

# Physique Numérique – TP7

## Modèle d'Ising

Victor Lanvin

### 1 Introduction

Dans ce TP, on s'intéresse à l'étude numérique du modèle d'Ising, considéré comme un modèle essentiel en physique statistique. Ce modèle n'étant pour le moment pas résolu analytiquement en dimension supérieure à deux, on réalise une étude basée sur la méthode de Monte-Carlo.

On s'intéressera dans un premier temps à l'étude du générateur de nombres pseudo-aléatoires en Fortran, avant d'étudier diverses propriétés du système à deux dimensions.

### 2 Nombres Pseudo-Aléatoires

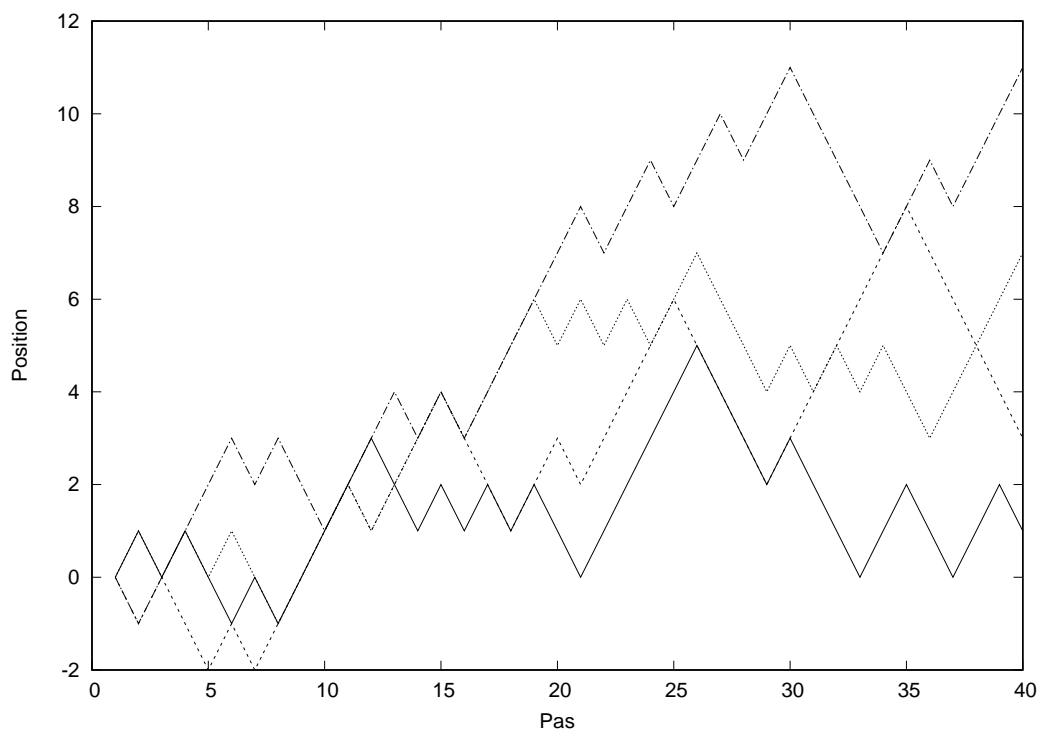
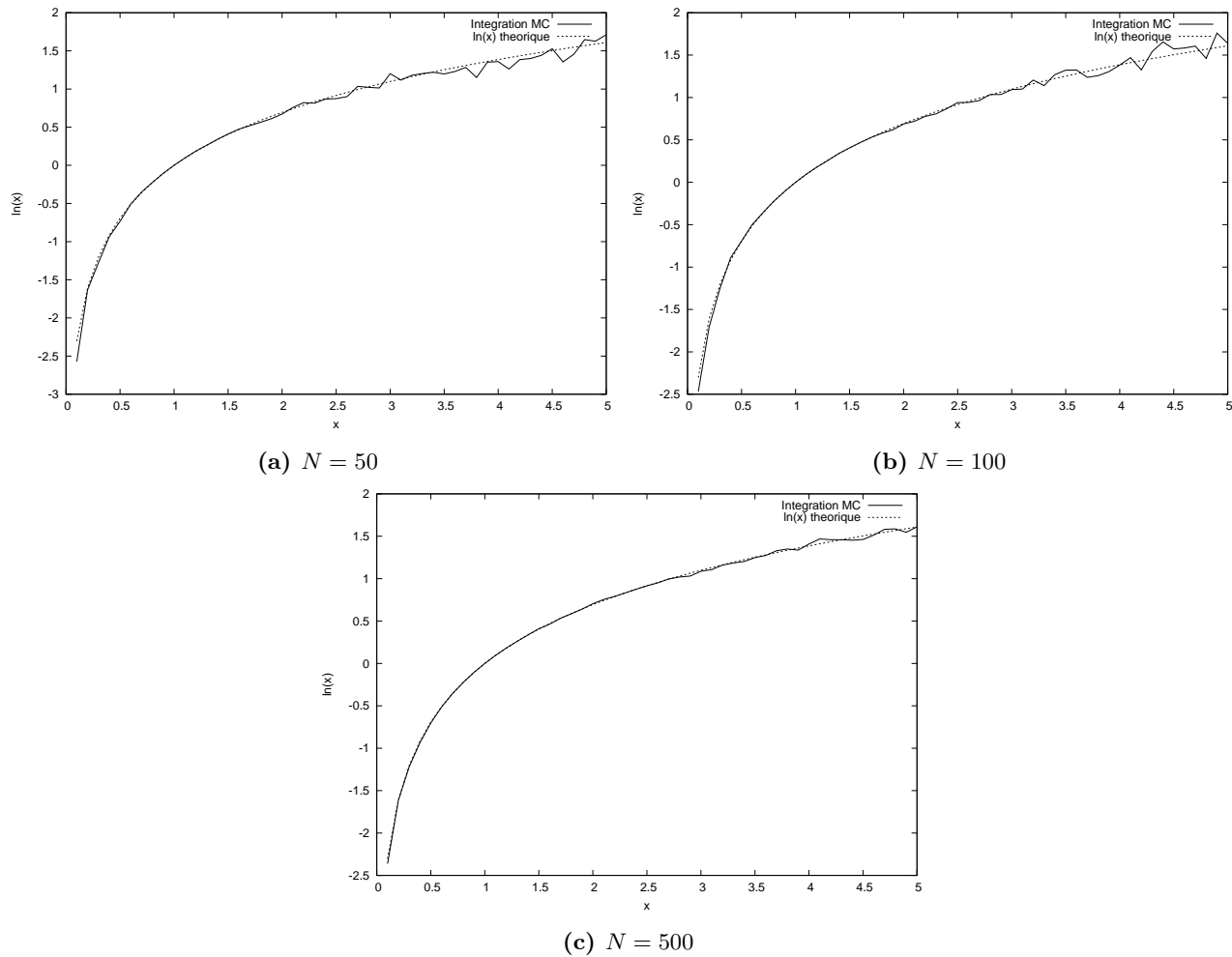


Figure 1: Marches aléatoires

**Marche aléatoire.** On a ici simulé plusieurs marches aléatoires en utilisant différentes graines. A chaque étape, la probabilité de faire un pas vers le haut ou vers le bas est uniforme et fixée à 0.5. Les marches sont représentées en Figure 1. On remarque que toutes les marches ont tendance à aller vers le haut, ce qui n'est qu'une erreur d'observation dûe au faible nombre de marches tracées. D'autres graines auraient sûrement donné des marches partant vers le bas.



