

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université d'Oran des Sciences et de la Technologie (USTO-MB)



Faculté de Physique
Département de Génie Physique
Laboratoire d'Étude Physique des Matériaux

Thèse

Présenté pour l'obtention d'un Doctorat 3^e cycle en Physique
option Physique Médicale

Par

ZERGOUG Ismail

Thème

Modèle d'Ising dilué

Soutenue le **17/02/2015** devant la commission d'examen

Jury

Qualité	Nom et Prénom	Grade	Etb d'origine
Président	M.Zekri Nouredine	Professeur	USTO-MB
Directeur de thèse	M.Bouamrane Rachid	Professeur	USTO-MB
Examineur	M.Hiadi Said	Professeur	USTO-MB
Examineur	M.Ait Kaci Houcine	Professeur	USTO-MB
Examineur	M.Hachi Mostefa	Professeur	Université d'Oran

Année Universitaire : 2014 / 2015

Dédicace

Ce travail est dédié à mes parents, à ma sœur et à mon frère. Je n'aurais rien fait de tout cela sans votre amour et votre encouragement.

Remerciements

بِسْمِ اللّٰهِ الرَّحْمٰنِ الرَّحِیْمِ

Commencer une thèse et la mener à terme est toujours un défi . Mais à présent que je me retrouve face à mes remerciements, je me sens tout impuissant.

Le premier remerciement revient bien justement à mon directeur de thèse, **Pr.Bouamrane Rachid**. Les mots me manquent pour exprimer ma gratitude. Durant ces années de doctorat à vos coté, j'ai l'impression d'avoir grandi, d'avoir acquis une certaine confiance grâce à vous. D'un point de vue relationnel, j'ai trouvé une relation cordiale, une écoute et ce que j'ai aimé par-dessus tout une franchise à toute épreuve. J'ai énormément appris à vos côtés. Merci pour tout.

Je tiens aussi à remercier **Pr.Zerkri Noureddine** d'avoir présider le jury, **Pr.Hiadsy Said** notre cher responsable de la formation doctorale 3^e cycle d'être parmi le jury afin d'examiner mon travail. Je le remercie aussi pour son soutien et ses conseils.

Un autre remerciement revient à **Pr.Ait Kaci Houcine** et à **Pr.Hachi Mostapha** d'avoir accepter de juger mon travail et de m'avoir encourager.

On dit que les amis sont la famille que nous choisissons pour nous-mêmes. Alors mes amis, un vif merci pour vous de m'avoir toujours encouragée et s'être inquiétés du bon déroulement de mes études.

Résumé

Le présent document expose l'étude d'une simulation numérique d'un système ferromagnétique en utilisant le modèle d'Ising bidimensionnelle.

Un programme de simulation est conçu pour effectuer le calcul de grandeurs thermodynamiques telles que l'énergie interne, l'aimantation, la capacité thermique, la susceptibilité magnétique et le cumulante de Binder. La validation du programme est faite par comparaison avec les résultats de la littérature du modèle d'Ising régulier.

L'introduction d'impuretés rend le système désordonné. L'effet de la dilution sur la température critique du modèle d'Ising sur le réseau carré est étudié pour différents degrés de dilutions. La méthode du Binder cumulante échoue alors que la méthode du maximum de capacité thermique donne un bon résultat au même degré de dilution. Le cumulante de Binder devrait être revu dans le cas du désordre.

La méthode de Frank et Lobb s'avère une méthode numérique intéressante et précise dans la détermination de la température de transition du modèle d'Ising régulier. Elle devient obsolète à l'introduction d'un faible désordre. Une augmentation de la précision de calcul devrait résoudre le problème.

Mots clés : Modèle d'Ising, Dilution, Simulation Monte Carlo, Transition de phase, Cumulant de Binder, Méthode de Frank et Lobb.

Abstract

This document presents a study of a numerical simulation of a ferromagnetic system using 2D Ising model.

A simulation program is developed to perform the calculation of thermodynamic quantities such as the internal energy, the magnetization, the heat capacity, the magnetic susceptibility and the Binder cumulant. The validation of this program is done by comparison with previous results for regular 2D Ising model.

The introduction of impurities make the system disordered. The effect of bond dilution on the critical temperature of the Ising model on the square lattice is studied over a rang of dilutions values. The binder cumulant method breaks down whereas the maximum heat capacity method gives a good result at the same dilution degree. The Binder cumulant should be revised for disorder cases.

The Frank and Lobb method appears an interesting and accurate numerical method in determining the transition temperature of the regular Ising model. It becomes obsolete with the introduction of a weak disorder. Increasing the accuracy of calculation should solve the problem.

Keywords : Ising model, Dilution, Monte Carlo simulation , Phase transition, Binder Cumulant, Frank and Lobb method.

Table des matières

Dédicace	ii
Remerciements	iii
Résumé	v
Abstract	vi
Table des matières	ix
Table des figures	xv
Liste des tableaux	1
Introduction et motivation	1
1 Généralités	3
1.1 Modèles de Spin	4
1.1.1 Modèle d'Heisenberg	4
1.1.2 Modèle d'Ising	5
1.1.3 Modèle de Potts	5

1.1.4	Modèle XY	6
1.2	Géométrie des réseaux	7
1.3	Transition de phase, Phénomènes critiques et Universalité	11
1.4	Mise en échelle de taille finie en transition de phase du 2 ^e ordre	15
1.5	Système désordonné	17
2	Modèle d'Ising et percolation	19
2.1	Modèle d'Ising à 1D	20
2.2	Modèle d'Ising à 2D	22
2.3	Percolation et transition de phase	25
3	Simulation de la transition de phase 2^eordre	34
3.1	Introduction	35
3.2	Algorithme de MC Metropolis	36
3.3	Étude du Modèle d'Ising régulier en 2D	40
3.3.1	Analyse des données	43
3.4	Analyse d'erreurs	50
3.4.1	Erreur statistique	51
3.4.2	Erreur systématique	52
3.5	Ralentissement critique	53
3.6	Autres algorithmes	53
3.6.1	L'algorithme de Swendsen-Wang	54
3.6.2	L'algorithme de Wolff	55
3.7	Conditions aux limites	56
3.7.1	Condition aux limites périodique :	56
3.7.2	Condition aux limites elliptique :	56
3.7.3	Condition aux limites à bords libres :	57
4	Étude numérique du modèle d'Ising dilué	58
4.1	Description du modèle	59

4.2	Méthode de simulation et résultats	60
4.2.1	Dépendance de la température critique T_c du désordre σ .	62
4.2.2	Valeur de T_c à $\sigma = 0.5$	73
5	Modèle d'Ising et la méthode de Frank et Lobb	78
5.1	Introduction	79
5.2	Méthode et résultats	79
	Conclusion	95
A	Calcul Parallèle avec MPI	97
A.1	Bibliothèque MPI	99
A.1.1	Environnement MPI	99
A.1.2	Communication point à point	100
A.1.3	Communications collectives	102
A.1.4	Opérations de réduction et communications collectives . .	104
A.2	Optimisation d'un programme parallèle	106
A.3	Modes d'envoi des messages avec MPI	107
A.3.1	Standard	107
A.3.2	Synchronous	107
A.3.3	Buffered	108
B	TamiHPC, un calculateur de haute performance	109
C	Publications	112
	Bibliographie	126

