Université Nice SOPHIA ANTIPOLIS

Modèle Ising

Thomas Frisch, Franck Celestini

Méthodes Numériques L3

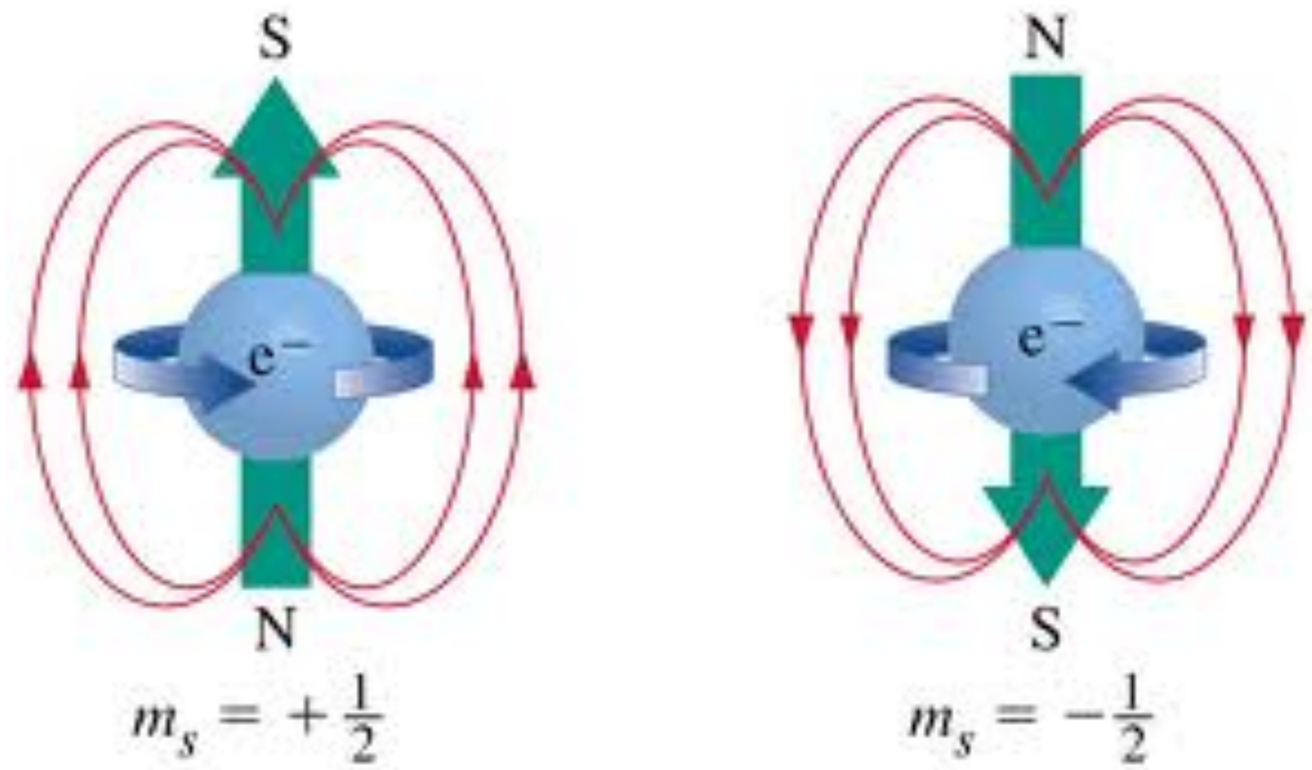
Expliquer la transition Ferromagnétique-Paramagnétique