**Figure 2:** Comparaison de l'intégration numérique de  $1/x$  par rapport à  $\ln(x)$  pour différents nombres de pas  $N$

**Intégration.** On intègre ici des fonctions en utilisant la méthode de Monte-Carlo. Cette méthode est implémentée dans la fonction `mc_integration`. Afin de tester cet algorithme, on a comparé l'intégration de  $x \mapsto 1/x$  entre 1 et  $x$  à la valeur de  $\ln(x)$  calculée par Fortran. Des comparaisons pour  $n = 50, 100, 500$  sont présentées en Figure 2. On remarque que, naturellement, lorsque le nombre d'échantillons tirés aléatoirement augmente, le résultat s'approche de plus en plus de la courbe théorique. De plus, lorsque l'intervalle d'intégration est plus faible ( $x$  proche de 1), l'erreur commise est plus faible. Pour voir ceci sous un autre angle, on se propose de tracer l'erreur réalisée sur le calcul de  $\ln(10)$  en fonction du nombre de tirages aléatoires. La courbe obtenue est présentée en Figure 3. On remarque en effet que, lorsque le nombre de tirages augmente, l'erreur diminue pour tendre vers 0.

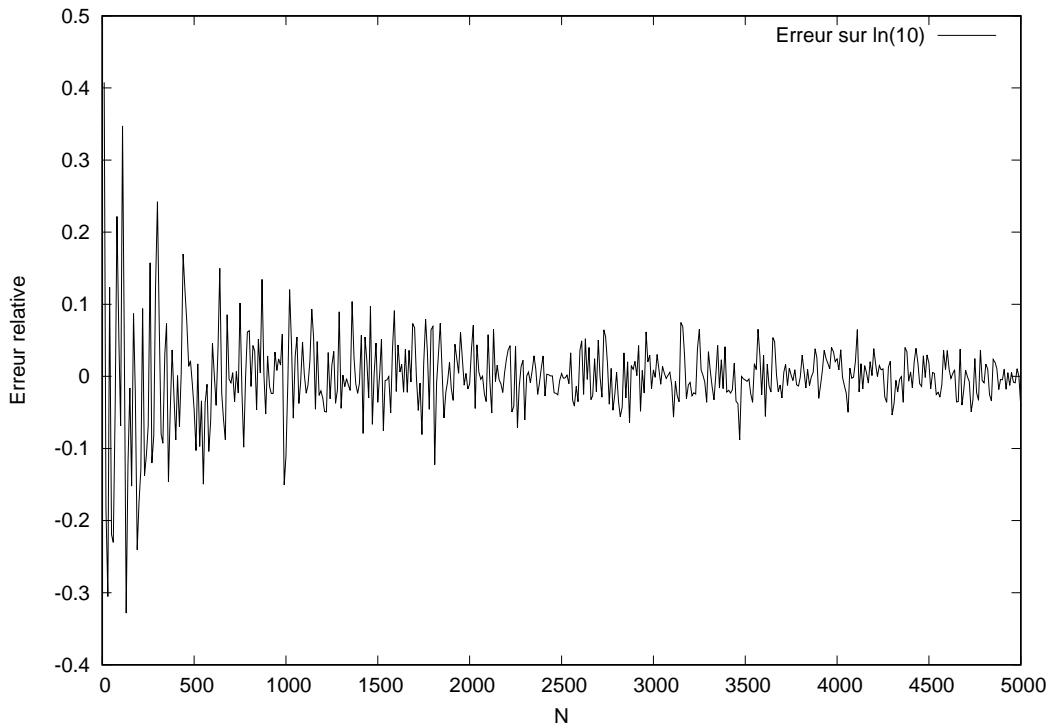
### 3 Simulation Monte-Carlo

**Fonction de partition.** La fonction de partition est donnée par  $N$  sommes sur 2 valeurs, où  $N$  est la taille de la grille. Ainsi, calculer la fonction de partition requiert  $O(2^N)$  opérations, soit une complexité exponentielle en fonction de la taille de la grille étudiée. Ce ne serait donc pas raisonnable de tenter de la calculer exactement.

**Liste de voisins.** On représente, dans une grille de taille  $N = l^2$ , l'indices  $i$  du point de coordonnées  $(i_x, i_y)$  de la façon suivante.

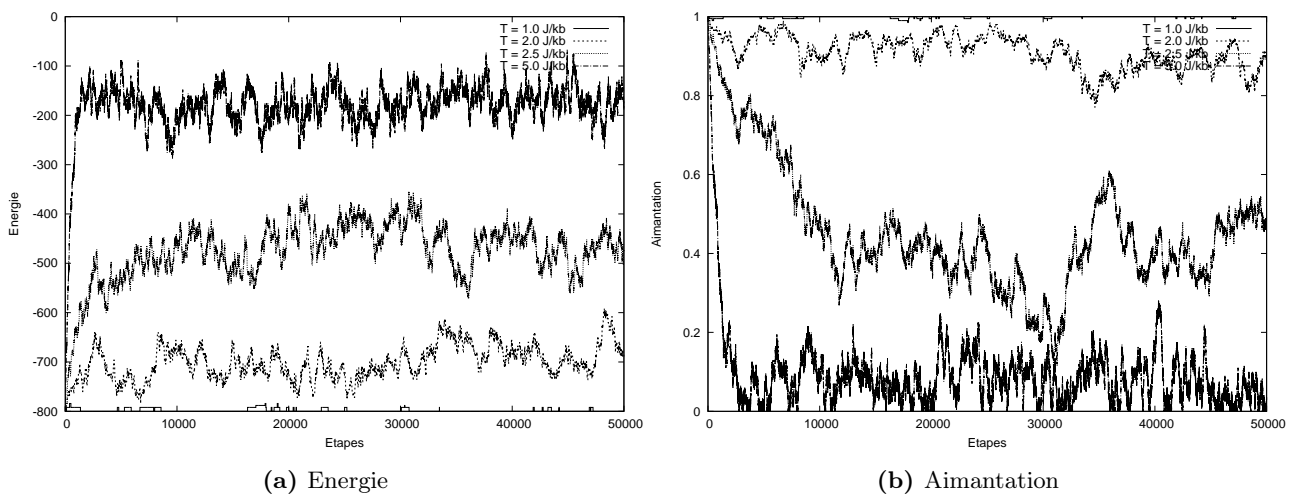
$$i = (i_y - 1) * l + i_x$$

Cette opération et son inverse sont implémentés dans la fonction `index_of` et `reverse_index`.