Table des figures

1.1	Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches haut (bleu) et bas (rouge) représentent des spins positifs et négatifs respectivement	5
1.2	Représentation du modèle de Potts pour différents états q	6
1.3	Le modèle XY sur un réseau carré bidimensionnel	7
1.4	Diagramme de Voronoi [32]	10
1.5	Superposition d'un diagramme de Voronoï (en pointillés) et de sa triangulation de Delaunay (ligne continue) [35]	11
1.6	Paramètre d'ordre vs. température et champ magnétique [37]	14
2.1	Représentation graphique d'une chaîne du modèle d'Ising. Les cercles en bleu représentent les spins, et les traits sont les liens d'interactions \mathcal{J} entre eux.	20
2.2	Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré. Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction \mathcal{J} (traits noir).	23
2.3	Percolation des sites pour $p = 0.5$	26
2.4	Percolation des liens pour $p = 1$	27

2.5	Percolation des liens pour $p = 0.7$	27
2.6	Percolation des liens pour $p = 0.5$	28
2.7	La probabilité de percolation	29
2.8	Taille moyenne des amas finis de la percolation [30]	31
3.1	Interprétation graphique de l'algorithme de MC Metropolis [38] .	39
3.2	Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 3.0\beta$	41
3.3	Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 2.4\beta$	41
3.4	Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 2.269\beta$	42
3.5	Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 1.5\beta$	42
3.6	Représentation de l'énergie moyenne $[\mathcal{J}]$ en fonction de la température $[\beta]$	43
3.7	Représentation de l'aimantation absolue en fonction de la température $[\beta]$	44
3.8	Représentation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$	44
3.9	Représentation de la susceptibilité magnétique en fonction de la température $[\beta]$	45
3.10	Variation du facteur de Binder en fonction de la température pour différentes tailles du système.	47
3.11	Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différentes tailles du système.	48
3.12	Variation du logarithme de la capacité calorifique en fonction du logarithme de la taille du système.	49
3.13	Variation du logarithme de l'aimantation absolue en fonction du logarithme de la taille du système.	50

3.14	Variation de l'erreur statistique sur l'énergie pour différentes valeurs de températures.	51
3.15	Variation de l'erreur statistique sur l'aimantation pour différentes valeurs de températures.	52
3.16	Application des conditions aux limites pour le modèle d'Ising 2D : Condition aux limites périodique [47]	56
3.17	Application des conditions aux limites pour le modèle d'Ising 2D : Condition aux limites elliptique [47]	57
3.18	Application des conditions aux limites pour le modèle d'Ising 2D : Condition aux limites à bords libres [47]	57
4.1	Réseau régulier (a), réseau désordonné (b) avec $\sigma = 0.1$	59
4.2	Variation de l'énergie moyenne $[\mathcal{J}]$ ainsi que l'aimantation moyenne absolue en fonction du timeslice pour 100 échantillons.	61
4.3	L'énergie moyenne $[\mathcal{J}]$.vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.	63
4.4	La capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$.vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.	63
4.5	L'aimantation absolue .vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.	64
4.6	La susceptibilité magnétique .vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.	64
4.7	Le facteur de Binder .vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.	65
4.8	Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0$	66
4.9	Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.05$ et $\sigma = 0.10$	67
4.10	Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.15$ et $\sigma = 0.20$	68

4.11	Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.25$ et $\sigma = 0.30$	69
4.12	Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.30$ et $\sigma = 0.350$	70
4.13	Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.40$ et $\sigma = 0.450$	71
4.14	Température critique en fonction du paramètre de désordre.	72
4.15	Facteur de Binder critique en fonction du paramètre de désordre.	73
4.16	Variation de la température critique en fonction du paramètre de désordre pour les deux méthodes.	74
4.17	Variation du facteur de Binder en fonction de la température pour $\sigma = 0.5$ (16384 échantillons).	75
4.18	Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour $\sigma = 0.5$ (16384 échantillons).	76
4.19	Variation du facteur de Binder en fonction de la température pour $\sigma = 0.5$ (590000 échantillons).	77
5.1	La réduction du réseau	80
5.2	Propagation des liens selon les transformations ∇Y et $Y \nabla$	80
5.3	Transformations $Y \nabla Y$	81
5.4	Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différentes tailles à $\sigma = 0$	83
5.5	Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour $\sigma = 0.05$, $N = 1024$ avec $\epsilon_0 = 0$	84
5.6	Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0$	85
5.7	Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.05$ et $\sigma = 0.10$	86
5.8	Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.15$ et $\sigma = 0.20$	87

5.9	Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.25$	88
5.10	Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.3$ et $\sigma = 0.35$	89
5.11	Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.4$ et $\sigma = 0.5$	90
5.12	Comparaison de la variation de la température critique T_c en fonction du paramètre de désordre σ entre la méthode de <i>Frank et Lobb</i> (FLIsing) et celle de <i>Monte Carlo</i> (MCIsing).	92
5.13	Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différents σ à $N=16384$ avec $\epsilon_0 = 10^{-1}$	93
5.14	Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différents σ à $N=256$ avec $\epsilon_0 = 10^{-3}$	93
5.15	Variation du maximum de la capacité calorifique en fonction de σ à $N=256$ pour différents ϵ_0	94
A.1	Mémoire distribuée	98
A.2	Fonction <i>MPI_BCAST()</i> . Le processus Proc1 diffuse la donnée A (stockée dans sa mémoire) à tous les processus Proc0 à Proc3	102
A.3	Fonction <i>MPI_SCATTER()</i> . Le processus Proc1 diffuse ses données A_0, \dots, A_3 (stockées dans sa mémoire) à tous les processus Proc0 à Proc3 de façon répartie.	103
A.4	Fonction <i>MPI_GATHER()</i> . Le processus Proc1 collecte les données A_0, \dots, A_3 provenant des processus Proc0 à Proc3.	103
A.5	Fonction <i>MPI_ALLGATHER()</i> . Le processus Proc1 collecte les données A_0, \dots, A_3 provenant des processus Proc0 à Proc3 et le diffuse à tous les processus.	104
A.6	Fonction <i>MPI_REDUCE()</i> . Le processus Proc1 collecte les données A_0, \dots, A_3 provenant des processus Proc0 à Proc3 et fait une opération de réduction.	105

A.7	Fonction <i>MPI_ALLREDUCE()</i> . Opération de réduction et diffusion du résultat à l'ensemble des processus.	106
B.1	TamiHPC	109
B.2	Les switches	110
B.3	Serveur Debian	110

Liste des tableaux

1.1	La coordinence des différentes structures géométriques	8
1.2	Définition et signification des exposants critiques	13
1.3	Principales relations entre les exposants critiques	13
1.4	Quelques modèles et leurs exposants critiques [41]	14
2.1	Les exposants critiques du modèle d'Ising a proximité du point critique résolu exactement en 2D et numériquement en 3D.	25
2.2	Valeurs de p_c pour différents réseaux à 2 et 3 dimensions.	29
3.1	Valeurs de $C_v(max)$ et de la température critique T_c pour différentes Tailles du système.	48
4.1	Valeurs du facteur de Binder critique U^* et de la température critique T_c pour différentes concentrations de lien.	72
4.2	Valeurs de $C_v(max)$ et de la température critique T_c déterminée par les deux méthodes pour différentes concentration de lien.	76
5.1	Valeurs la température critique T_c déterminée par les deux méthodes pour différentes concentration de lien.	91
A.1	Quelques opérations de réduction prédéfinies.	105

Introduction et motivation

Le modèle d'Ising fut introduit dans les années 20 par *Lenz* [1] pour l'étude des transitions de phase des ferromagnétiques à la température de curie. Le problème était de trouver une explication au phénomène de l'aimantation spontanée observé dans les matériaux ferromagnétiques avec un modèle de chaîne ferromagnétique. *Ising* (1925) dans son sujet de doctorat montra que le phénomène n'apparaît pas dans le cas unidimensionnel [2]. L'histoire ne s'arrêta pas là, *Peierls*, en 1936, prouva l'existence d'une transition de phase en 2D [4]. *Kramers et Wannier*[5] ont calculé la température de curie du modèle bidimensionnel d'Ising, puis *Onsager* calcula la fonction de partition en 2D [6] dans le cas d'un champ extérieur nul. L'expression exacte de l'aimantation spontanée pour le modèle d'Ising à 2D a été calculée par *C.N.Yang* [8] pour un réseau carré, par *R.B.Potts* pour un réseau triangulaire [9].

