



Projet de Physique numérique : le modèle Ising 2D

Théophile Charmont

January 15, 2018

Contents

1	Introduction	2
2	Méthodologie	2
2.1	Hypothèses et simplifications	2
2.2	Algorithme de Métropolis-Hastings	3
2.3	Implémentation	4
3	Résultats et conclusion	4
3.1	Cadre de la simulation	4
3.2	Résultats	5
3.3	Conclusion	7
4	Référence bibliographique	8

1 Introduction

Le modèle d'Ising est un modèle utilisé en physique statistique pour décrire la physique des matériaux ferromagnétiques et notamment la transition de phase ferromagnétique/paramagnétique se produisant à la température de Curie. Il permet d'étudier le comportement de particules discernables à un degré de liberté, les spins dans notre cas.

Dans ce projet, nous nous intéresserons en particulier au modèle d'Ising en 2 dimensions avec les spins positionnés suivant une grille carré. En effet, le modèle d'Ising 1D semblait trop simple pour être le sujet du projet et le modèle d'Ising 3D ne possède pas de solutions analytiques, contrairement au modèle d'Ising 2D. Ainsi nous pouvons comparer nos résultats à une valeur théorique. Cette solution exacte en champ nul a été établie en 1944 par Lars Onsager en généralisant la méthode des matrices de transfert au cas bidimensionnel. Cette méthode étant assez compliquée, nous ne détaillerons pas le calcul, mais nous nous servirons directement du résultat final établissant la température de Curie à $T_C = \frac{2 \times J}{\ln(1+\sqrt{2})} \approx 2.269 \times J$. Dans la suite de notre étude, nous prendrons le paramètre le terme d'interaction entre deux spins J égal à 1. Un J positif signifie que nous nous plaçons dans le cas ferromagnétique.

A travers cette simulation, nous chercherons donc à mettre en évidence et à expliquer le phénomène de transition de phase pour différentes valeurs de champ magnétique.

2 Méthodologie

2.1 Hypothèses et simplifications

Les hypothèses et simplifications sont les suivantes :

- Les spins interagissent uniquement avec leurs voisins les plus proches.
- Le champ magnétique h est constant durant une simulation.
- Le système est ergodique.

Le modèle d'Ising consiste à mettre les moments magnétiques du système alignés sur une grille. Ils peuvent prendre la valeur -1 ou +1.

La transition de phase correspond au passage d'une phase ordonnée où les spins sont alignés dans le même sens et donc le champ magnétique global est non nul et une phase de désordre où le champ magnétique global est nul.

Le hamiltonien du système à N particules nous donne l'énergie et s'écrit :

$$H(\sigma) = -J \sum_{\langle i,j \rangle=1} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i \quad (1)$$

où σ_i correspond à la valeur du spin i et h est la valeur du champ magnétique externe.

2.2 Algorithme de Métropolis-Hastings

Pour une température donnée, l'hypothèse d'ergodicité fait que le système évolue vers un état d'équilibre presque sûrement, i.e. pour tout température sauf la température de Curie, le système converge vers un état d'équilibre. Nous devons donc choisir un algorithme pour modéliser l'évolution du système.

Pour simuler le modèle d'Ising 2D, nous avons choisi d'utiliser l'algorithme de Métropolis-Hastings. Cet algorithme est une méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov. Pour rappel, une méthode de Monte Carlo s'appuie sur la loi forte des grands nombres et consiste à réaliser un grand nombre de tirages aléatoires pour calculer une valeur moyenne. Pour revenir à la physique, nous savons que la probabilité que l'état soit à l'équilibre est $\mathbb{P}(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z}$ où $\beta = \frac{1}{k_B T}$ et Z est la fonction de partition du système à la température T . Nous pouvons ainsi déterminer la probabilité d'acceptation d'un nouvel état final σ_f par rapport à un état initial σ_i :

$$\frac{\mathbb{P}(\sigma_i)}{\mathbb{P}(\sigma_f)} = \frac{\frac{e^{-\beta H(\sigma_i)}}{Z}}{\frac{e^{-\beta H(\sigma_f)}}{Z}} = e^{-\beta(H(\sigma_i) - H(\sigma_f))} = e^{-\beta \Delta H} \quad (2)$$