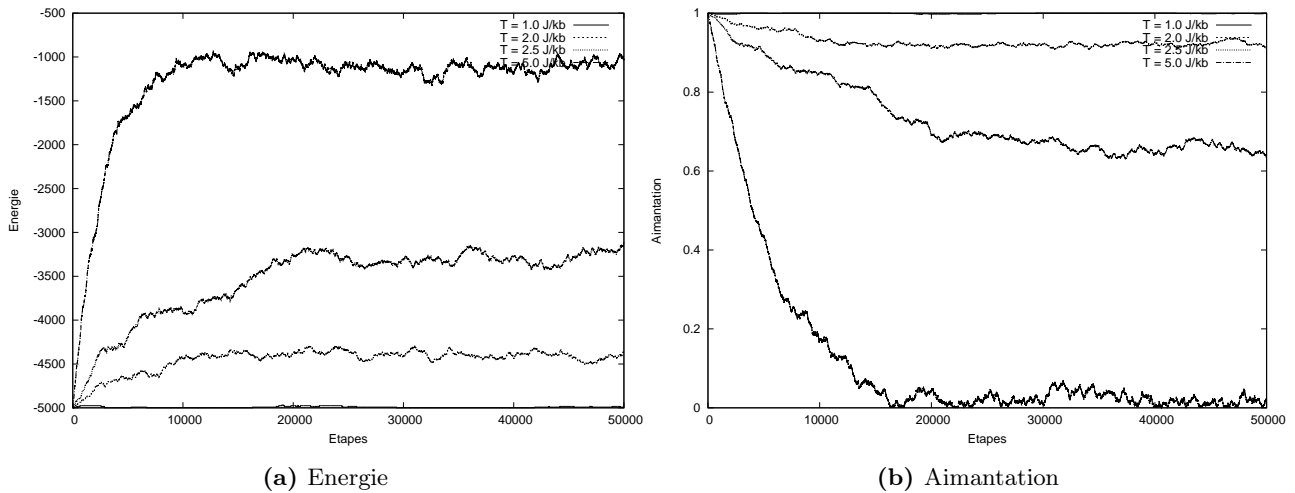
**Figure 3:** Erreur commise sur  $\ln(10)$  par intégration numérique en fonction du nombre de pas

Comme on se situe dans une grille carrée, on a  $c = 4$ . Les coordonnées des  $c$  voisins de l'atome  $i$  sont simplement données par  $(ix + 1, iy)$ ,  $(ix - 1, iy)$ ,  $(ix, iy - 1)$ ,  $(ix, iy + 1)$  en prenant garde à ramener  $ix$  et  $iy$  dans les bornes  $[1; l]$  si nécessaire (ce dont la fonction `period` se charge). Ces coordonnées sont calculées dans la fonction `mklist`. On retrouve leur coordonnée  $j$  en appliquant la fonction `index_of`.



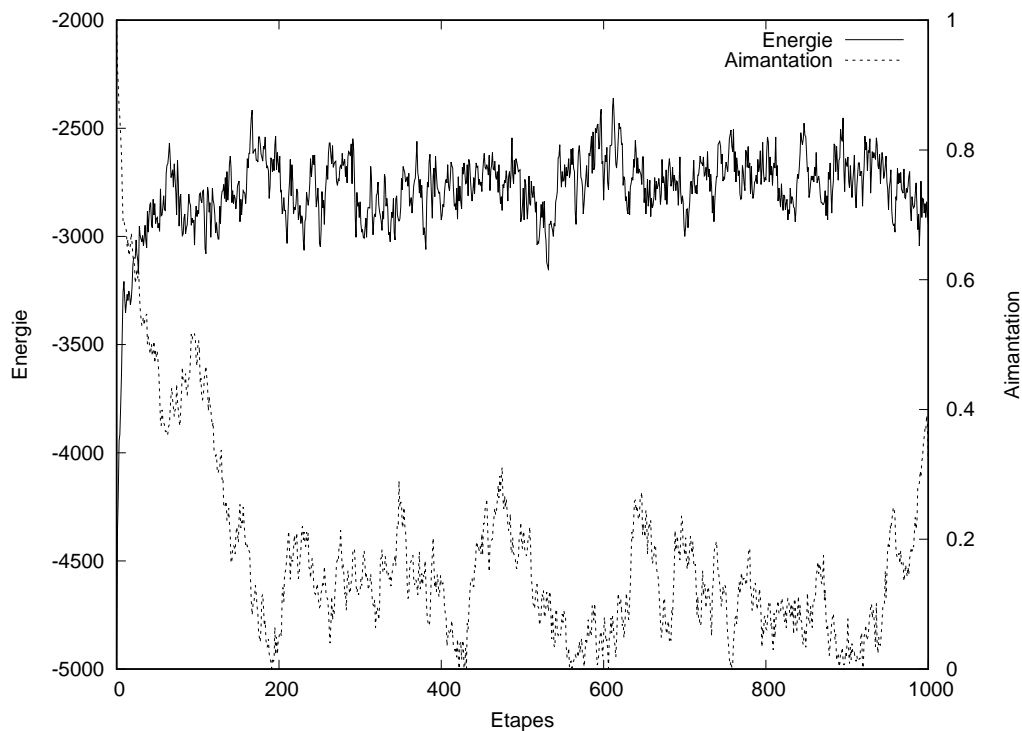
**Figure 4:** Energie et aimantation pour  $l = 20$  à différentes températures

**Première itération.** Pour cette première itération du programme, on trace l'énergie et l'aimantation (absolue) en fonction du nombre de pas pour différentes valeurs de  $T$  et différentes tailles de grille. Les courbes obtenues pour  $T = 1.0, 2.0, 2.5, 5.0 J/k_B$  et  $l = 20$  sont présentées en Figure 4, tandis que les mêmes courbes pour  $l = 50$  sont présentées en Figure 5. On remarque immédiatement que le système est plus "stable" lorsque  $N$  est plus grand. En effet, inverser un spin provoque un changement d'énergie plus faible lorsque  $N$  est plus élevé. En conséquence, le temps de stabilisation du système pour  $l = 20$  est plus faible (de l'ordre de 5000 pas) que pour  $l = 50$  (de l'ordre de 20000 pas). Deuxièmement, on remarque que lorsque  $T$  est très inférieure à la