L'extension à 3D est beaucoup plus complexe. Plusieurs travaux ont été faite mais aucune solution analytique n'a été trouvée. Le modèle d'Ising 3D est classé parmi les problèmes insolubles. cela n'empêche pas de le résoudre numériquement et plusieurs solutions approximatives ont vu le jour [42].

Malgré que ses premiers résultats étaient peu favorables, il est devenu évident

que son importance s'étend au-delà du domaine du magnétisme vers des champs variés tels que la *percolation* [22], la *sociophysique* [33], la biologie [49], l'imagerie [50] ... Il a été aussi appliqué sur différents types de réseaux tel que le réseau régulier et le réseau désordonné.

Dans le présent document, On s'est intéressé à l'étude du modèle d'Ising bidimensionnel en présence du désordre. Dans le premier chapitre, des généralités sur les modèles de spins et la physique des transitions de phase ainsi que les phénomènes critiques ont été abordé. Au deuxième chapitre, une description détaillée du modèle d'Ising à 1D et 2D est présentée, suivie par une présentation de la relation entre modèle d'Ising et percolation. La notion de désordre est aussi évoquée. Le troisième chapitre discute la simulation du modèle d'Ising 2D en utilisant la méthode de Monte Carlo Metropolis qui permet aussi de déterminer la valeur de la température de transition de phase telle que prédite par la théorie. L'avant dernier chapitre concerne l'étude de l'évolution de la valeur de la température de transition du modèle d'Ising 2D en présence d'une certaine concentration de désordre ; des liens entre les spins sont coupés. C'est le modèle d'Ising dilué. Le modèle a été étudié pour différentes concentrations de désordre et des résultats ont été tirés et interprétés. Il s'est avéré qu'on pourrait calculer la fonction de partition malgré sa complexité en utilisant la méthode de Frank et Lobb tout en déterminant la valeur de la température de transition avec une très bonne précision. Ce qui a fait l'objectif du dernier chapitre.

Des généralités sur la physique statistique sont exposées dans ce premier chapitre. Une présentation des modèles de spins est introduite suivie par une illustration des différentes géométries de réseau utilisées dans un système de spin. La physique de la transition de phase est abordée ainsi que les phénomènes critiques et la notion d'universalité qui décrivent le comportement d'un tel système au voisinage de la transition de phase. Et à la fin, on montre l'influence du désordre sur un système magnétique et comment les exposants critiques varient avec ce désordre.

1.1 Modèles de Spin

La modélisation d'un système de spin est un aspect clé du magnétisme à température finie. Les modèles de spin permettent une description simple du comportement d'un spin dans un milieu magnétique. Une description de ces modèles est proposée.

1.1.1 Modèle d'Heisenberg

Très peu de temps après le développement de la mécanique quantique, *Heisenberg* et *Dirac* ont proposé indépendamment que le phénomène magnétique dans les solides peut être compris à la base d'un modèle d'échanges couplés de moment quantique angulaire (Spin), avec un hamiltonien de la forme

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.1)$$

Où \mathcal{J} est le paramètre d'interaction entre spin, \mathbf{S}_i l'opérateur de spin, $\langle i,j \rangle$ la somme sur les proches voisins, et le produit scalaire est

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z$$

Le modèle décrit un matériau ferromagnétique (antiferromagnétique) pour $\mathcal{J} > 0$ (< 0) respectivement. L'hamiltonien d'Heisenberg [3] peut être généralisé à

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J}_x S_i^x S_j^x + \mathcal{J}_y S_i^y S_j^y + \mathcal{J}_z S_i^z S_j^z \quad (1.2)$$

Il est aussi connu comme *le modèle XYZ* (ou *le modèle XXZ* si $\mathcal{J}_x = \mathcal{J}_y \neq \mathcal{J}_z$). Un cas spécial $\mathcal{J}_z = 0, \mathcal{J}_x = \mathcal{J}_y$ est connu sous *le modèle XY*, qui a été utilisé

comme un modèle de réseau de l'hélium superfluide. Le modèle de Heisenberg a également d'intéressantes propriétés dynamiques, y compris les excitations collectives d'**ondes de spin**, qui déterminent la thermodynamique à basse température.

1.1.2 Modèle d'Ising

Le modèle d'Ising est défini sur un réseau régulier dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs ± 1 , représentant un spin up ou un spin down (figure 1.1). L'hamiltonien du système s'écrit

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - \mathcal{B} \sum_i s_i \quad (1.3)$$

où $\langle ij \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins, \mathcal{J} le paramètre d'interaction et \mathcal{B} est le champs magnétique extérieur.

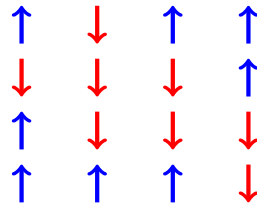


FIGURE 1.1 – Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches haut (bleu) et bas (rouge) représentent des spins positifs et négatifs respectivement

1.1.3 Modèle de Potts

On doit son introduction à *C.Domb*, qui au début des années 1950, proposa à son thésard *R.B.Potts* d'étudier une généralisation du modèle d'Ising où chaque spin peut être dans un nombre arbitraire d'états discrets.

Le modèle de Potts consiste en un ensemble de spin placés sur les différents sites du réseau pris comme un réseau triangulaire à 2D [7, 9, 21], mais rien n'empêche de considérer d'autres réseaux [31, 46, 48].

Pour chaque site, il existe q états. L'hamiltonien est donné par

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(S_i, S_j) \quad (1.4)$$

\mathcal{J} est le paramètre d'interaction, $S_i = 0, 1, \dots, q$ spécifie l'état du spin au i^e site et $\delta(S_i, S_j)$ est le δ -Kronecker où

$$\delta(S_i, S_j) = \begin{cases} 1 & \text{si } S_i = S_j \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

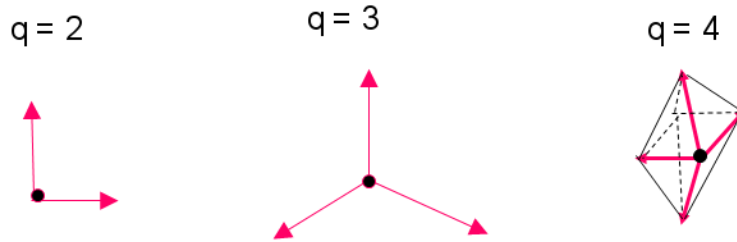


FIGURE 1.2 – Représentation du modèle de Potts pour différents états q

1.1.4 Modèle XY

Dans le modèle XY, les spins de longueur unité dans un réseau à deux dimensions peuvent tourner dans le plan du réseau. L'hamiltonien est décrit par la relation suivante :

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \quad (1.5)$$

où $\langle ij \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins. L'état de chaque spin est donné par son angle $\theta_i \in [0, 2\pi]$.