Nous pouvons alors distinguer deux cas après une itération de l'algorithme :

- Si $\Delta H \leq 0$, alors $\mathbb{P}(\sigma_i) \geq \mathbb{P}(\sigma_f)$ et le nouvel état σ_f est accepté et nous inversons le spin.
- Si $\Delta H \geq 0$, alors $\mathbb{P}(\sigma_i) \leq \mathbb{P}(\sigma_f)$ et le nouvel état σ_f est accepté avec une probabilité de $e^{-\beta \Delta H}$, i.e. soit une variable aléatoire U de loi uniforme(0,1) et de réalisation u . Si $u \leq e^{-\beta \Delta H}$, alors nous inversons le spin.

C'est dans cette itération que nous trouvons le point essentiel de l'algorithme de Métropolis-Hastings. En effet, nous ne sommes pas obligés de connaître la fonction de partition du système pour déterminer le nouvel état. Seul la différence d'énergie $\Delta H = H(\sigma_f) - H(\sigma_i)$ entre les deux états doit être connu, ce qui allège grandement les calculs et évite de déterminer la fonction de partition qui peut être complexe. Nous pouvons également comprendre pourquoi nous avons parlé de méthode par chaîne de Markov car le nouvel état du système est entièrement déterminé par le résultat de la dernière itération.

Pour obtenir un système proche de l'équilibre, nous devons réaliser un grand nombre d'itérations. Ce nombre d'itérations doit être d'autant plus important que nous sommes proche de la température critique du changement de phase. En effet, la vitesse de convergence autour de cette valeur critique est faible par rapport à celles des autres températures.

Nous pouvons dès maintenant déduire des propriétés physiques de notre système. Si $T \rightarrow 0$, alors $e^{-\beta \Delta H} \rightarrow 0$ et donc le système converge rapidement vers un état d'équilibre. Si T est grand devant ΔH , alors $e^{-\beta \Delta H} \rightarrow 1$ et les états d'équilibre deviennent équiprobables, l'aimantation tend à être nulle pour un champ magnétique externe nul aussi.

2.3 Implémentation

Pour répondre à la problématique du modèle d'Ising par une méthode de Monte Carlo, nous devons avoir un programme permettant de réaliser un grand nombre de calcul rapidement. Nous avons donc découpé notre code en classe en limitant les instanciations inutiles. Durant le projet, nous avons veillé à réaliser une couverture de tests la plus complète possible pour éviter les régressions. Elle est lançable à tout moment avec la commande `make check`. Nous avons choisi d'implémenter nous même une classe gérant les matrices nécessaires à la simulation. Pour le générateur aléatoire de notre classe `IsingModel`, nous avons choisi le Mersenne Twister pour sa grande période ($2^{19937} - 1$) et sa rapidité (4 fois plus rapide que le `rand()` du C++). Tous les exécutable sont générés avec CMake et nous proposons un script shell pour générer le fichier build facilement. Enfin, nous proposons également un exécutable à l'utilisateur auquel il est possible de passer des arguments pour sélectionner certains paramètres (pour un choix complet, il est possible de modifier facilement le code de la classe `Main`):

```
--energy      , pour tracer l'énergie en fonction de la température
--magnetisation , pour tracer l'aimantation en fonction de la température
--h (float)    , pour choisir le champ magnétique externe, à 0 par défaut
--help        , pour obtenir de l'aide
```

3 Résultats et conclusion

3.1 Cadre de la simulation

Pour les simulations réalisées, nous devons distinguer plusieurs variables :

- Le nombre de simulation de Monte Carlo, c'est le nombre de simulations que nous ferons pour calculer la valeur moyenne et l'écart-type. Dans notre projet, nous avons pris $nMC = 250$.
- Le nombre d'itération de Métropolis, c'est le nombre d'itération (rebalancement d'un spin) pour une simulation que nous faisons avant d'observer l'état du système. Dans notre projet, nous avons pris $nMP = 50\,000$.
- Le pas de température pour le tracer du graphe, nous avons pris 0,1 K.