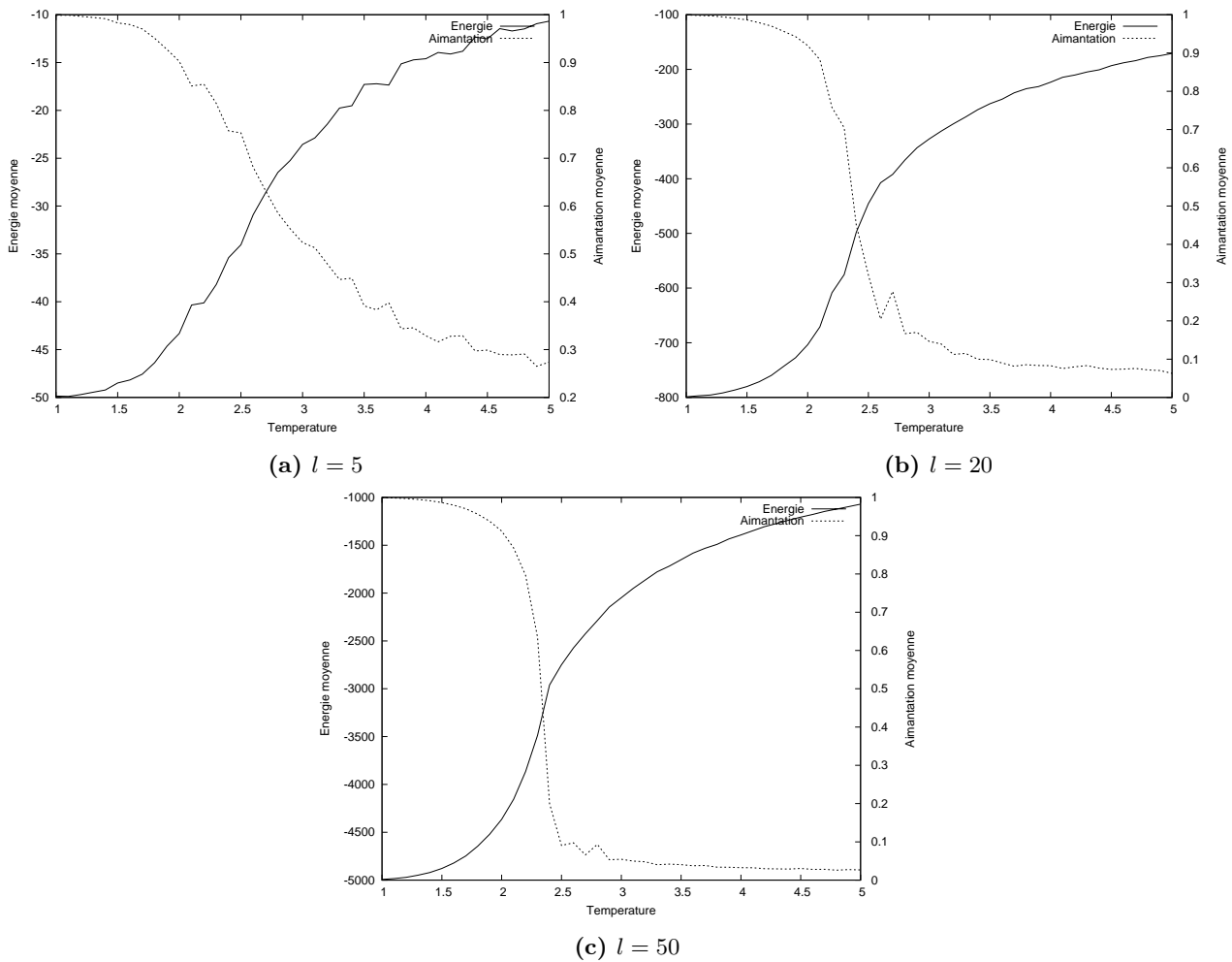
**Figure 5:** Energie et aimantation pour  $l = 50$  à différentes températures

température critique ( $T = 1.0$  par exemple) le système n'évolue pratiquement pas et son aimantation reste à 1 (ce qui correspond bien au fait que tous les spins sont initialement à  $+1$ ). Lorsque la température augmente, l'énergie et l'aimantation limites augmentent.



**Figure 6:** Energie et aimantation pour  $l = 50$ ,  $T = 2.5 \text{ J}/k_B$  (MC à grand pas)

**Simulation à grands pas.** On améliore l'algorithme pour réaliser un plus grand nombre de tirages par pas. Ainsi, on s'attend à ce que les variations d'énergie à chaque pas soient beaucoup plus importantes. Pour vérifier cela, on a représenté en Figure 6 l'énergie et l'aimantation du système pour  $l = 50$  et  $T = 2.5 \text{ J}/k_B$  sur 1000 pas. On remarque immédiatement que les variations à chaque pas sont effectivement plus fortes, mais en conséquence, le système converge plus rapidement.