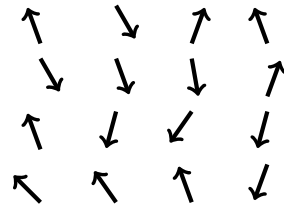
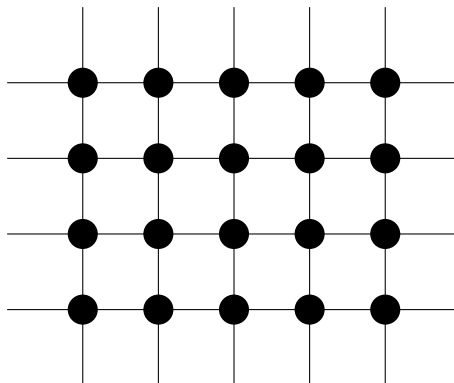


FIGURE 1.3 – Le modèle XY sur un réseau carré bidimensionnel

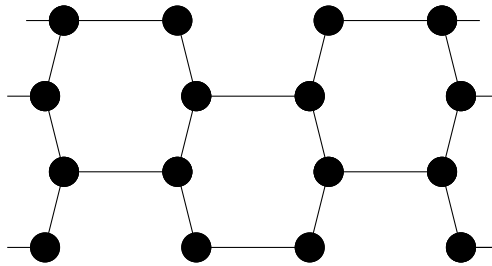
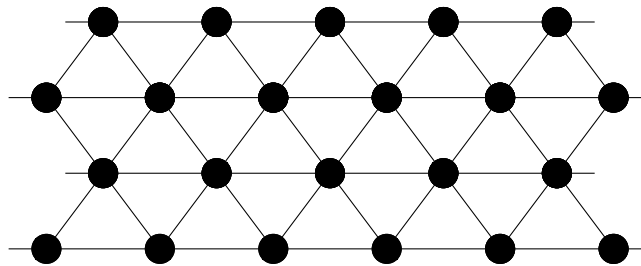
1.2 Géométrie des réseaux

Dans un système de spin, les spins doivent être localisés ou du moins reliés les uns aux autres afin de décider l'interaction entre eux. Cela peut se faire par un *réseau régulier* ; une structure de liens reliés à des sommets. L'exemple le plus simple de ce type de réseau est le réseau carré



L'analogie en 3D est le *réseau cubique* et en 4D est connu sous le nom de *réseau hypercubique*.

D'autres géométries sont utilisées dans les modèles de spin telles que le réseau de *nid d'abeille* (honeycomb lattice)

Le réseau *Triangulaire*

Un nœud du réseau (vertex) qui peut être occupé par un Spin est connu comme un *site*. La ligne joignant deux site est appelé un *lien* (en anglais *lattice bond*)

L'une des propriétés caractéristiques de la géométrie d'un réseau est le nombre de sites directement connectés à un site donné. Ce nombre est connu comme la *coordinnence* du réseau.

TABLE 1.1 – La coordinnence des différentes structures géométriques

Dimension	Réseau	Coordinnence
2	Nid d'abeille	3
2	Carré	4
2	Triangulaire	6
3	Diamant	4
3	Cubique	6
3	Tétraédrique	12
4	Hypercubique	8

La localisation des spins peut se faire sur des *réseaux irréguliers*, qui appa-

raissent dans une large variété de systèmes naturels, tels que les mousses ou les tissus biologiques [36].

Réseau de Voronoï-Delaunay

Le diagramme de Voronoï¹ est une décomposition particulière de l'espace euclidien défini en terme d'un ensemble donné discret de points (FIGURE 1.5).

Pour une meilleur compréhension du diagramme de Voronoï, commençons par une description assez intuitive [32]. Supposons qu'un ensemble de points, appelés *points générateurs*, est donné dans le plan euclidien (Les cercles pleins dans la FIGURE 1.4). Le nombre de points est supposé être deux ou plus, mais fini et ils sont tous distincts au sens qu'aucun point coïncide avec un autre dans le plan. On associe à chaque emplacement dans le plan le plus proche élément du point générateur (Dans la FIGURE 1.4, le point p est affecté à l'incident cercle plein p_1 avec une ligne brisée en gras). L'ensemble des emplacements affectés à chaque point générateur constitue sa *région* (zone ombrée de la FIGURE 1.4).

D'une manière mathématique, on considère un nombre fini n de points avec une position X_n dans un plan euclidien en assumant que $2 \leq n < \infty$. Les n points sont distincts dans le sens que $X_i \neq X_j$ pour $i \neq j, i, j \in I_n = \{1, \dots, n\}$. Soit $p(x, y)$ un point arbitraire du plan. La distance euclidienne $d(p, p_i)$ entre $p(x, y)$ et $p_i(x_i, y_i)$ est donnée par

$$d(p, p_i) = \| X - X_i \| = \sqrt{(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2}$$

On appelle région de Voronoï ou *cellule de Voronoï* associée à un élément p_i de l'ensemble des points qui sont plus proches de p que de tout autre point telque

$$V(p_i) = \{X \mid \| X - X_i \| \leq \| X - X_j \| \text{ pour } i \neq j, i, j \in I_n\} \quad (1.6)$$

1. aussi appelé Tessellation de Voronoï

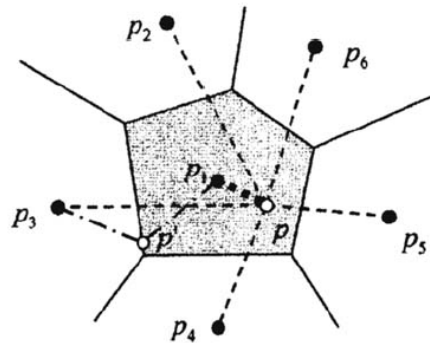


FIGURE 1.4 – Diagramme de Voronoï [32]

Étant donnée un diagramme de Voronoï où les points générateurs ne sont pas colinéaires et leur nombre est de trois ou plus, on les relie deux à deux de tel façons que les cellules voisines de Voronoï partagent la même arête. En conséquence, on obtient une seconde tessellation composée de triangles, on l'appelle *Triangulation de Delaunay*. La triangulation de Delaunay d'un ensemble discret p de points est le graphe *dual* du diagramme de Voronoï associé à p . A chaque cellule du diagramme de Voronoï est associé un sommet dans la triangulation de Delaunay. Ces sommets sont reliés entre eux par une arête si les cellules sont voisines. Les arêtes du diagramme de Voronoï sont sur les médiatrices des arêtes de la triangulation de Delaunay (FIGURE 1.5).

Il y a un autre moyen d'obtenir la tessellation de Delaunay : On construit un cercle à partir de 3 points du plan. S'il n'y a aucun point à l'intérieur du cercle, ces trois points définissent le triangle de Delaunay et on les relie par des segments. Le centre de chaque cercle représente le point générateur du diagramme de Voronoï.

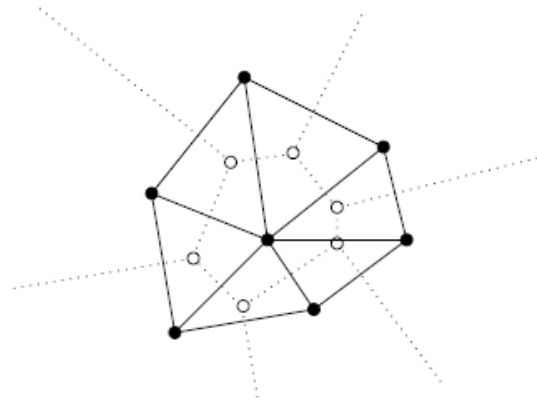


FIGURE 1.5 – Superposition d’un diagramme de Voronoï (en pointillés) et de sa triangulation de Delaunay (ligne continue) [35]

Si les points générateurs sont situés complètement au hasard sur un plan infini, le diagramme qui en résulte est connu sous le nom du *Réseau Poissonien de Voronoï-Delaunay*[32].

1.3 Transition de phase, Phénomènes critiques et Universalité

La transformation d’un liquide en gaz, d’un matériau conducteur en supraconducteur, d’un état fluide à un état superfluide ou le passage du ferromagnétisme au paramagnétisme sont des phénomènes que l’on dénomme *transition de phase*. Ce changement d’état physique ou de phase à un autre se produit de manière abrupte pour une valeur critique d’un paramètre intensif (température, pression, champ électrique, champ magnétique, ...). Les transitions de phase sont caractérisées par la discontinuité de certaines grandeurs qui en résultent.