Rappel

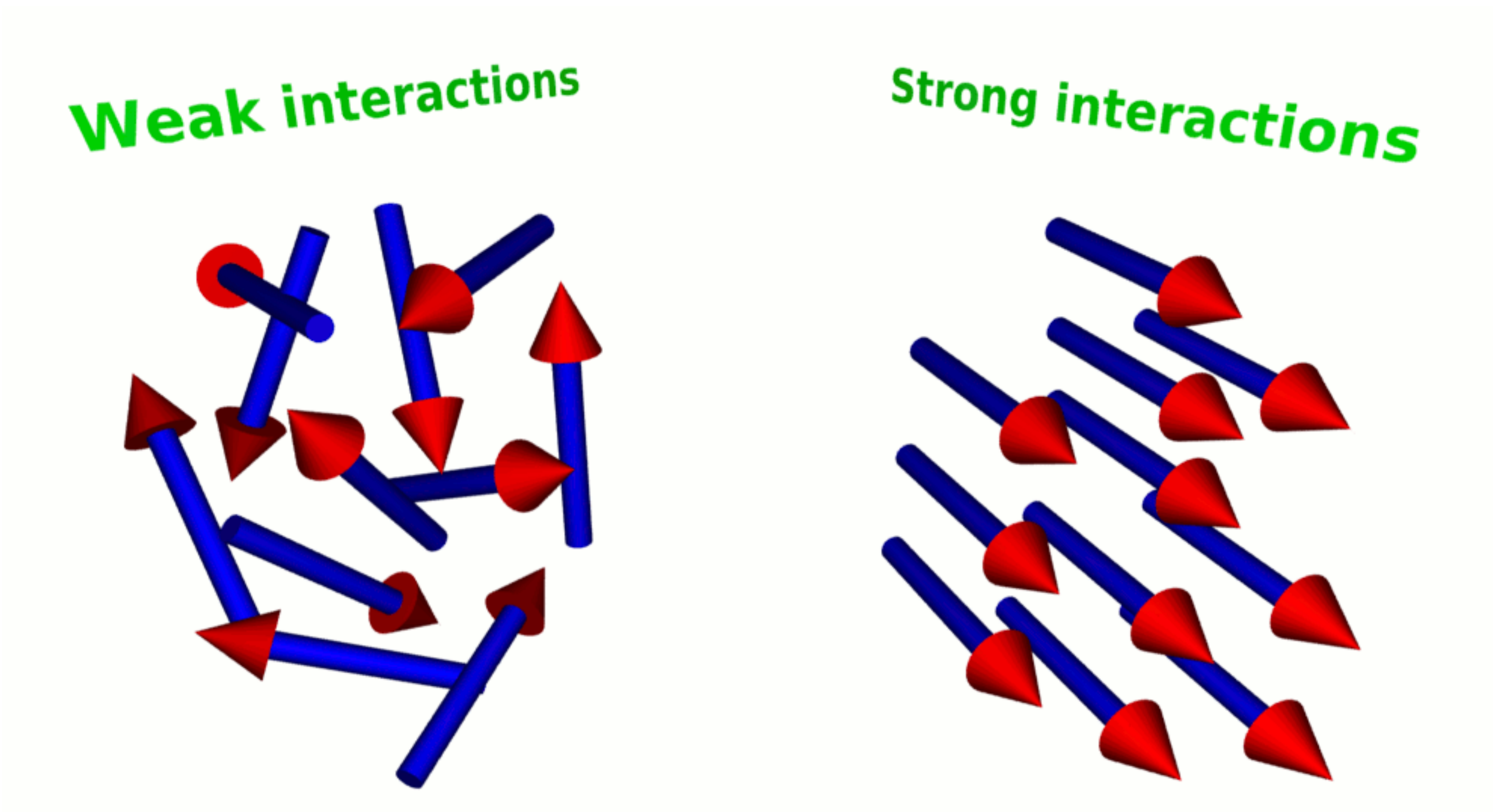
- Lorsque la température augmente, un matériau ferromagnétique (ex: aimant, ferrite, fer) peut perdre sa magnétisation globale.
- Il devient alors paramagnétique à la température de Curie, dites T_c.
- Cette transition est due aux effets des fluctuations thermiques. Elle peut être de quelques centaines de degrés Celcius.

