

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 réseau<sup>1</sup>  $\Lambda = (\mathbb{Z}/(N\mathbb{Z}))^2$  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  $(N-1) + 1 = 0$ .

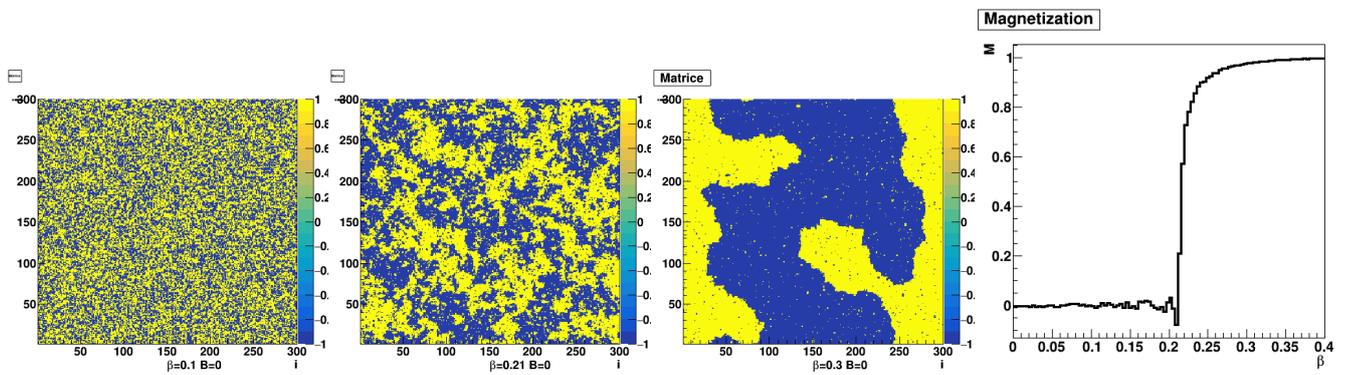


FIGURE 1.1 – Résultat numérique de la méthode de Monte-Carlo pour le modèle d’Ising. Configurations prises au hasard pour les paramètres  $\beta = 0.1$  (désordre),  $0.21$  (transition de phase) et  $0.3$  (ordre magnétique). Aimantation  $M = \frac{1}{N^2} \sum_X f_X$  en fonction de  $\beta$ .

- 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  $\tau_\beta$  qui dépend de  $\beta$ ).

## 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**. Montrer<sup>2</sup> 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  $\mu$  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

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

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)<sup>3</sup> 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  $\Lambda$  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  $\Lambda$  à la température  $\beta$**  est telle que  $\sum_{f \in \{-1, 1\}^\Lambda} p(f) = 1$ . La température critique recherchée  $\beta_c$

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

est une valeur de  $\beta$  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  $\beta_c$ .
- **transition de phase du deuxième ordre** si  $Z(\beta)$  est continue mais pas différentiable (pas  $C^1$ ) en  $\beta_c$ . etc

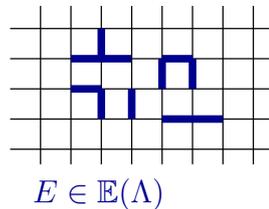
1. Montrer l'égalité  $\forall \beta \in \mathbb{R}, \forall f_X, f_Y \in \{-1, +1\}$ ,

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

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

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

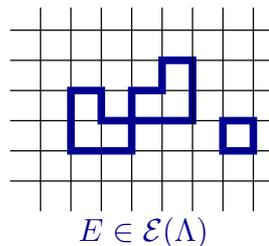
où  $|\mathbb{E}(\Lambda)|$  est le cardinal (nombre d'éléments) de  $\mathbb{E}(\Lambda)$  et  $E \subset \mathbb{E}(\Lambda)$  désigne un sous ensemble quelconque d'arêtes. Exemple :



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  $E \in \mathcal{E}(\Lambda)$  :

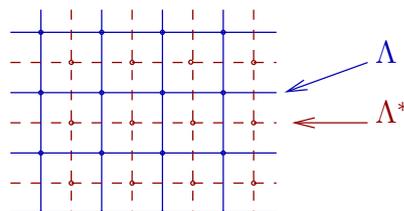


Montrer que

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

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  $\sum_{f \in \{-1,1\}^\Lambda} \prod_{e \in E} (f_{e_1} f_{e_2}) = 0$ .

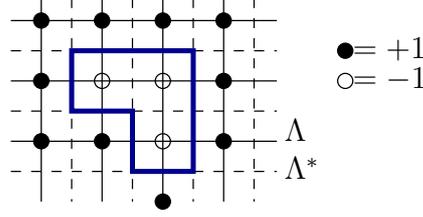
4. On note  $\Lambda^*$  le **graphe dual** de  $\Lambda$  : les sommets de  $\Lambda^*$  sont le centre des faces de  $\Lambda$  et les arêtes de  $\Lambda^*$  croisent une arête de  $\Lambda$  :



On note

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

l'application qui sélectionne les arrêtes de  $\Lambda^*$  séparant deux valeurs  $+1, -1$  différentes de  $f$ , par exemple<sup>4</sup> :



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  $\Phi$  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  $\beta$  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  $\beta$  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  $\beta_c$  (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 implique<sup>5</sup>

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

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  $\Lambda$  et  $\Lambda^*$ .