On distingue deux manières de classer les transitions de phase. La première fut celle d’*Ehrenfest*, qui on distingue des transitions d’ordre n les transitions qui s’accompagnent de discontinuités dans les grandeurs physiques reliées aux

dérivées n^e du potentiel thermodynamique². Les exemples classiques de transition de 1^{er} ordre sont les transitions entre les trois états standards (solide, liquide, gaz). La transition hélium normal - hélium superfluide est du 2^e ordre.

En 1937, *Landau* proposa une autre classification des transitions de phases, basée sur le fait que certaines transitions (sans chaleur latente) s'accompagne d'un changement de symétrie du système. Ce qui a conduit *Landau* à introduire la notion de *paramètre d'ordre*, cette grandeur est nulle dans la phase la plus symétrique (haute température) et différente de zéro ailleurs. *Landau* proposa 2 catégories de transitions :

1. Les transitions sans paramètre d'ordre, se sont des transitions du premier ordre au sens d'*Ehrenfest*. Elles se traduisent aussi par un saut du paramètre d'ordre (discontinuité).
2. Les transitions avec paramètre d'ordre, correspondent à une continuité du paramètre d'ordre ainsi qu'à des discontinuités des dérivées des fonctions thermodynamiques. Dans ce dernier cas elles peuvent être du 2^e ordre si la dérivée seconde est discontinue, du 3^e ordre si la dérivée troisième est discontinue, *etc...* Ces transitions sont qualifiées de *transitions continues* ou de *phénomènes critiques*. C'est le comportement des propriétés thermodynamiques d'un système au voisinage de la transition de phase.

A l'approche du point critique (point de transition) T_c , la phase ordonnée a une stabilité comparable à celle de la phase désordonnée et il apparaît des zones localement ordonnées de taille ξ . Si la transition est du 2^e ordre au sens de *Landau*, ξ diverge quand $T \rightarrow T_c$. Le comportement des grandeurs physiques du système au voisinage du point critique T_c est représenté par une puissance de $|T - T_c|$. Ces puissances sont nommés *exposants critiques*. Ces exposants gouvernent le comportement au point critique de certaines grandeurs thermodynamiques.

2. énergie interne, énergie libre, enthalpie, enthalpie libre

La TABLE 1.2 résume les définitions des exposants critiques.

TABLE 1.2 – Définition et signification des exposants critiques

Exposant	Définition	Signification
α	$C_v(T) \sim T - T_c ^{-\alpha}$	Chaleur spécifique
β	$M(T) \sim T - T_c ^\beta$	Aimantation
γ	$\chi(T) \sim T - T_c ^{-\gamma}$	Susceptibilité
δ	$M(T_c, B) \sim B ^{1/\delta}$	Aimantation <i>vs</i> champ magnétique à T_c
ν	$\xi \sim T - T_c ^{-\nu}$	Longueur de corrélation
η	$g(R) \sim R^{-(d-2+\eta)}$	Fonction de corrélation (d dimensionnalité)

Ces exposants ne sont pas tous indépendants, ils sont reliés entre eux comme indiqué sur la table suivante :

TABLE 1.3 – Principales relations entre les exposants critiques

$$\begin{aligned}
 \alpha &= 2 - \nu d \\
 \beta &= 1/2\nu(d - 2 + \eta) \\
 \gamma &= \nu(2 - \eta) \\
 \delta &= d + 2 - \eta/d - 2 + \eta
 \end{aligned}$$

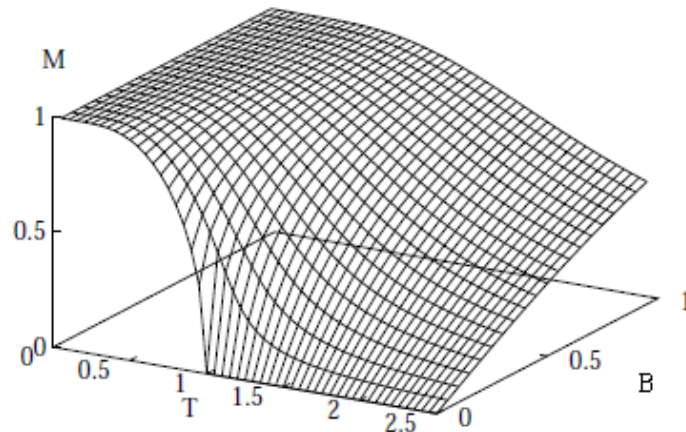


FIGURE 1.6 – Paramètre d'ordre vs. température et champ magnétique [37]

Les valeurs des coefficients ont un caractère *universel* : Les exposants critiques ne dépendent que la dimensionnalité n du paramètre d'ordre et de la dimensionnalité d de l'espace physique. Deux exposants suffisent à déterminer le système au voisinage de la transition. On a les relations

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

$$\beta(\delta - 1) = \gamma$$

TABLE 1.4 – Quelques modèles et leurs exposants critiques [41]

Modèles	α	β	γ	δ	ν	η
2D Ising	0	1/8	7/4	15	1	1/4
3D Ising	0.1	0.33	5/4	4.8	0.63	0.04
3D Heisenberg	-0.12	0.36	1.39	4.8	0.71	0.04
3D XY	0.01	0.34	1.3	4.8	0.66	0.04

1.4 Mise en échelle de taille finie en transition de phase du 2^e ordre

Les fonctions de mise en échelle sont utilisées afin d'extraire les valeurs des exposants critiques tout en observant comment les quantités mesurées varient selon les tailles de réseau. Les relations suivantes ne sont valables que près de la température critique :

$$M = L^{-\beta/\nu} \tilde{M}(x) \quad (1.7)$$

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \tilde{\chi}(x) \quad (1.8)$$

$$C_v = L^{\alpha/\nu} \tilde{C}_v(x) \quad (1.9)$$

$$\zeta = L^{-\nu} \tilde{\zeta}(x) \quad (1.10)$$

Où $(\tilde{M}, \tilde{\chi}, \tilde{C}_v, \tilde{\zeta})$ sont les fonctions d'échelle, avec

$$x = (T - T_c) L^{1/\nu} \quad (1.11)$$

A $T = T_c$, les fonctions de mise en échelle deviennent :

$$M = L^{-\beta/\nu} \quad (1.12)$$

$$\chi = L^{\gamma/\nu} \quad (1.13)$$

$$C_v = L^{\alpha/\nu} \quad (1.14)$$

$$\zeta = L^{-\nu} \quad (1.15)$$

Il est à noter que les fonctions de mise en échelle décrites précédemment ont aussi un aspect universel tel que les exposants critiques.