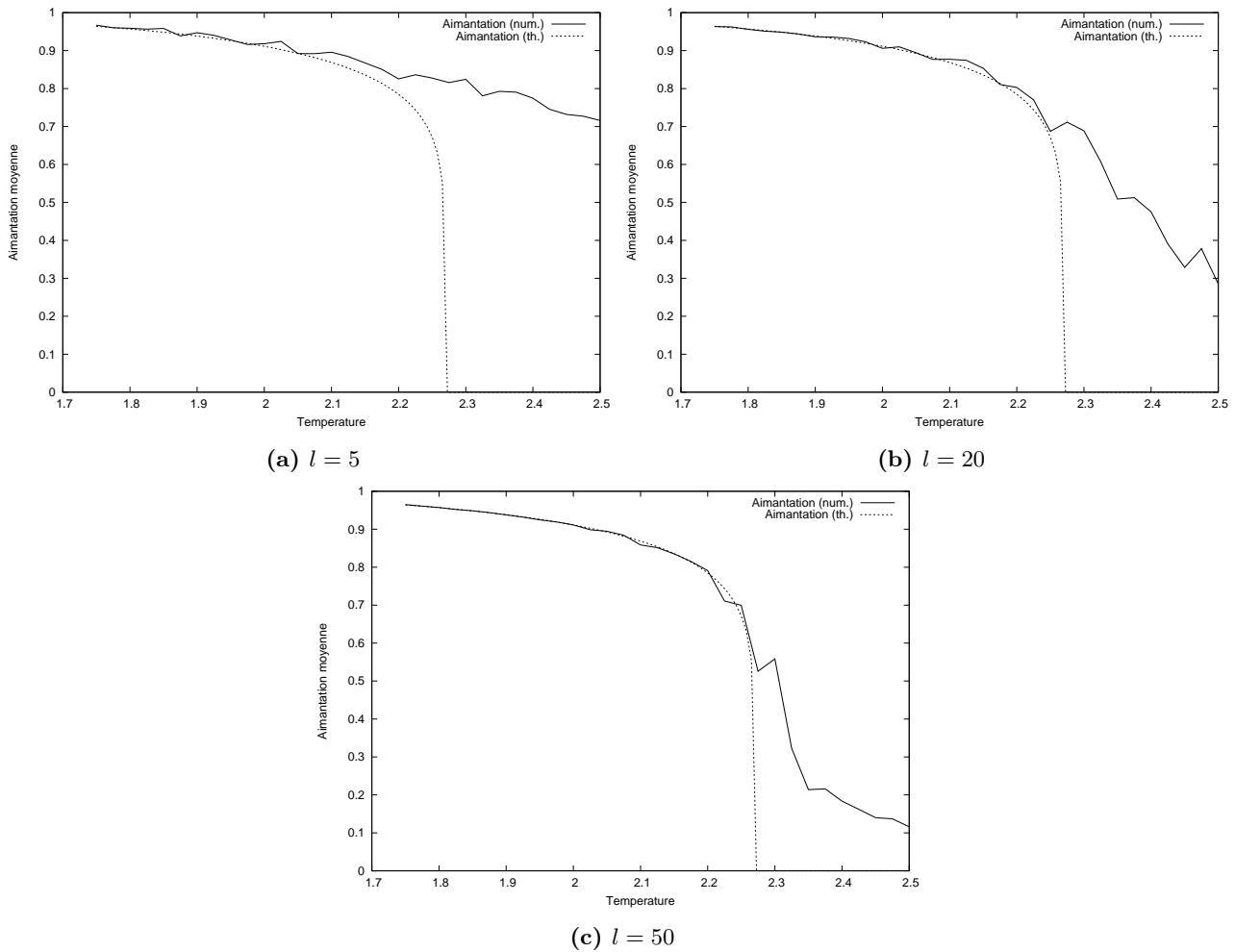


**Figure 7:** Energie et aimantation moyennes à différentes tailles  $l$  en fonction de la température

**Energie et aimantation moyennes.** On améliore encore une fois l'algorithme pour y ajouter une première étape de stabilisation avant de calculer l'énergie et l'aimantation moyennes. Les courbes obtenues en fonction de la température pour  $l = 5, 20, 50$  sont présentées en Figure 7. Comme attendu, on observe une transition aux alentours de  $T = 2.3J/k_B$ . De plus, l'aimantation tend bien vers 0 lorsque la température augmente. Cependant, l'aimantation ne s'annule pas *immédiatement* après la température de transition, contrairement aux résultats attendus. On reviendra sur ce point dans le prochain paragraphe. Quoiqu'il en soit, on observe encore une fois qu'augmenter la taille de la grille augmente la durée de calcul mais augmente aussi grandement la précision de la simulation.

**Comparaison théorique.** On a vu dans le paragraphe précédent que la courbe obtenue pour l'aimantation n'était pas exactement la courbe attendue théoriquement. Pour s'en convaincre, on compare ces deux courbes en Figure 8 pour  $l = 5, 20, 50$ . On remarque en effet que, si la courbe obtenue numériquement est plutôt proche de la théorie pour des températures inférieures à la température de transition (en particulier pour  $N = 50$ ), elle s'en éloigne grandement à température plus élevée. De plus, on note qu'augmenter le nombre de pas de simulation ou le moyennage n'améliore absolument pas les courbes numériques sur ce point. Cependant, à mesure que  $N$  augmente, la courbe numérique se rapproche de la courbe théorique. En effet, le résultat théorique est valable pour une grille *infinie*, ce qui n'est pas le cas ici, d'où le décalage particulièrement visible à  $N$  faible et/ou à température élevée.

**Chaleur spécifique.** On trace maintenant la courbe représentant la chaleur spécifique en fonction de la température pour  $l = 5, 20, 50$ . Ces courbes sont données en Figure 9. On remarque tout d'abord un pic autour de la température critique. De plus, lorsque  $l$  augmente, la largeur de ce pic diminue et sa hauteur augmente.

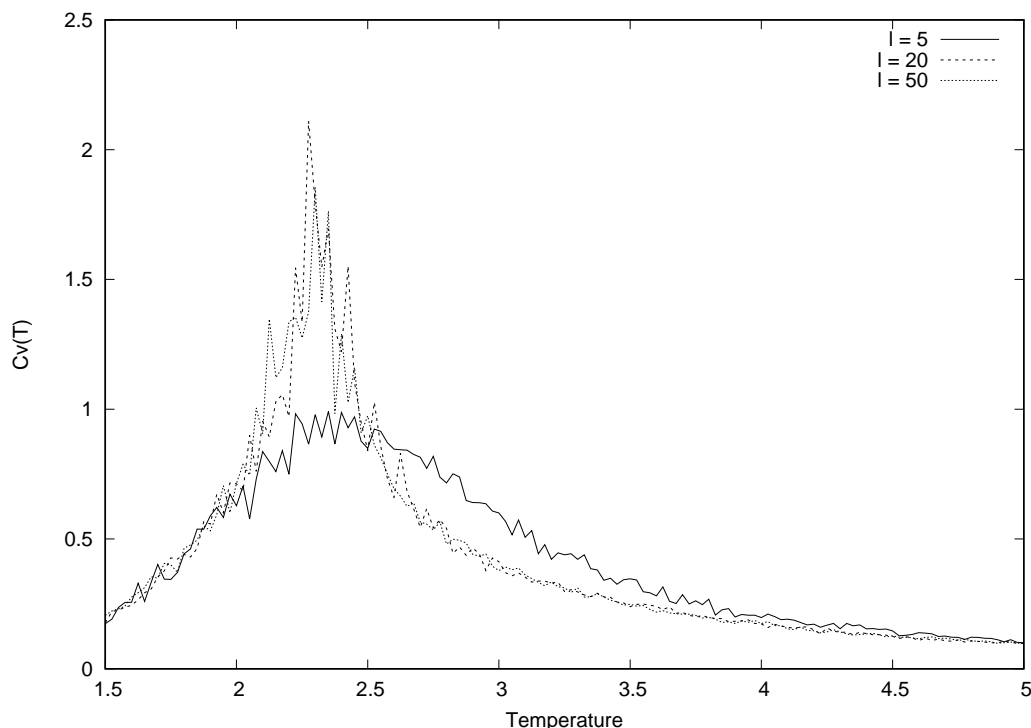


**Figure 8:** Aimantation numérique et théorique à différentes tailles  $l$  en fonction de la température

Ceci est cohérent avec la théorie qui prévoit une discontinuité (pic de taille infinie) très étroite à la température critique dans le cas d'une grille infinie de spins.

