

TD 10. Ferromagnétisme. Transition de phase.

Table des matières

1 (optionnel) Méthode de Monte-Carlo pour le modèle d'Ising	1
2 Le principe variationnel	2
3 Méthode variationnelle du champ moyen dans le modèle d'Ising (Curie-Weiss)	3
4 (optionnel) Dualité de Kramers-Wannier pour le modèle d'Ising 2D (1940)	4

Introduction

- Dans le problème 1 on observe numériquement une **transition de phase** dans le **modèle ferromagnétique d'Ising**. C'est à dire que pour $\beta = \frac{1}{kT} \gg 1$ l'aimantation moyenne $\langle M \rangle$ est non nulle (i.e. les spins sont parallèles) alors que pour $\beta \ll 1$ l'aimantation moyenne est nulle car les spins sont désordonnés. Voir Figure 1.1.
- Dans le problème 2 on montre “**le principe variationnel**” de portée générale en physique statistique : la mesure de Boltzmann p_B est celle qui minimise la fonctionnelle énergie libre $F(p)$ parmi toutes les mesures de probabilités p .
- Dans le problème 3 on se sert du principe variationnel pour calculer de façon approchée l'aimantation moyenne $\langle M \rangle$ non pas pour la mesure de Boltzmann p_B car le calcul est impossible, mais pour une mesure p_{x_0} approchée qui est choisie en minimisant $F(p_x)$ parmi un ensemble restreint de mesures $(p_x)_x$ choisies de sorte à ce que la moyenne $\langle M \rangle_{p_x}$ est calculable. Ici ce choix est appelé “**approximation du champ moyen**” ou **méthode de Weiss**. Cette méthode variationnelle est fondamentale en physique statistique mais aussi en physique quantique.

Voir [ce document](#), cette [expérience](#).

1 (optionnel) Méthode de Monte-Carlo pour le modèle d'Ising

[Vidéo de la solution.](#)

Références : voir le cours suivant sur la [dynamique de Markov](#). [Programme en c++](#).

Soit $N \geq 1$ entier qui est la taille du réseau. On considère le réseau¹ $\Lambda = (\mathbb{Z}/(N\mathbb{Z}))^2$ de taille $N \times N$ et périodique. Chaque site est noté $X = (x, y) \in \Lambda$ et possède une variable $f_X = \pm 1$ qui modélise un spin up ou down. Une configuration $f = (f_X)_{X \in \Lambda}$ est un choix $f_X = \pm 1$ pour chaque point $X \in \Lambda$ du réseau. Soit $B \in \mathbb{R}$ donné qui correspond à un champ magnétique extérieur. On note $X \sim Y$ si X, Y sont proche voisins. L'énergie de la configuration f est

$$E(f) := \sum_X \sum_{Y \text{ tq } X \sim Y} (-f_X \cdot f_Y) + \sum_X B f_X \quad (1.1)$$

1. Combien y a-t-il configurations f possibles ? Si $B = 0$, quelle(s) configuration(s) donnent l'énergie minimale ?

1. On rappelle que $\mathbb{Z}/(N\mathbb{Z})$ est l'ensemble des entiers \mathbb{Z} modulo N . Ainsi $\mathbb{Z}/(N\mathbb{Z}) = \{0, 1, \dots, N-1\}$ et avec la règle que $(N-1) + 1 = 0$.