L'inconvénient de cette méthode est que nous avons besoin de connaître le point critique T_c avec une bonne précision. Pour une taille finie L , $T_c(L)$ s'écrit :

$$T_c(L) = T_c + aL^{-1/\nu} \quad a : \text{constante} \quad (1.16)$$

On possède 3 paramètres inconnus : T_c , a et ν . Pour cela nous avons besoin d'autant de données et une analyse attentive afin d'extraire la valeur de T_c ou celle de ν . Une méthode commode pour déterminer T_c et ν avec précision à partir des données du système de taille finie, est d'employer la méthode du cumulant de Binder [20] ou le facteur de Binder tout court :

$$U(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (1.17)$$

L'expression ci-dessus est valable pour un modèle de spin sans champ externe pour lequel tous les moments impairs disparaissent par symétrie (spin up et down). Pour un système de taille assez large ($L \rightarrow \infty$) et pour différentes températures, le facteur de Binder se comporte comme suit :

$$U(T, L) \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{pour } T > T_c; \\ 3/2 & \text{Pour } T < T_c. \end{cases}$$

La fonction de mise en échelle du facteur de Binder est :

$$U(T, L) = \tilde{U}(x) \quad (1.18)$$

On remarque qu'à $T = T_c$, $U(T_c, L) = \tilde{U}(0) = \text{constante}$, ce qui veut dire que le facteur de Binder n'a pas de dépendance d'échelle [51]. Donc toutes les courbes $U(T, L)$ en fonction de la température T pour différentes tailles de système L **intersectent** en un seul point T_c . Une fois qu'on a T_c , on peut estimer

ν a partir de la relation d'échelle de $U(T, L)$. Si on trace $U(T, L)$ pour différents T et L en fonction de x , les données vont s'effondrer sur une courbe unique dans la région de mise à l'échelle proche de T_c . Les autres exposants critiques peuvent être déterminés en utilisant la fonction de mise en échelle appropriée.

1.5 Système désordonné

Dans la nature, aucun système n'est parfait. Aucuns matériau réel n'est pure. Il contient des défauts généralement modélisés sous la forme d'interactions aléatoires (random bond) ou absente (bond diluted) ou des impuretés qui peuvent être soit magnétiques ou non magnétiques (diluted magnet). La présence d'un champ magnétique aléatoire est aussi considéré comme un type de désordre.

Le désordre peut avoir une grande variété de conséquences sur la physique des transitions de phase. Certaines transitions reste inchangées en présence du désordre alors que d'autre peuvent être complètement détruites. Pour une transition de phase du 2^e ordre, l'effet du désordre peut s'accompagner d'un changement ou pas de la classe d'universalité. Par exemple, un réseau élastique peut changer le caractère de la transition de phase (du 2^e ordre au 1^{er} ordre) sur les matériaux magnétiques [43]. Dans d'autre cas, le désordre peut faire tendre la température de transition de phase vers zéro voir même en éliminant la transition de phase.

Dans tous les cas de transition de phase, une distinction est a faire entre un **désordre recuit** (Annealed disorder) et un **désordre trempé** (Quenched disorder). Dans le premier cas, on considère un système magnétique de spin en présence d'impuretés. Ces derniers sont libre de se déplacer de leurs positions d'origine. le désordre est auto-induit et évolue avec les positions des spins.

Lorsque l'échelle de temps sur laquelle les interactions entre spin évoluent

beaucoup plus long que le temps de l'expérience (ils sont constants), le désordre est dit trempé. Se dernier peut être faible ou fort. Un système à liens aléatoire appartient à la 2^e catégorie et conduit à une phase très frustrée et désordonnée à basse température. Cette phase est largement considérée comme une phase gelée.

Dans ce type d'étude, la première question qui se pose est comment comment ce fait-il que la présence d'un faible désordre modifie la nature de la phase de transition. La réponse à cette question est donnée par le *critère d'Harris* [15]. L'exposant α de la chaleur spécifique joue le rôle de dimension d'échelle associée au désordre, de sorte que le comportement critique du système est inchangé si $\alpha < 0$, alors que le désordre intervient comme une perturbation pertinente si $\alpha > 0$. La présence d'impuretés tend à désordonner le système et à abaisser sa température critique.

Modèle d'Ising et percolation

Dans ce chapitre, nous allons poursuivre le développement de la solution du modèle d'Ising. Dans un premier temps, la solution exacte du modèle d'Ising unidimensionnel sur chaîne est proposée. Suivie par le modèle bidimensionnel sur un réseau carré. L'analogie entre le modèle d'Ising et la Percolation est abordée.

2.1 Modèle d'Ising à 1D

C'est le cas le plus simple. La fonction de partition est calculée avec exactitude par la méthode de la *matrice de transfert* [11]. On considère un réseau régulier (une chaîne) dont chaque site est défini par une variable scalaire de spin $s_i(\pm 1)$.

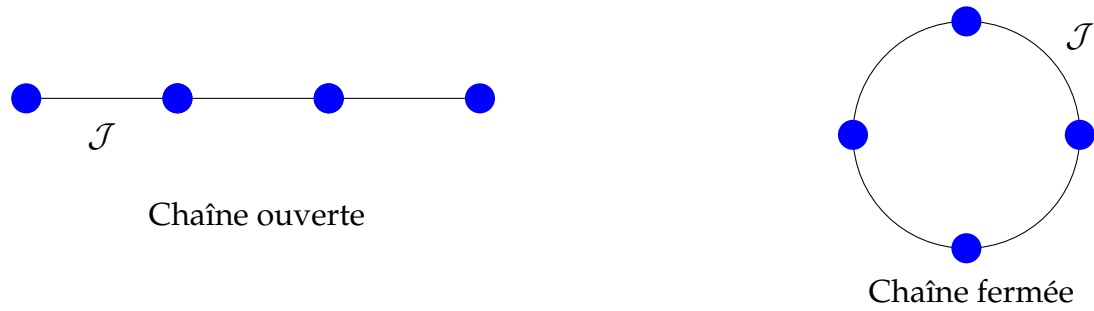


FIGURE 2.1 – Représentation graphique d'une chaîne du modèle d'Ising. Les cercles en bleu représentent les spins, et les traits sont les liens d'interactions \mathcal{J} entre eux.

L'hamiltonien d'une chaîne de N spins en présence d'un champ magnétique extérieur \mathcal{B} s'écrit :

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \mathcal{B} \sum_{i=1}^N s_i \quad (2.1)$$

ou \mathcal{J} est le terme d'interaction entre les spins voisins. Pour le cas d'une chaîne fermée, $s_{N+1} = s_1$ (conditions aux limites périodiques).

La fonction de partition canonique pour les 2^N termes est

$$\mathcal{Z} = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \exp \left[\beta \left(\mathcal{J} \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - \mathcal{B} \sum_{i=1}^N s_i \right) \right] \quad \beta = 1/k_B T \quad (2.2)$$

La fonction de partition \mathcal{Z} peut être reformulée sous la forme d'un produit de N matrices \mathcal{T} :

$$\mathcal{Z} = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} \langle s_1 | \mathcal{T} | s_2 \rangle \langle s_2 | \mathcal{T} | s_3 \rangle \dots \langle s_N | \mathcal{T} | s_{N+1} \rangle = \sum_{s_1} \langle s_1 | \mathcal{T}^N | s_1 \rangle \quad (2.3)$$

dont \mathcal{T} est la *matrice de transfert* [11]. C'est une matrice 2×2 dont chaque élément est un facteur de Boltzmann de l'énergie d'une paire de spins $\{(1,1), (1,-1), (-1,1), (-1,-1)\}$. Elle est donnée par :

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} \exp[\beta(\mathcal{J} + \mathcal{B})] & \exp(-\beta\mathcal{J}) \\ \exp(-\beta\mathcal{J}) & \exp[\beta(\mathcal{J} - \mathcal{B})] \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

La matrice \mathcal{T} peut être diagonalisable et les valeurs propres λ_1 et λ_2 sont les racines du déterminant

$$\det(\mathcal{T} - \lambda\mathcal{I}) = 0 \quad (2.5)$$

ou \mathcal{I} est la matrice identité. La trace de \mathcal{T}^N est la somme des valeurs propres

$$\text{tr} \mathcal{T}^N = \mathcal{Z} = \lambda_1^N + \lambda_2^N \quad (2.6)$$

La solution de l'équation 2.5 :

$$\lambda_{1,2} = \exp(\beta\mathcal{J}) \left[\cosh(\beta\mathcal{B}) \pm \sqrt{\sinh^2(\beta\mathcal{B}) + \exp(-4\beta\mathcal{J})} \right] \quad (2.7)$$