Aimant ferro-magnetique avec de la limaille de fer autour

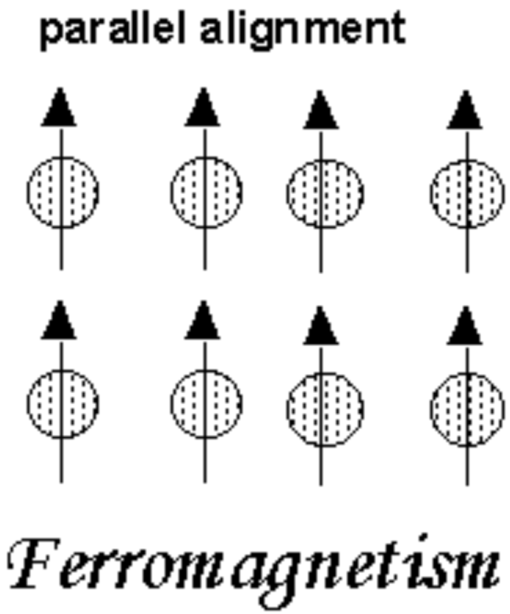
Moment magnétique:
Boucle de courant microscopique

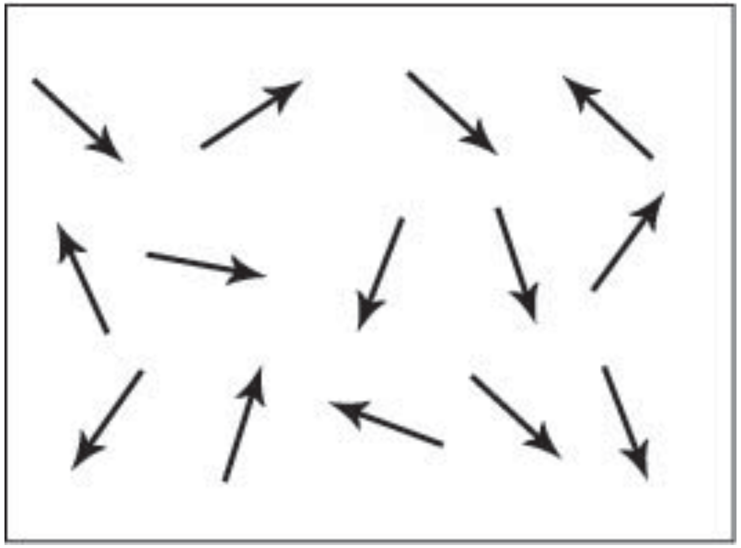


Transition ferromagnetiques
Interatiocn entre Spin
(moment magnetiques)



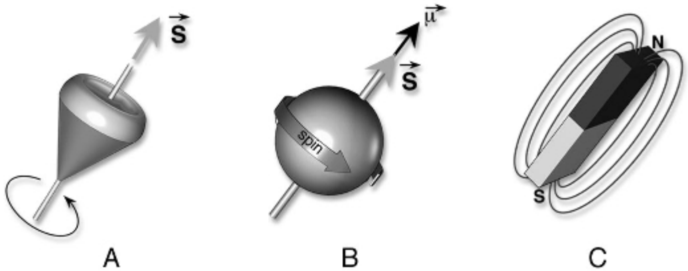
Ferromagnetisme: Aimant, ordre d'orientation entres les moments magnétiques





Paramagnétisme: désordre du aux fluctuations thermiques

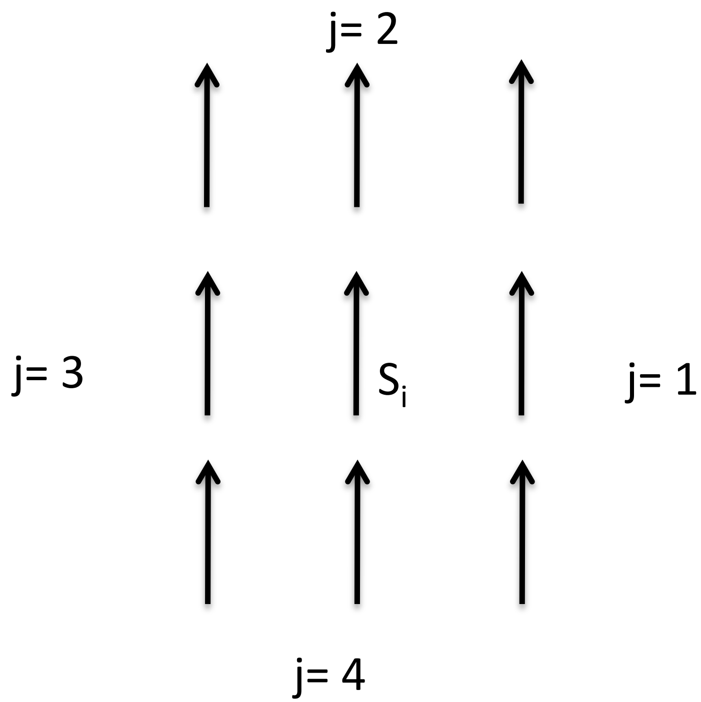
Température



Modèle Ising

$$E_i = -\frac{J}{2} S_i \sum_j S_j$$

$$E = \sum_i E_i$$



- J est un constante de Couplage J>0.