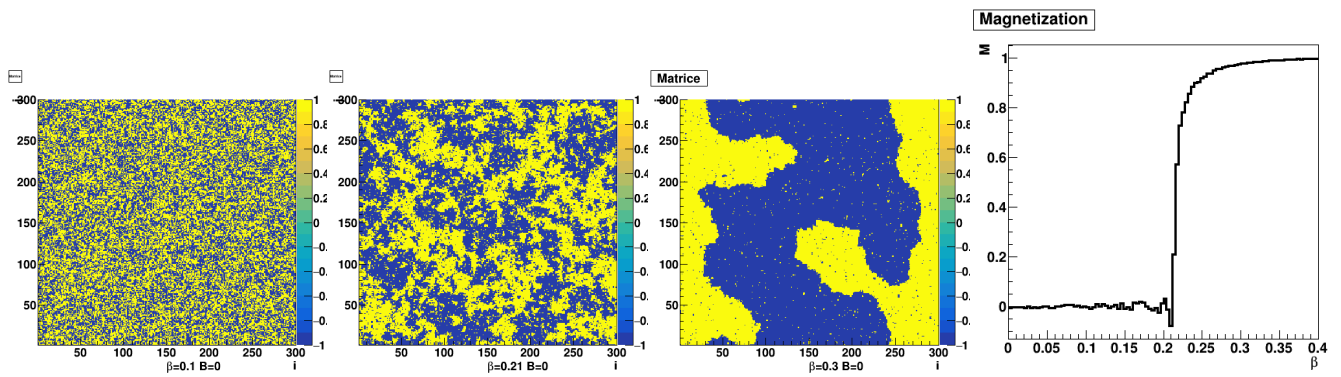


FIGURE 1.1 – Résultat numérique de la méthode de Monte-Carlo pour le modèle d’Ising. Configurations prises au hasard pour les paramètres $\beta = 0.1$ (désordre), 0.21 (transition de phase) et 0.3 (ordre magnétique). Aimantation $M = \frac{1}{N^2} \sum_X f_X$ en fonction de β .

- On fait évoluer les configurations f de façon aléatoire et selon un temps discret $n \in \mathbb{N}$ selon l’algorithme d’évolution suivant appelé **méthode de montecarlo**. Soit $\beta \geq 0$ paramètre fixé qui est $\beta = \frac{1}{kT}$. On part d’une configuration $f(n=0)$ choisie au hasard. Etant donnée une configuration $f = f(n)$ à la date n , on obtient la configuration $f(n+1)$ de la façon suivante. On choisit un site $X \in \Lambda$ au hasard de façon uniforme, et on note f' la configuration identique à f sauf au site X où la valeur est opposée : $f'_X = -f_X$.

- Si $E(f') < E(f)$ on choisit la configuration $f(n+1) = f'$
- Si $E(f') \geq E(f)$ on choisit la configuration $f(n+1) = f'$ avec la probabilité $\exp(-\beta(E(f') - E(f)))$ et on choisit $f(n+1) = f$ avec la probabilité complémentaire.

Exprimer simplement $E(f') - E(f)$ et écrire l’algorithme. Voir Figure 1.1.

- Cet algorithme définit donc une matrice de probabilités de transitions $L = (L_{f',f})_{f',f}$ appelée **matrice de Markov** (voir TD1). Exprimer les éléments de matrice $L_{f',f}$.
 - Montrer la matrice L est **stochastique**, c’est à dire si $\sum_{f'} L_{f',f} = 1, \forall f$ et si $L_{f',f} \geq 0; \forall f, f'$.
 - Montrer que la matrice L est **réversible** (ou vérifie le **principe de balance détaillée**) c’est à dire qu’il existe un vecteur p appelé état d’équilibre tel que $L_{f',f} p_f = L_{f,f'} p_{f'}, \forall f, f'$ où p est précisément la mesure d’équilibre de Boltzmann-Gibbs

$$p(f) = \frac{1}{Z} \exp(-\beta E(f)).$$

Montrer que L réversible implique l’invariance de la mesure $p : Lp = p$.

- Montrer que la matrice L est **mélangeante**, c’est à dire que $\exists n \geq 1, \forall f, f', (L^n)_{f',f} > 0$. D’après le **théorème de Perron-Frobenius**, les trois propriétés précédentes impliquent que la dynamique va converger exponentiellement vite vers l’état d’équilibre p (avec un temps caractéristique τ_β qui dépend de β).

2 Le principe variationnel

vidéo de la solution.

- On considère n états d’énergie $\epsilon_1 \leq \epsilon_2 \dots \leq \epsilon_n$ et une mesure de probabilité quelconque sur ces états notée $p = (p_1, p_2 \dots p_n)$ avec $p_i \geq 0$ et $\sum_{i=1}^n p_i = 1$. L’énergie moyenne

pour cette mesure est notée $\langle E \rangle_p := \sum_i p_i \epsilon_i$ et l'entropie de la mesure est $S(p) = -\sum_{i=1}^n p_i \ln p_i$. On introduit la fonctionnelle suivante sur les mesures de probabilités

$$F(p) := \langle E \rangle_p - S(p)$$

appelée **énergie libre**. Montrer² que F est minimale pour la **mesure de Boltzmann** $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\epsilon_i}, \forall i$ avec $Z = \sum_i e^{-\epsilon_i}$ constante de normalisation, et que la valeur minimale est

$$F = -\ln Z$$

2. On note k la constante de Boltzmann. On suppose la température T , la pression p et un potentiel chimique μ fixés. A chaque état i possible du système on associe maintenant son énergie E_i , son volume V_i , son nombre de particules N_i et on note l'entropie $S(p) = -k \sum_{i=1}^n p_i \ln p_i$, l'énergie moyenne $\langle E \rangle_p := \sum_i p_i E_i$, le volume moyen $\langle V \rangle_p := \sum_i p_i V_i$, le nombre moyen de particules $\langle N \rangle_p = \sum_i p_i N_i$. Dédurre de (1) que les fonctionnelles