**Susceptibilité magnétique.** On trace ensuite la courbe représentant la susceptibilité magnétique en fonction de la température pour  $l = 5, 20, 50$ . Ces courbes sont données en Figure 10. On remarque encore une fois un pic autour de la température critique, mais ce pic devient plus étroit et diminue lorsque  $l$  augmente. Il n'a malheureusement pas été possible de recouper ces résultats avec la théorie afin de savoir si ils sont corrects (en particulier, afin de savoir si le pic doit en effet diminuer lorsque  $l$  augmente). Il est aussi possible que la valeur de  $\chi$  ait été mal renormalisée en fonction du nombre de spins. On cherche maintenant à faire un ajustement de la susceptibilité magnétique sur une fonction du type  $a(T - T_c)^{-\gamma}$ . Cependant, les courbes précédentes sont très bruitées et rendent l'ajustement pratiquement impossible. On essaie alors d'améliorer la résolution de ces courbes. Pour un moyennage sur 10000 itérations après 10000 étapes de stabilisation et un pas en température de 0.005 entre 2.0 et 2.5, on obtient la courbe présentée en Figure 11 (note: ce calcul, bien que divisé et distribué sur 5 coeurs, a pris 10 minutes à  $l = 50$ ). La courbe est malheureusement toujours trop bruitée pour être ajustée.

**Simulation en champ non nul.** On s'intéresse désormais à la même simulation mais en champ non nul. On trace alors l'aimantation non plus seulement en fonction de la température mais aussi en fonction du champ extérieur. La surface obtenue, pour  $l = 30$  et un pas de 0.1 en  $h$  est présentée en Figure 12. On remarque que l'ajout d'un champ extérieur semble annuler complètement la transition de phase: à haute température, l'aimantation ne tombe plus à 0 mais tend plutôt vers une valeur strictement positive. Cependant, il est difficile de vérifier de tels résultats sur une grille finie de taille raisonnable.



**Figure 9:** Chaleur spécifique en fonction de la température pour  $l = 5, 20, 50$

## 4 Bonus

**Configurations de spins.** On peut maintenant par exemple essayer de dessiner les configurations des spins à différentes températures. Ces tracés sont présentés en Figure 13. On remarque bien que, à haute température, les spins sont désordonnés. A basse température, ceux-ci sont tous alignés, de valeur +1. A la température critique, des “clusters” de spins inversés se forment progressivement.

**Histogrammes d'énergie.** On cherche maintenant à tracer des histogrammes de répartition des configurations en fonction de leur énergie. Un tel histogramme est représenté en Figure 14, pour  $T = 5J/k_B$ . On remarque que les configurations se répartissent autour de l'énergie moyenne selon une Gaussienne. On peut aussi tracer, sur le même histogramme, les répartitions pour des énergies différentes. Ce tracé est réalisé en Figure 15. On remarque que, plus la température s'approche de la température critique, plus la répartition est étalée et imprécise. En deçà et au delà de la température critique, la gaussienne est plus étroite.

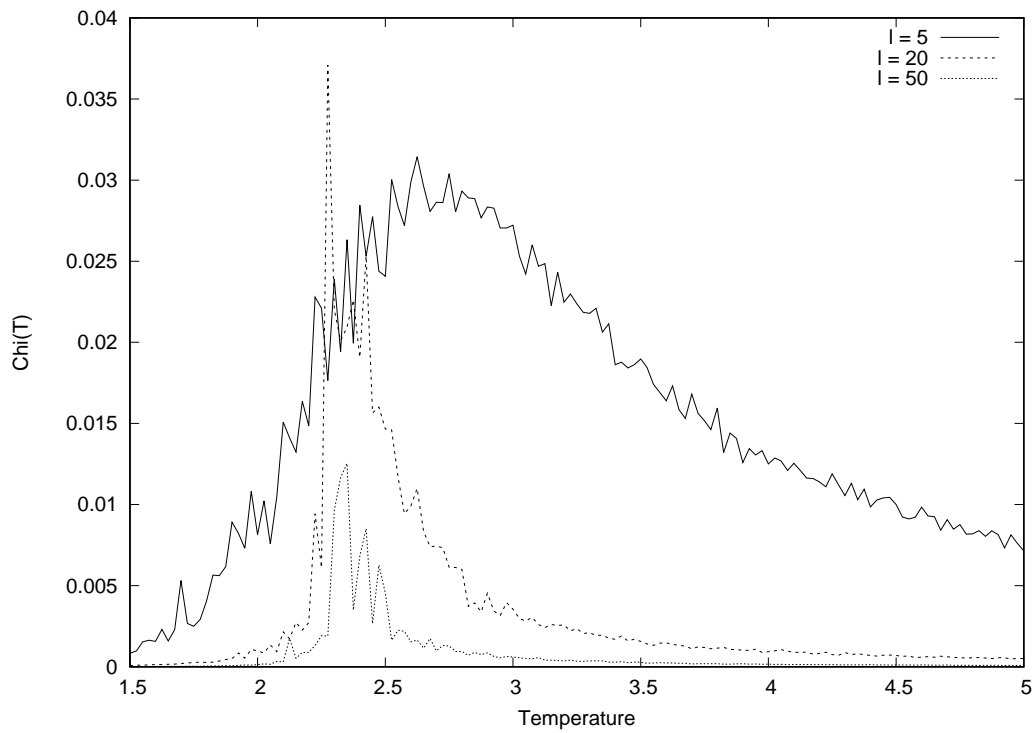


Figure 10: Susceptibilité magnétique en fonction de la température pour  $l = 5, 20, 50$

