur propre en module :

$$T^n \approx \lambda_1^n \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T + \lambda_2^n \mathbf{v}_2 \mathbf{v}_2^T. \quad (52)$$

La dur  e de convergence τ_{conv} peut ainsi   tre estim  e par (53), qui met en   vidence que, plus λ_2 est proche de 1, plus la convergence est lente.

$$\tau_{\text{conv}} \sim \frac{1}{1 - \lambda_2}. \quad (53)$$

   plus long terme, soit pour de grandes puissances de T , la dynamique est domin  e par les valeurs propres de norme sup  rieure. Puisque $\lambda_1 = 1$ est la plus grande et unique valeur propre, nous avons,    long terme, que

$$T^n \approx \mathbf{v}_1 \mathbf{v}_1^T, \quad (54)$$

ce qui correspond    la convergence vers l'  tat stationnaire.

En pratique, pour un syst  me de N spins, le nombre d'  tats est 2^N , rendant la matrice T de dimension $2^N \times 2^N$. Dans le pr  sent travail, nous avons $N = 64$. Cette taille exponentielle est d'autant plus rebutante pour toute tentative d'analyse spectrale directe. C'est pourquoi nous recourrons    des m  thodes alternatives, comme l'analyse de l'autocorr  lation d'observables, pour estimer empiriquement le temps de convergence.

B Ajustement du mod  le de Landau

Voici le solutionnement num  rique de la magn  tisation moyenne pour a vari   et $b = 1$.

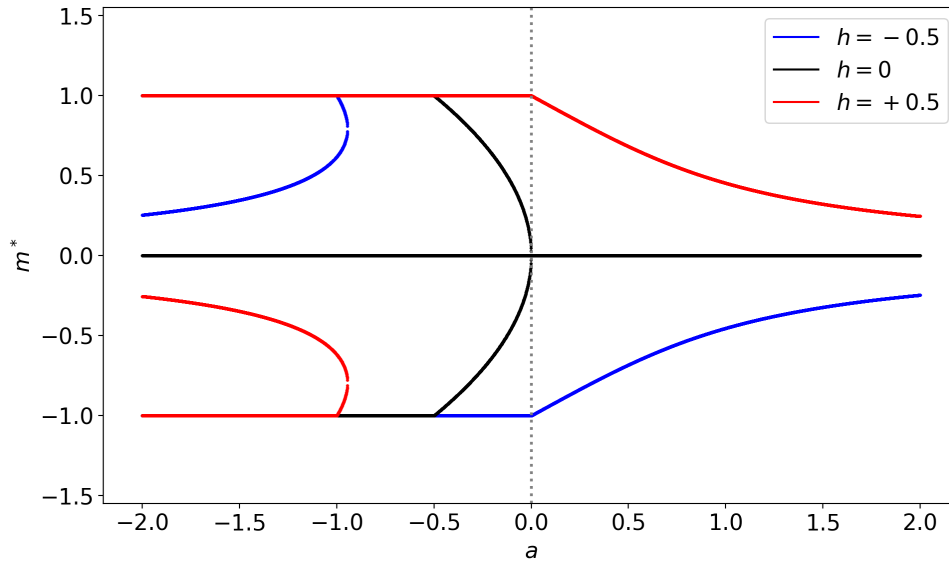


Figure 9 – Visualisation des diff  rentes solutions pour trois valeurs de champ ($h = -0,5$, $h = 0$, $h = 0,5$). La fonction `numpy.roots` est utilis  e pour solutionner l  quation (41) de mani  re g  n  rale (seul le cas $h = 0$ permet un solutionnement analytique convivial, affich      la figure 6), puis les solutions r  elles sont retenues.

Une recherche en grille, en balayant un facteur χ et un rapport $\nu = \frac{a}{b}$, a   t   effectu  e afin d’identifier une configuration pr  sentant une bonne correspondance (et minimisant l’erreur quadratique moyenne, dite RMS, entre les deux courbes d’aires selon βJ). Les param  tres a et b ont   t   calcul  s    partir de ces ratios gr  ce   

$$b = \chi, \quad (55)$$

$$a = -\nu, \quad (56)$$

qui sont balay  s. La figure 10 pr  sente un exemple de recherche en grille.

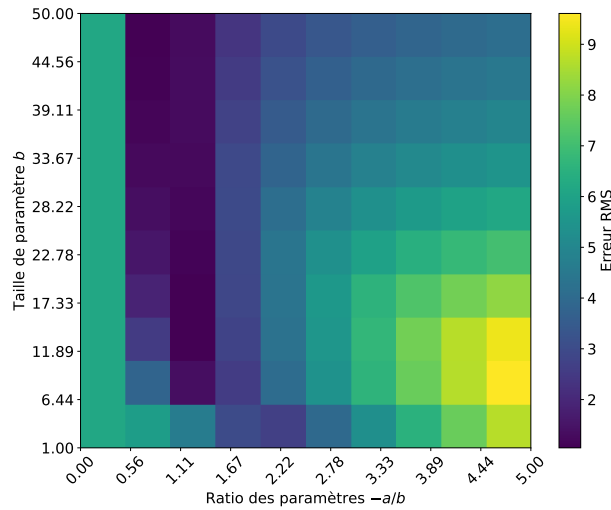


Figure 10 – Carte de l’erreur quadratique moyenne (RMS) pour plusieurs configurations balay  es.