- S_i vaut +1 ou -1

- La somme sur j correspond a une somme sur les plus 4 plus proches voisins dans le plan.

Interprétation

- J>0, les spins aiment être parallèle entre eux pour minimiser l'énergie.
- J< 0, les spins aiment être antiparallèle (antiferromagnétisme)
- J=0 Paramagnétique

Pour nous J=1

Energie Libre

- On considère l'énergie libre $F=E-TS$. Avec E l'énergie, T la température et S l'entropie.

- A l'équilibre , l'enérgie libre $F=E-TS$ doit etre minimal, Il y a compédition entre E minimal et S maximum

- $S=K_b \text{ Log } (\Omega)$

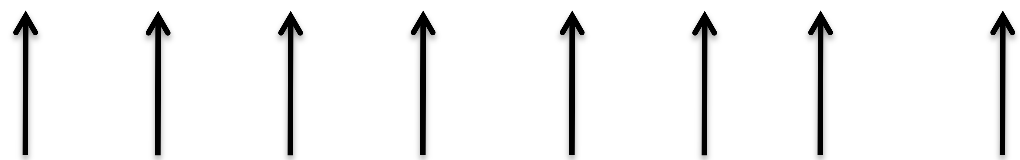
- Ω avec est le nombre d'état possible

- Etat ordonné, tous les spins sont vers le haut, l'entropie vaut 0 car $S = Kb \text{ Log } (1)$

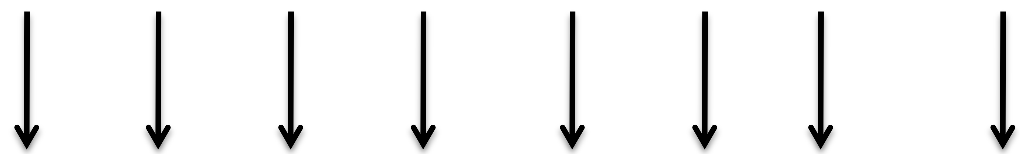
- Etat désordonnés, la direction des spins est choisi au hasard.

Basse température

- Si T=0 alors F=E, tous les spins sont dans la même direction ou alors



Ou



Meme énergie

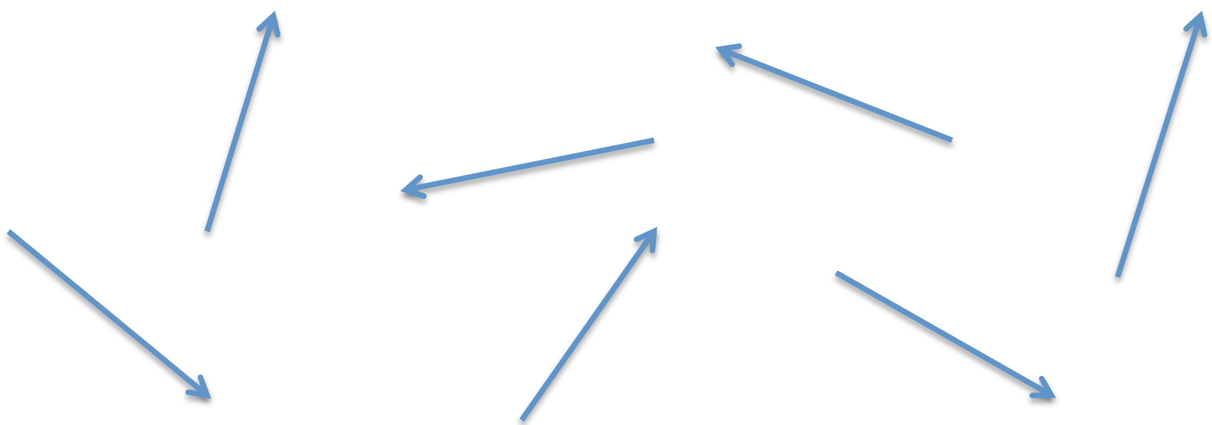
Haute température

- T -> Infini, $F = - T S$ Entropie est maximale pour avoir F minimal.