$$F_T(p) = \langle E \rangle_p - TS(p) \quad : \text{énergie libre}$$

$$G_{T,p}(p) = \langle E \rangle_p + p \langle V \rangle_p - TS(p) \quad : \text{enthalpie libre}$$

$$J_{T,\mu}(p) = \langle E \rangle_p - \mu \langle N \rangle_p - TS(p) \quad : \text{grand potentiel}$$

sont minimales respectivement pour les mesures d'équilibres $p_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i}{kT}}, p_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i + pV_i}{kT}}, p_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i - \mu N_i}{kT}}$ et les valeurs respectives sont $-kT \ln Z$.

Remarque 2.1. Par exemple en **Thermo-chimie**, un système chimique peut échanger de l'énergie et du volume (il évolue à température T et pression p fixés) et donc l'équilibre chimique correspond au minimum de G .

3 Méthode variationnelle du champ moyen dans le modèle d'Ising (Curie-Weiss)

[vidéo de la solution.](#)

Référence : [1, Tome 1, p.427, p264,p301], [2], [3, chap.5].

On considère à nouveau le modèle d'Ising (1.1) mais en généralisant un petit peu :

$$E(f) := \sum_X \sum_{Y, Y \neq X} (-V(X-Y) f_X \cdot f_Y) + \sum_X B f_X \quad (3.1)$$

où $V(X) > 0$ est une fonction de couplage donnée. On note $M(f) := \sum_X f_X$ l'aimantation de la configuration f . On souhaiterait calculer l'aimantation moyenne $\langle M \rangle_P := \sum_f p(f) M(f)$ et la capacité calorifique $C(T) = \frac{d\langle E \rangle_P}{dT}$ avec $\langle E \rangle_P = \sum_f p(f) E(f)$ avec $p(f) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E(f)}{kT}}$ la mesure de probabilité de Boltzmann. Le calcul est trop difficile (ou impossible) alors on ne va pas utiliser la mesure de Boltzmann $p(f)$ mais une mesure approchée $p_{x_0}(f)$ que l'on va d'abord déterminer grâce au principe variationnel.

1. Pour $x \in \mathbb{R}$, on choisit d'utiliser la mesure de probabilité $p_x(f) := \frac{1}{Z} e^{xM(f)}$ qui a la simplicité d'être un produit de mesures identiques

$$p_x(f) = \prod_{X \in \Lambda} \tilde{p}_x(f_X)$$

2. Utiliser la méthode des **multiplicateurs de Lagrange** qui consiste à résoudre $dF = \lambda d\Sigma$ avec $\Sigma(p) = \sum_i p_i$ et $\lambda \in \mathbb{R}$.

avec $\tilde{p}_x(f_X) = \frac{1}{z} e^{xf_X}$ et z que l'on calculera. Pour x, T fixés on définit l'énergie libre $F_T(x) := \langle E \rangle_{p_x} - TS(p_x)$ où $S(p_x) := -k \sum_f p_x(f) \ln p_x(f)$ est l'entropie. Montrer que $\langle f_X \rangle_{\tilde{p}_x} = \tanh x$, puis

$$F_T(x) = N(-v \tanh^2(x) + B \tanh x + kT(x \tanh x - \ln 2 - \ln \cosh x))$$

avec $v = \sum_{X, X \neq 0} V(X)$ et N est le nombre total de sites.

2. A T fixé, montrer que $F_T(x)$ est minimum en x_0 vérifiant $\tanh x_0 = \frac{(kTx_0+B)}{2v}$. Si $B = 0$, résoudre graphiquement cette équation et tracer l'allure de $x_0(T)$ puis de $F_T(x)$. Observer qu'il y a une bifurcation à la température $T_c = \frac{2v}{k}$ appelée **température critique** ou **température de Curie**. Comparer $\beta_c = \frac{1}{kT_c}$ avec la valeur numérique obtenue à l'exercice 1 et à la valeur exact $\beta_c^{\text{exact}} = \frac{1}{4} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.22$ donnée par la **méthode de Kramers-Wannier**. Donner l'expression de $x_0(T)$ pour $|T - T_c| \ll 1$.
3. Pour cette mesure de probabilité p_{x_0} à $B = 0$, calculer et étudier l'aimantation moyenne $\langle M \rangle$ en fonction de T , près de la température critique T_c .
4. Pourquoi appelle-t-on la mesure de probabilité p_{x_0} **l'approximation du champ moyen**? Quelles caractéristiques statistiques supplémentaires possède la distribution de Boltzmann $p_B(f) := \frac{1}{z} e^{-\frac{E(f)}{kT}}$?