Au début d'une simulation, tous les spins sont initialisés à 1. Ce choix est arbitraire, nous aurions également pu choisir -1. Rappelons nous que le système à basse température a pour état d'équilibre un état ordonné. C'est pourquoi, si le système est initialisé avec des spins pouvant prendre des valeurs -1 et 1 de manière uniforme, alors le système va alors converger soit vers une aimantation de 1 ou de -1 avec la même probabilité. La valeur moyenne de l'aimantation convergera alors vers 0, or c'est physiquement faux. Donc on initialise les spins à 1 pour éviter cet effet de balancier.

Pour donner une pertinence physique à nos résultats, nous avons veillé à calculer l'intervalle de confiance à 95% dans notre simulation. Nous pourrions donc observer la courbe de la valeur moyenne

en bleu continu et l'intervalle de confiance à 95% en rouge pointillé. Nous avons également mis l'axe des abscisses en vert pour servir de référence.

3.2 Résultats

Maintenant, nous pouvons comparer nos résultats de simulations aux résultats de Lars Onsager, i.e. pour un champ magnétique externe nul. Tous les résultats obtenus sont normalisés à 1 afin d'en faciliter la lecture.

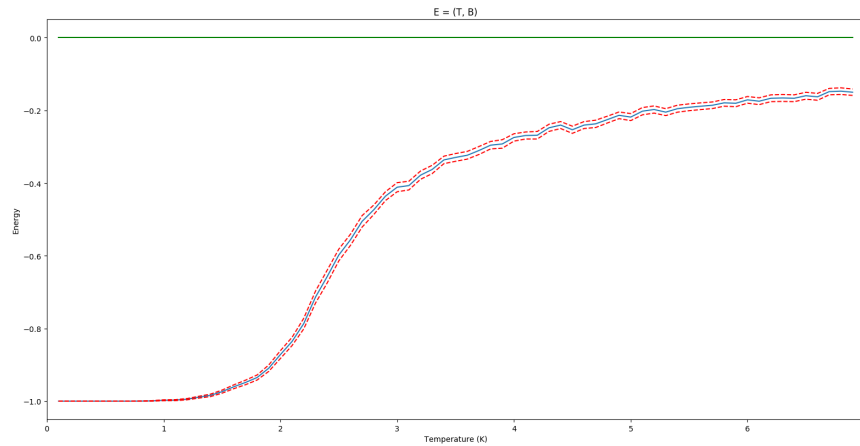


Figure 1: Évolution de l'énergie en fonction de la température à $B = 0$

Nous pouvons observer que l'énergie moyenne tend à être nul avec l'augmentation de la température. En effet, à haute température, tous les états deviennent équiprobables comme vu précédemment.

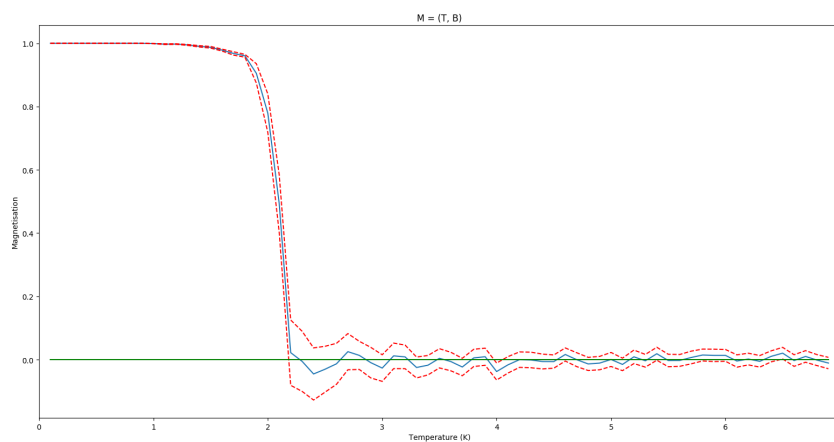


Figure 2: Évolution de l'aimantation en fonction de la température à $B = 0$

Nous observons une chute brutale de l'aimantation à environ 2,3K. Cette température est proche

du résultat analytique (2,269 K) déterminé par Onsager. Nous assistons ainsi à une transition de phase à la température critique T_C entre une phase ordonnée caractérisé par une aimantation de 1 et une phase désordonnée caractérisée par une aimantation nulle.