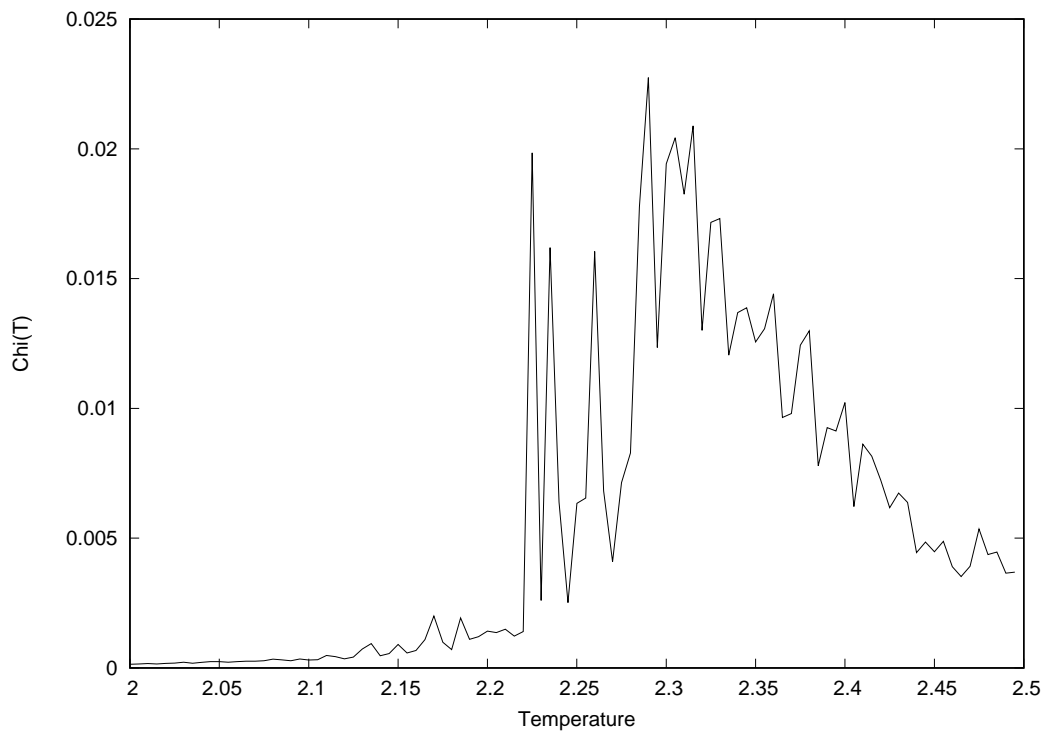
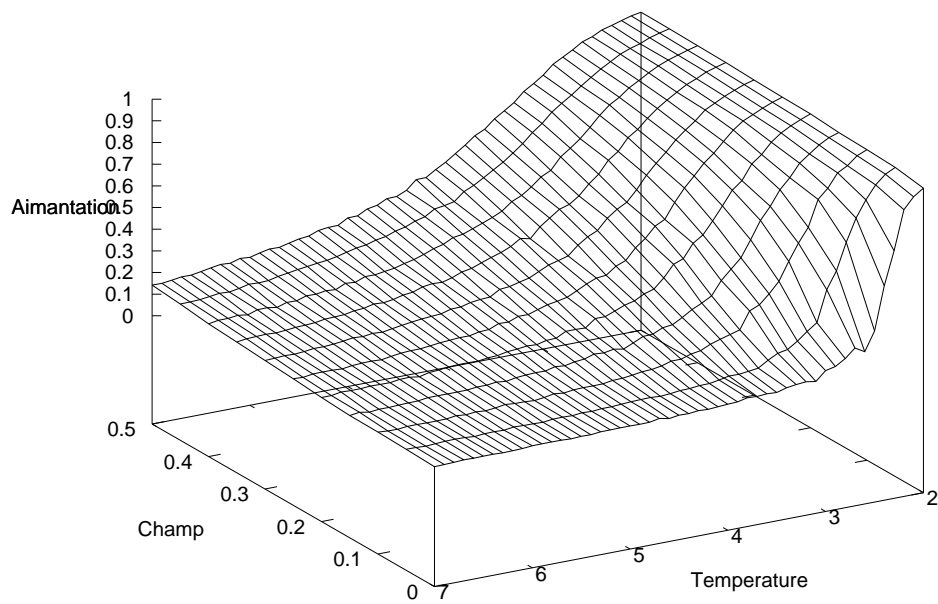


Figure 11: Susceptibilité magnétique en fonction de la température pour  $l = 50$