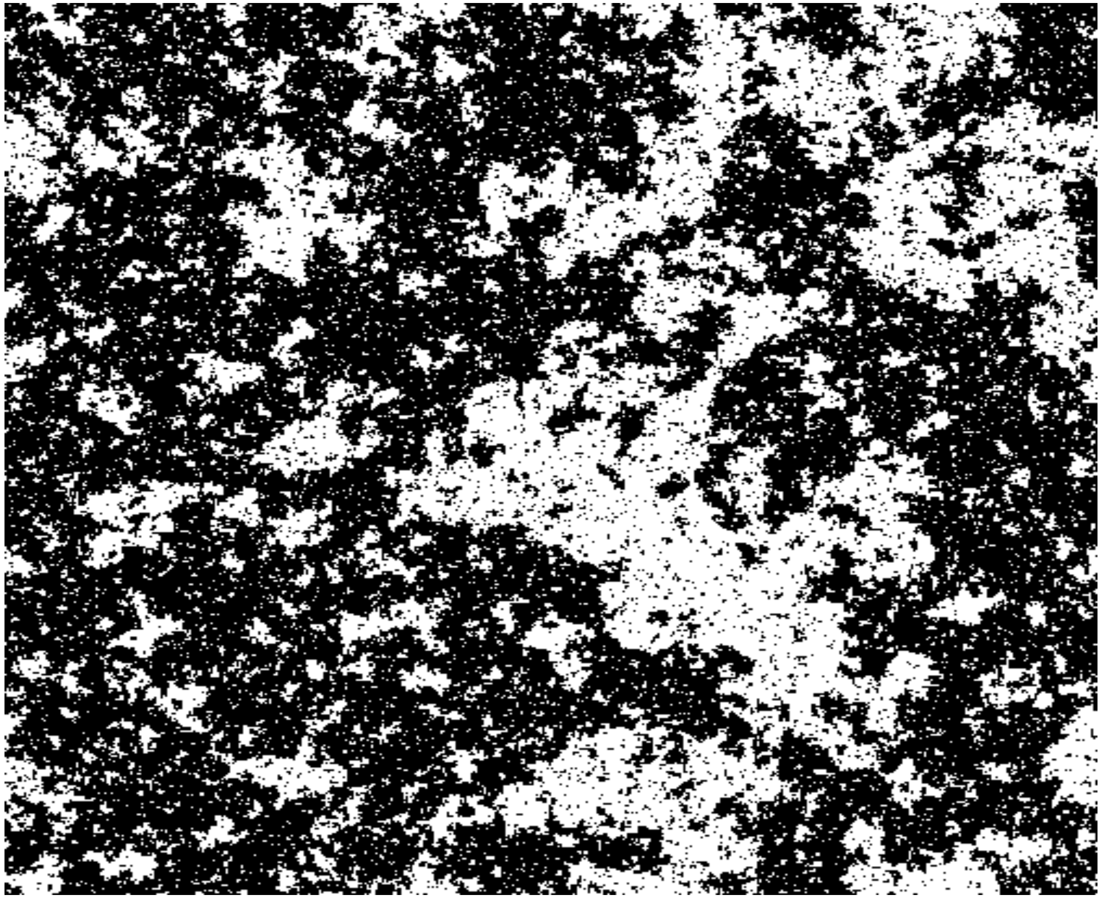
Chaque spin peut être dans 2 états possible,