On note que $\lambda_1 > \lambda_2$. Pour un champ magnétique \mathcal{B} nul, λ_1 se réduit à $2\cosh(\beta\mathcal{J})$. L'aimantation par spin m vaut :

$$m = -\frac{1}{N} \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{B}} \quad (2.8)$$

\mathcal{F} est l'énergie libre :

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln \mathcal{Z} = -k_B T \ln(\lambda_1^N + \lambda_2^N) = -k_B T \left\{ N \ln \lambda_1 + \ln \left[1 + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^N \right] \right\} \quad (2.9)$$

A la limite thermodynamique, $N \rightarrow \infty$, \mathcal{F} s'exprime :

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln \lambda_1 = -k_B T \ln \left[\exp(\beta \mathcal{J}) \left[\cosh(\beta \mathcal{B}) + \sqrt{\sinh^2(\beta \mathcal{B}) + \exp(-4\beta \mathcal{J})} \right] \right] \quad (2.10)$$

En remplaçant la valeur de \mathcal{F} dans 2.8 et après développement, on trouve

$$m = \frac{\sinh(\beta \mathcal{B})}{\sqrt{\sinh^2(\beta \mathcal{B}) + \exp(-4\beta \mathcal{J})}} \quad (2.11)$$

Pour un $\mathcal{B} = 0$ il n'y a pas d'aimantation spontanée. Cela signifie qu'il n'y a pas de transition de phase à 1D.

Lorsque T s'approche de 0, $\mathcal{F} = -N\mathcal{J}$ ce qui correspond à l'alignement total des spins. On peut dire alors qu'il y a transition de phase à $T = 0$. Pour $T \neq 0$, l'énergie libre est une fonction analytique.

2.2 Modèle d'Ising à 2D

La solution exacte du modèle d'Ising bidimensionnel a été donnée pour la première fois par le norvégien américain chimiste *Lars Onsager* [6].

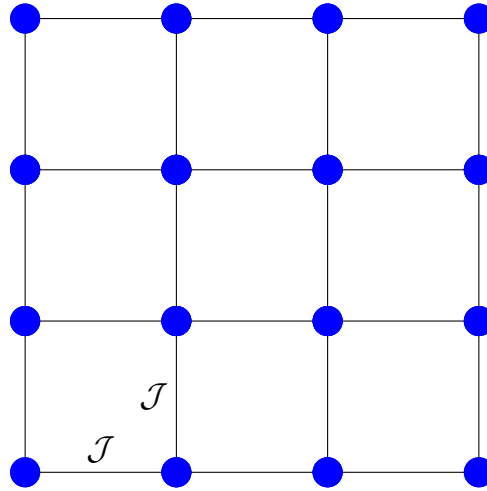


FIGURE 2.2 – Représentation graphique du modèle d'Ising sur un réseau carré. Les spins (cercle en bleu) sont reliés entre eux par le même facteur d'interaction \mathcal{J} (traits noir).

Considérons un réseau régulier carré (FIGURE 2.2) dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs ± 1 . Il est géré par l'hamiltonien :

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \mathcal{B} \sum_i s_i \quad (2.12)$$

ou $\langle i,j \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins, et \mathcal{J} le paramètre d'interaction.

La méthode de matrice de transfert telle qu'elle a été utilisée précédemment peut être facilement étendue au modèle à deux dimensions.

Chaque spin prend deux valeurs (± 1) (deux états, *up* et *down*), on aura donc 2^N états pour un réseau de N spins. La fonction de partition \mathcal{Z} s'écrit :

$$\mathcal{Z} = \sum_{s_i} \exp \left(-\frac{\mathcal{H}}{k_B T} \right) = \text{tr} \mathcal{T}^N \quad (2.13)$$

Le calcul du déterminant ainsi que les valeurs propres sont développés dans le livre de *Huang* [24]. La relation de l'énergie libre pour un champ nul ($\mathcal{B} = 0$)

s'écrit donc :

$$\mathcal{F} = -kT \ln [2 \cosh (2\beta \mathcal{J})] - \frac{kT}{2\pi} \int_0^\pi d\phi \ln \frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - K^2 \sin^2 \phi} \right) \quad (2.14)$$

avec

$$K = \frac{2}{\cosh(2\beta \mathcal{J}) \coth(2\beta \mathcal{J})}$$

Le système d'Ising sur un réseau carré présente une transition de phase à $T = T_c$ (température critique), et en absence d'un champ magnétique ($\mathcal{B} = 0$) :

$$T_c = \frac{2\mathcal{J}}{k_B \ln(1 + \sqrt{2})} \approx \frac{2.269185\mathcal{J}}{k_B} \quad (2.15)$$

L'aimantation spontanée calculée par [13] vaut :

$$m = \begin{cases} \left[1 - \frac{(1 - \tanh^2(\beta \mathcal{J}))^4}{16 \tanh^4(\beta \mathcal{J})} \right]^{1/8} & T < T_c \\ 0 & T > T_c \end{cases} \quad (2.16)$$

Au delà de la température critique T_c , l'aimantation s'annule brutalement. Lorsque $T \rightarrow T_c$, l'aimantation varie comme

$$m \sim (T_c - T)^\beta \equiv (T_c - T)^{1/8} \quad (2.17)$$

La susceptibilité magnétique χ diverge quand $T \rightarrow T_c$

$$\chi \sim (T_c - T)^{-\gamma} \equiv (T_c - T)^{-7/4} \quad (2.18)$$

La chaleur spécifique (capacité calorifique) C_v aussi présente un comportement différent. Elle diverge de façon logarithmique à T_c

$$C_v \sim -\ln(T_c - T) \quad (2.19)$$

TABLE 2.1 – Les exposants critiques du modèle d'Ising a proximité du point critique résolu exactement en 2D et numériquement en 3D.

Dimension	α	β	γ
2D	0	1/8	7/4
3D	0.11	0.32	1.24

2.3 Percolation et transition de phase

Le concept de la percolation fût introduit par le mathématicien *J.M. Hammersley* en 1956 [12]. Ce dernier cherchait à étudier le passage du gaz à travers les masques à gaz des soldats. Le terme percolation reflète le percolateur d'une machine à café qui est également un filtre au sein duquel l'eau traverse. On parle plus généralement de percolation lors de la traversée d'un solide poreux par un fluide. La percolation a trouvé pleins de champ d'application et dépasse largement le domaine de la physique. Elle permet de décrire les phénomènes biologiques, sociologiques et économiques.

La percolation est un processus physique critique qui décrit pour un système, une transition d'un état vers un autre. Ceci correspond au *seuil de percolation*. A ce stade, le système est instable et divergeant. Il existe deux types de percolations : *Percolation de lien et de site*.

Percolation de site Un ensemble d'éléments (sites) appartenant à un système sont reliés entre eux par des liens, la variation d'activité des sites entraîne la formation d'une structure Aléatoire appropriée, la transmission d'information

dépend entièrement de cette Structure. Lorsqu'un nombre fini de sites actifs sont reliés entre eux par des liens, on dit qu'ils forment un *amas finis*.

La probabilité pour qu'un site soit actif est proportionnelle à p et celle pour laquelle il est inactif correspond à q , de telle manière que $q = 1-p$.