**Figure 12:** Aimantation en fonction de la température et du champ extérieur

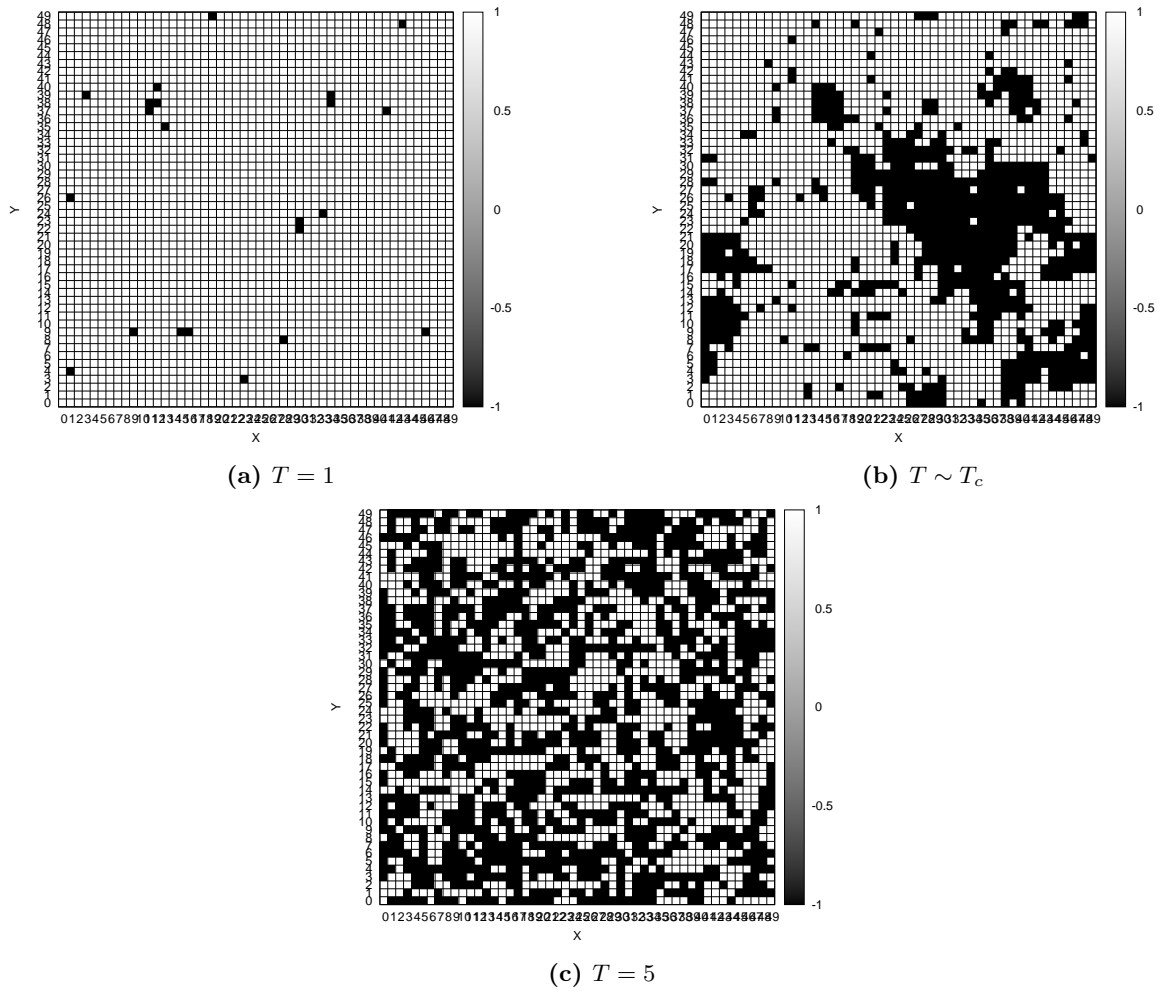
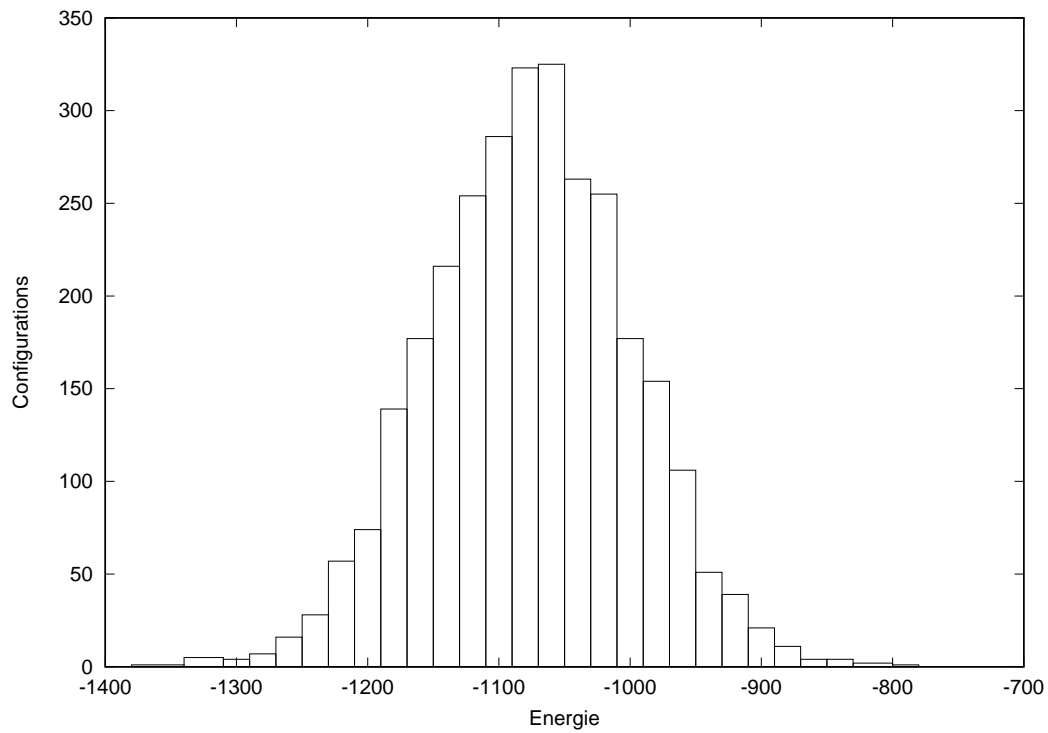
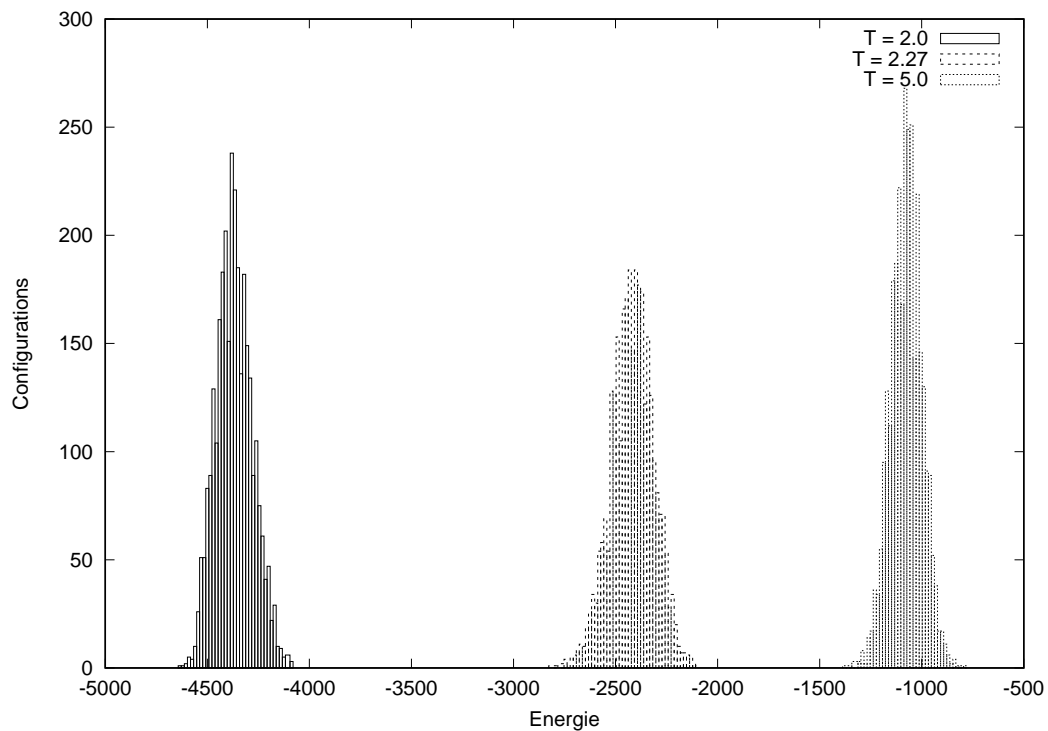


Figure 13: Configuration des spins à diverses températures



**Figure 14:** Histogramme des configurations en fonction de leur énergie à  $T = 5$



**Figure 15:** Histogramme des configurations en fonction de leur énergie à différentes températures