$S = kb \, Log (2^N) = Kb \, N \, log(2)$

Spin désorganisé



Simulation Numérique



N= 512*512

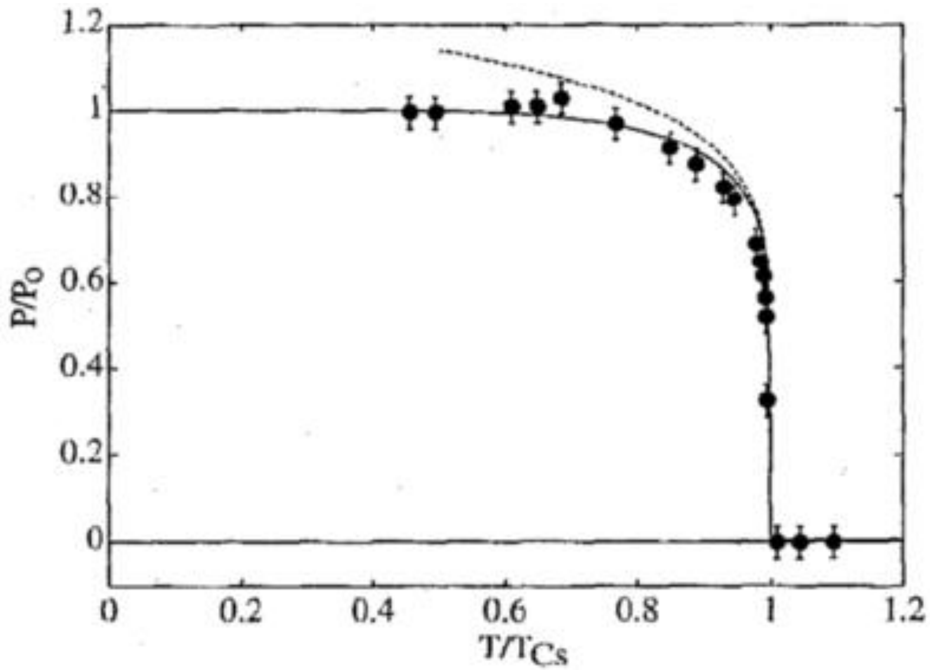
$T=T_c$

Transition de Phase

On défini la magnétisation totale et la magnétisation moyenne

$$M_{total} = \sum_i S_i$$

$$< m >= \bar{m} = \frac{M_{total}}{N}$$



- T=infini , <m>=0 car les spins ont des valeurs +1 et -1 aléatoirement

- T=0 <m>=+1 ou -1

Phénomenes critique et effets collectifs

- Magnétisation : $M \sim (T_c - T)^a$
- Longueur de corrélation diverge vers l'infini quand T tends vers T_C pour $T > T_C$
- $L \sim (T - T_c)^{-\beta}$

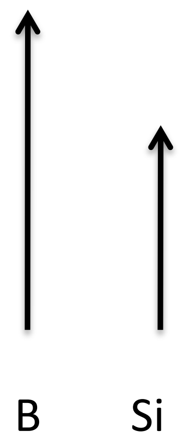
- La longueur de corrélation L représente une distance sur laquelle les spins ont la même orientation
- Transition de Phase du second ordre.

Champ magnétique extérieur

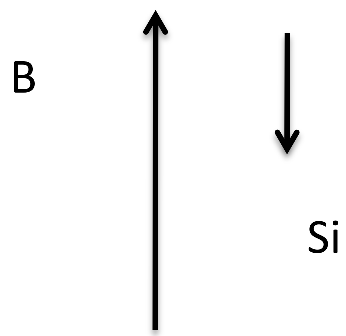
- Le champ magnétique brise la symétrie et favorise une direction

$$E_i = -\frac{J}{2} S_i \sum_j S_j - B S_i \qquad\qquad E = \sum_i E_i$$

Energie minimale



Energie maximale



Méthode de Monte-Carlo (Ising)

- On choisi aléatoirement un spin S_i dans le réseau
- On propose de basculer sa direction S_i -> $-S_i$
- On calcule la variation de l'énergie totale du système $\delta E = E_{nouveau} - E_{ancien}$ Cette variation est locale (4 plus proches voisins)
- Si $\delta E<0$, on accepte le basculement
- Si $\delta E>=0$, on tire une valeur aléatoire r entre [0 1[,
- Si $r<\exp(-\delta E/k_b T)$, on accepte, sinon on refuse le basculement
- On choisi aux hasard un nouveaux spin et on recommence