4 (optionnel) Dualité de Kramers-Wannier pour le modèle d'Ising 2D (1940)

Références : [2, p.132], [Yvan Velenik. Le modèle d'Ising. DEA. 2009. cel-00392289.](#)

On présente un argument de symétrie de **Krammer-Wannier** (1941)³ qui permet de calculer la **valeur exacte de la température critique**

$$\beta_c^{\text{exact}} = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.44$$

pour la transition de phase dans le modèle 2D du **modèle d'Ising** sur le réseau $\Lambda = \left(\frac{\mathbb{Z}}{N\mathbb{Z}}\right)^2$ de taille $N \times N$ et périodique, pour $N \rightarrow \infty$ dans la situation sans champ externe ($B = 0$).

On rappelle que l'énergie d'une configuration $f \in \{-1, 1\}^\Lambda$ est

$$E(f) := \sum_{X \sim Y} (-f_X \cdot f_Y) \tag{4.1}$$

où $X \sim Y$ signifie que X, Y sont des sites voisins. Ce réseau Λ peut être considéré comme un graphe dont les sommets sont les sites et les arêtes sont les paires $e = \{e_1, e_2\}$ de deux sites voisins $e_1 = X \sim e_2 = Y$. On notera $\mathbb{E}(\Lambda)$ l'ensemble de ces arêtes. Ainsi on peut écrire l'énergie d'une configuration

$$E(f) = \sum_{e \in \mathbb{E}(\Lambda)} (-f_{e_1} \cdot f_{e_2}).$$

La loi de Boltzmann donne la probabilité d'une configuration f à la température $\beta = \frac{1}{T}$:

$$p(f) = \frac{1}{Z_\Lambda(\beta)} e^{-\beta E(f)},$$

où la constante de normalisation $Z_\Lambda(\beta)$ appelée **fonction de partition du réseau Λ à la température β** est telle que $\sum_{f \in \{-1, 1\}^\Lambda} p(f) = 1$. La température critique recherchée β_c

3. Ensuite Onsager en 1944 a réalisé le calcul exact de l'énergie libre.

est une valeur de β donnant des grandeurs thermodynamique singulières (non dérivabilité, divergente, etc) donc pour laquelle **la fonction** $\beta \rightarrow Z_\Lambda(\beta)$ **est non analytique** (i.e. n'admet pas une expression en série entière convergente). Plus précisément, par définition une transition de phase est dite :

- **transition de phase du premier ordre** si $Z(\beta)$ n'est pas continue (pas C^0) en β_c .
- **transition de phase du deuxième ordre** si $Z(\beta)$ est continue mais pas différentiable (pas C^1) en β_c . etc

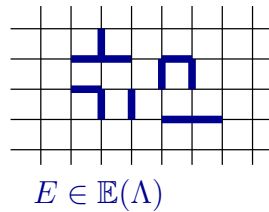
1. Montrer l'égalité $\forall \beta \in \mathbb{R}, \forall f_X, f_Y \in \{-1, +1\}$,

$$e^{\beta f_X f_Y} = \cosh \beta (1 + f_X f_Y \tanh \beta)$$

2. Montrer que $Z_\Lambda(\beta)$ peut s'écrire

$$Z_\Lambda(\beta) = (\cosh \beta)^{|\mathbb{E}(\Lambda)|} \sum_{E \subset \mathbb{E}(\Lambda)} (\tanh \beta)^{|E|} \sum_{f \in \{-1,1\}^\Lambda} \prod_{e \in E} (f_{e_1} f_{e_2})$$

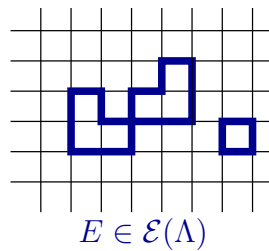
où $|\mathbb{E}(\Lambda)|$ est le cardinal (nombre d'éléments) de $\mathbb{E}(\Lambda)$ et $E \subset \mathbb{E}(\Lambda)$ désigne un sous ensemble quelconque d'arêtes. Exemple :



3. On note

$$\mathcal{E}(\Lambda) := \{E \subset \mathbb{E}(\Lambda), \text{ t.q. chaque sommet } X \in \Lambda \text{ apparait un nombre pair de fois}\}$$

Exemple de configuration $E \in \mathcal{E}(\Lambda)$:

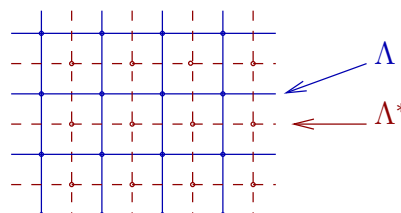


Montrer que

$$Z_\Lambda(\beta) = (\cosh \beta)^{|\mathbb{E}(\Lambda)|} 2^{|\Lambda|} \sum_{E \in \mathcal{E}(\Lambda)} (\tanh \beta)^{|E|}. \quad (4.2)$$

Aide : on montrera au préalable que pour un ensemble d'arêtes $E \subset \mathbb{E}(\Lambda)$ fixé, si le sommet $a \in \Lambda$ apparaît un nombre impair de fois alors $\sum_{f \in \{-1,1\}^\Lambda} \prod_{e \in E} (f_{e_1} f_{e_2}) = 0$.

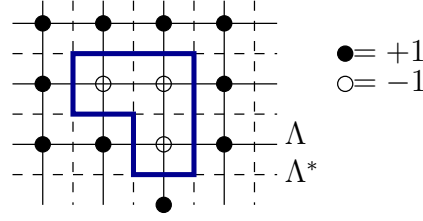
4. On note Λ^* le **graphe dual** de Λ : les sommets de Λ^* sont le centre des faces de Λ et les arêtes de Λ^* croisent une arête de Λ :



On note

$$\Phi : f \in \{-1, +1\}^\Lambda \rightarrow E \in \mathcal{E}(\Lambda^*)$$

l'application qui sélectionne les arrêtes de Λ^* séparant deux valeurs $+1, -1$ différentes de f , par exemple⁴ :



Observer que $f_X f_Y = 1 - 2\mathbf{1}_{f_X \neq f_Y}$ où $\mathbf{1}_{f_X \neq f_Y} = 1$ si $f_X \neq f_Y$ et $\mathbf{1}_{f_X \neq f_Y} = 0$ sinon. Dédurre que pour une configuration f donnée

$$\sum_{X \sim Y} f_X f_Y = |\mathbb{E}(\Lambda)| - 2|\Phi(f)|$$

Observer que Φ est une bijection et obtenir une nouvelle expression de $Z_\Lambda(\beta)$:

$$Z_\Lambda(\beta) = e^{\beta|\mathbb{E}(\Lambda)|} \sum_{E \in \mathcal{E}(\Lambda^*)} (e^{-2\beta})^{|E|} \quad (4.3)$$

5. On a obtenu deux expressions de $Z(\beta)$. La première (4.2) appelée « High Temperature » car convergente dans la limite thermodynamique $N \rightarrow +\infty$, pour β assez petit, notée

$$Z_{\Lambda^*}^{HT}(\beta) = \lim_{N \rightarrow +\infty} (\cosh \beta)^{|\mathbb{E}(\Lambda)|} 2^{|\Lambda|} \sum_{E \in \mathcal{E}(\Lambda^*)} (\tanh \beta)^{|E|},$$

et la deuxième (4.3) appelée « Low Temperature » car convergente pour β assez grand est notée

$$Z_\Lambda^{LT}(\beta) = \lim_{N \rightarrow +\infty} e^{\beta|\mathbb{E}(\Lambda)|} \sum_{E \in \mathcal{E}(\Lambda^*)} (e^{-2\beta})^{|E|}.$$

Si il y a une transition de phase, ces expressions vont diverger à une certaine valeur β_c (car sinon $Z(\beta)$ serait analytique et les grandeurs thermodynamiques aussi) et que l'on suppose unique. De plus, le graphe carré considéré est **self-dual** $\Lambda = \Lambda^*$. D'après les expressions ci-dessus, cela implique⁵

$$\tanh \beta_c = e^{-2\beta_c}.$$

Dédurre que

$$\beta_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.44$$

Références

- [1] Roger Balian. *From microphysics to macrophysics : methods and applications of statistical physics*, volume 1,2. Springer Science & Business Media, 2007.
- [2] Sacha Friedli and Yvan Velenik. *Statistical Mechanics of Lattice Systems : A Concrete Mathematical Introduction*. Cambridge University Press, 2017.
- [3] Yvan Velenik. *Le modèle d'ising*. 2009.

4. Remarquer la ressemblance avec les territoires et les frontières en fin de partie dans le **jeu de GO**. See [arxiv.1710.07360.pdf](https://arxiv.org/abs/1710.07360)

5. Plus généralement on a une relation de dualité $\tanh \beta^* = e^{-2\beta}$ entre les températures sur les réseau Λ et Λ^* .