Maintenant, étudions le système quand nous lui appliquons un champ magnétique externe.

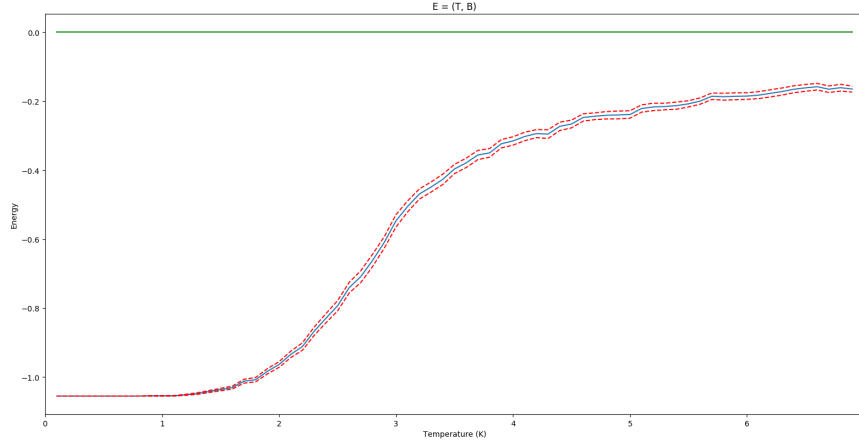


Figure 3: Évolution de l'énergie en fonction de la température à $B = -0,2$

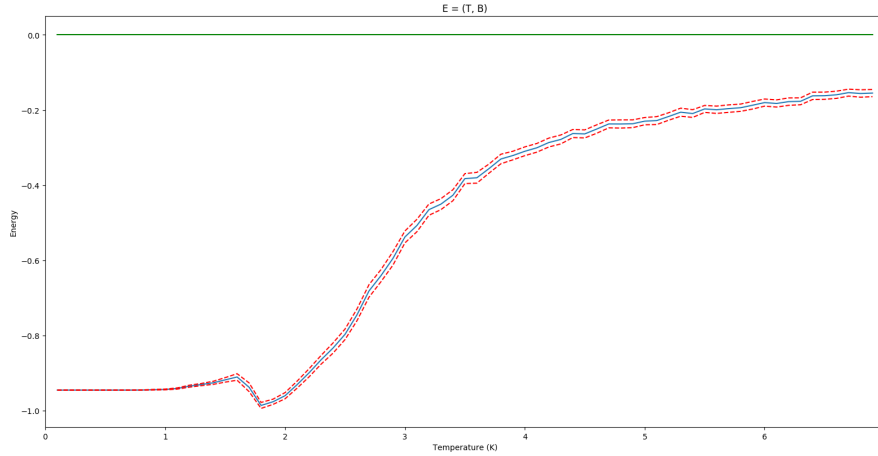


Figure 4: Évolution de l'énergie en fonction de la température à $B = 0,2$

A partir de ces deux graphes, nous pouvons en déduire que le système baigné dans un champ magnétique externe non nulle a une énergie moyenne nulle à une plus haute température. L'irrégularité rencontrée au alentour de 2 K pour le graphe où $B = 0,2$ sera expliqué dans la suite.

Pour des valeurs de champ magnétique externe positif, les spins avec pour valeur 1 sont favorisés. C'est pourquoi, la transition de phase est beaucoup moins visible que dans le cas $B \leq 0$. Néanmoins l'aimantation converge vers une valeur nulle pour une température élevée. De la même manière, un