Méthode de Monte-Carlo

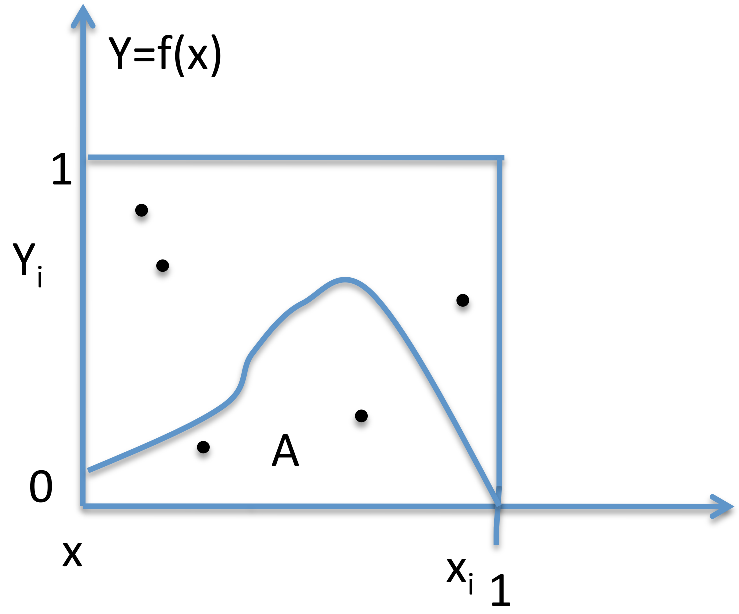
Idée: Utiliser une méthode probabiliste pour calculer des intégrales

Méthode générale de la Physique Statistique

Exemple:

- Calcul d'une intégrale, c'est à dire l'aire sur la courbe.
- On choisi N points au hasard dans le carré [0 1][0 1].
- On compte le nombre de point P sous la courbe
- A= P/N quand N tend vers l'infini

$$A = \int_0^1 f(x)dx$$



Monte-Carlo suite

- Cette méthode permet de calculer des intégrales multidimensionnelles, tel que vous les rencontrerait en Physique Statistique.

- Elle peut être très rapide ou très lente, selon la forme de la fonction à intégrer (fonction localisée).

Rappel de Probabilité

- On considère un ensemble dénombrable d'évènement noté: A_1, A_2, A_3 , … , A_k
- On appelle l'ensemble A_1, A_2, A_3 , … , A_k les réalisation de la valeur aléatoire A
- On suppose que ces évènement se produisent un très grand nombre de fois N>>1
- Exemple, les réalisations d'un dé à six faces (3,1,6,3,2,1, etc….)
- On compte le nombre de fois N_i ou l'évènement A_i se produit
- On défini la probabilité P_i de l'évènement A_i comme étant
  $P_i = \text{Lim}\ (N_i/N) \qquad N \Rightarrow \infty$
- Si l'évènement A_i n'apparaît jamais alors $P_i=0$
- Si l'évènement A_i est sure alors $P_i = 1$

$\Sigma P_i = 1$ (Normalisation)

Valeur moyenne et Variance

- La somme des probabilités P_i vaut 1 et $0 \leq P_i \leq 1$

  1/6 +1/6+1/6+1/6+1/6+1/6 +1/6=1, sur le dé (non pipé) à 6 faces

- Une probabilité ne peut pas être négative ou strictement supérieur a 1!

- On défini la valeur moyenne d'une variable A comme étant

  $<A>=\sum_i A_i P_i$ et de même

  $<f(A)>=\sum_i f(A_i) P_i$ $<A^3>=\sum_i A_i^3 P_i$

- On défini la variance comme étant σ^2

  $\sigma^2 = < (A-<A>)^2 >$ et l'écart type σ

- La variance mesure l'écart à la valeur moyenne

- On montre que $\sigma^2 = <A^2> - <A>^2$

Probabilité d’évènement disjoints

- Si A_i et A_j sont deux évènement mutuellement exclusif, c’est a dire qu’il n’apparaissent jamais en même temps alors

- $P(A_i \text{ ou } A_j)= P(A_i)+ P(A_j)$
-
- Exemple Prob(5 ou 6)=2/6

- $P(A_i \text{ ou } A_j \quad \text{ou } A_k)= P(A_i)+ P(A_j)+ P(A_k)$

Probabilité conditionnelle

- On considère deux variables aléatoires A et B, et 2 évènements A_i et B_j qui sont des réalisations possibles des deux valeurs aléatoires:
- Soit PA_i et PB_j les probabilités respectives
- Exemple (deux dés) premier dé 5 , deuxième dé 6
- Quelle est la probabilité de l'évènement (5 puis 6)
- C'est 1/6*1/6=1/36
- La probabilité jointe est $P_{ij}= PA_i*PB_j$ si les évènements sont indépendants

- Si les évènement ne sont pas indépendants alors on défini la probabilité conditionnel comme étant
- $P(j|i)=P_{ij}/ PA_i$
- $P(j|i)$ est la probabilité de réaliser l'évènement B_j sachant que l'évènement A_i s'est produit
- $P_{ij} = P(j|i) * PA_i$
- Règle de normalisation $\sum_j P(j|i) =1$
- $\langle AB\rangle = \sum_{i,j} P_{ij} A_i B_j$ si A et B sont indépendants alors
- $P_{ij}= PA_i * PB_j$ et donc
- $\langle AB\rangle = \sum_{i,j} P_{ij} A_i B_j = (\sum_i PA_i A_i) (\sum_j PBj B_{j)} = \langle A\rangle\langle B\rangle$
- Définition Covariance $Cov(A,B)= \langle AB\rangle - \langle A\rangle\langle B\rangle$, degré de dépendance

Processus Stochastique (Aléatoire)

- Soit un système décrit par une variable aléatoire X_t qui peut être un scalaire, ou un vecteur ou un tableau (ensemble de spin) dont les réalisation possibles sont noté S_i
- On étudie l'évolution de cette variable pour instant t_1,t_2, t_3,…….
- Soit P la probabilité conditionnelle

$$P = P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}}, X_{t_{n-2}} = S_{i_{n-2}}, ..., X_{t_1} = S_{i_1)}$$

Chaine de Markov

- Si P ne dépend que de son prédécesseur immédiat, ce processus est appellé Chaine de Markov.

$$P = P(X_{t_n} = S_{i_n} | X_{t_{n-1}} = S_{i_{n-1}})$$

$$W_{ij} = W(S_i \to S_j) = P(X_{t_n} = S_j | X_{t_{n-1}} = S_i)$$

W_{ij} est la probabilité de transition de passage entre l'état S_i vers l'état S_j

$W_{ij} \geq 0$ et $\sum_j W_{ij}=1$

Limite continue

- On suppose que le temps est un variable continue t

$$P(X_{t_n} = S_j) = P(S_j, t)$$

W_{ij} est la probabilité de transition par unité de temps

$P(S_j, t+dt)=P(S_j,t)+ dt \sum_{i\neq j} W_{ij}P(S_i,t) -dt \sum_{i\neq j} W_{ji} P(S_j,t)$

Théorie

$$\frac{dP(S_j,t)}{dt} = -\sum_{i\neq j} W_{ji}P(S_j,t) + \sum_{i\neq j} W_{ij}P(S_i,t)$$

Solution Stationnaire

$$\frac{dP(S_j,t)}{dt} = 0 \qquad W_{ji}P(S_j) = W_{ij}P(S_i)$$

$$\frac{W_{ji}}{W_{ij}} = e^{-\frac{(E_i-E_j)}{k_bT}} \qquad P(S_j) \sim e^{-\frac{E_j}{k_bT}} \qquad P(S_i) \sim e^{-\frac{E_i}{k_bT}}$$

$$W_{ij} = \tau_0^{-1}\exp(-\Delta E/k_bT)$$ Si $$\Delta E = E_j - E_i > 0$$

$$W_{ij} = \tau_0^{-1}$$ Si $$\Delta E < 0$$

Conclusion:Algorithme de Métropolis

- (1) Choisir un état initial (condition initiale0
- (2) Choisir un spin i aux hasard.
- (3) Calculer le changement d’énergie Δ E qui résulte d’un basculement du spin
- (4) Générer un nombre aléatoire r tel que $0<r<1$
- (5) Si r< exp(-Δ E/K_bT) alors basculer le spin
- Aller a l’étape (2) et recommencer.

Application: Disque Dur Ordinateur