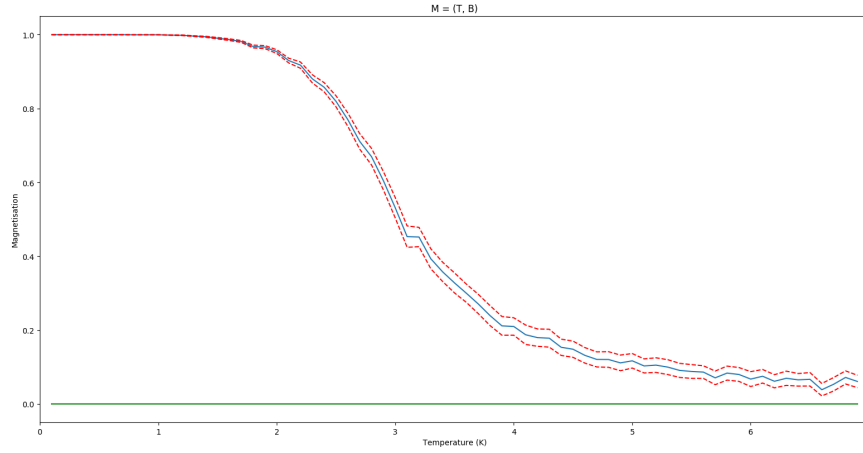


Figure 5: Évolution de l'aimantation en fonction de la température à $B = -0,2$

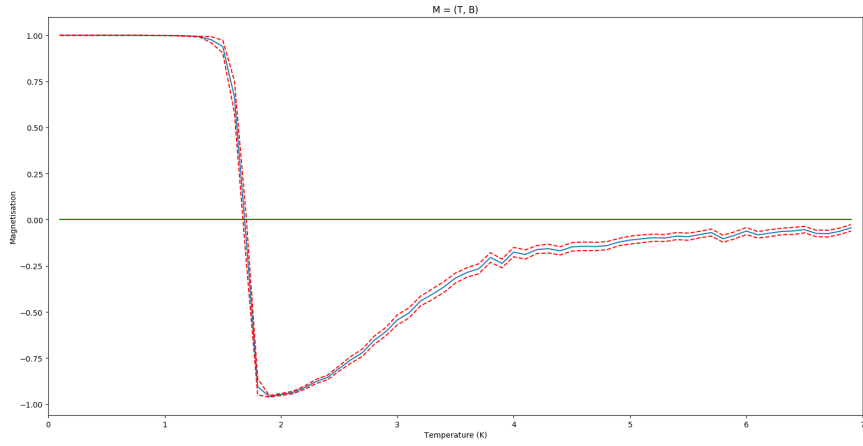


Figure 6: Évolution de l'aimantation en fonction de la température à $B = 0,2$

champ magnétique externe négatif favorise les spins de valeur -1. Or dans notre système, tous les spins sont initialisés à 1. A trop basse température, le système ne peut pas évoluer. Néanmoins, à partir d'une certaine température, ici 2K, le système se place à son état d'équilibre violemment. Nous pouvons alors observer cette cassure caractéristique à 2K.

3.3 Conclusion

Grâce à ce modèle de physique statistique, nous avons réussi à mettre en évidence la transition de phase entre une phase ordonnée et une phase désordonnée à la température de 2,3K en l'absence de champ magnétique, le résultat théorique de Lars Onsager a été donc retrouvé.

Nous aurions pu aller plus loin dans l'exploration et l'exploitation de ce modèle. En effet, il est également utilisé dans d'autres domaines d'étude comme les neurosciences où nous pouvons observer l'activité des neurones de manière statistique. Chaque neurone S_i prendra alors soit la valeur 1

pour actif, soit -1 pour inactif. L'activité des neurones peut être donnée par le principe de maximum d'entropie à un multiplicateur de Lagrange h_i près. Enfin, il existe un terme de corrélation J_{ij} entre l'activité deux neurones S_i et S_j pas forcément plus proche voisin. Nous obtenons ainsi l'activité neuronale E :

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \quad (3)$$

Cette équation pourrait donc être le point de départ d'un autre sujet s'appuyant le modèle d'Ising. Les considérations physiques seront bien sûr tout autre.

4 Référence bibliographique

<https://media4.obspm.fr/public/M2R/appliquettes/ising/doc/Ising.doc.html>

<http://www.f-legrand.fr/scidoc/docimg/sciphys/physistat/ising2d/ising2d.html>

https://en.wikipedia.org/wiki/Metropolis-Hastings_algorithm

https://en.wikipedia.org/wiki/Ising_model