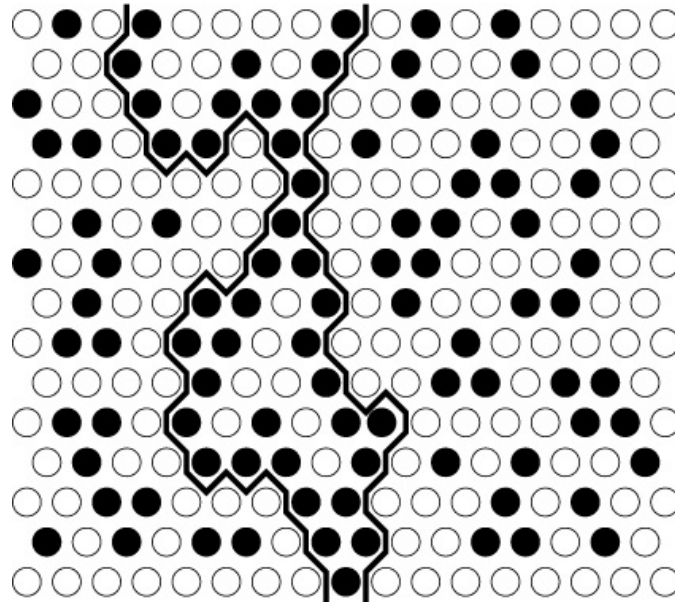
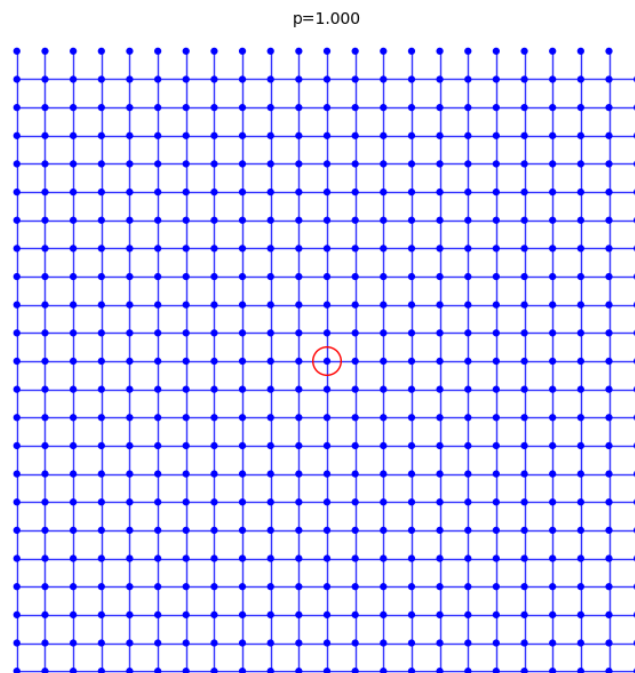
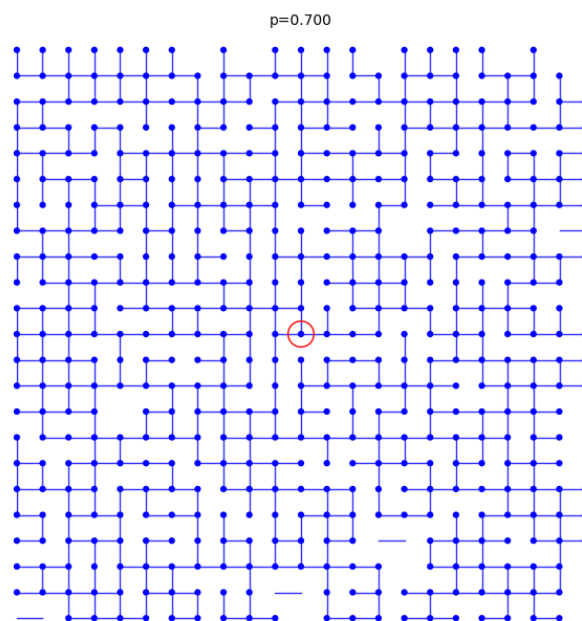
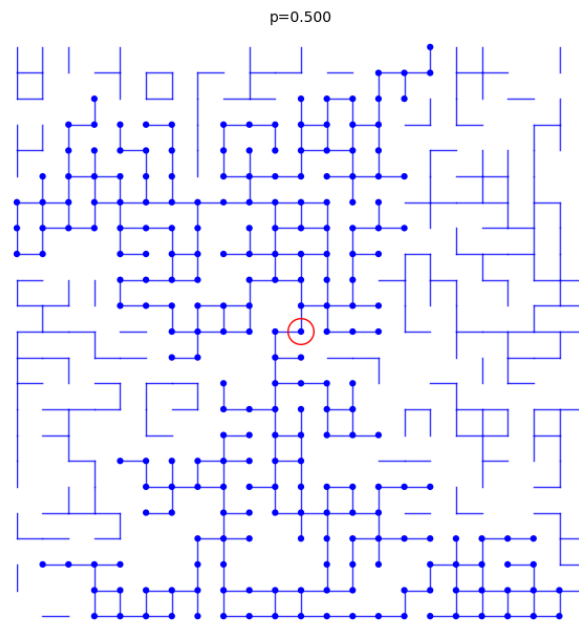


FIGURE 2.3 – Percolation des sites pour $p = 0.5$

Percolation de lien Pour assurer le passage de l'information dans le système, il faut qu'une suite de sites connectés entre eux par des liens intègres existe. La probabilité pour qu'un lien soit actif est noté p , et pour laquelle un lien est coupé est q avec $q = 1-p$.

FIGURE 2.4 – Percolation des liens pour $p = 1$ FIGURE 2.5 – Percolation des liens pour $p = 0.7$

FIGURE 2.6 – Percolation des liens pour $p = 0.5$

On définit le *seuil de percolation* p_c comme étant la valeur critique de p au point où il y a une première connexion d'un bout à l'autre du système. Pour $p < p_c$, aucune connexion continue n'existe. Pour $p > p_c$, il existe au moins une connexion continue d'une part à l'autre du système.

Notons que la valeur du seuil de percolation dépend de la dimension de l'espace et de la géométrie du réseau, la valeur du seuil ne dépend pas de l'aspect physique des sites ou des liens occupés. Ce qui donne à la théorie de percolation un aspect universel [39].

Dans un échantillon fini comportant N sites, on définit quelques grandeurs fondamentales comme :

Le nombre moyen d'amas n_s de taille s par site

$$\frac{\text{nombre total d'amas de taille } s}{N} \quad (2.20)$$

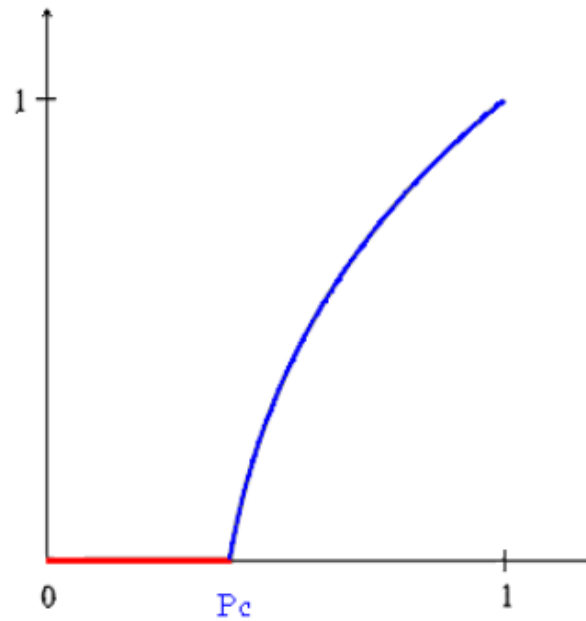


FIGURE 2.7 – La probabilité de percolation

TABLE 2.2 – Valeurs de p_c pour différents réseaux à 2 et 3 dimensions.

Dimension	Réseau	Site	Lien
2	Nid d'abeille	0.6962	0.65271
2	Carré	0.59275	0.5*
2	Triangulaire	0.5*	0.34719
3	Diamant	0.428	0.38
3	Cubique simple	0.317	0.1492
3	Cubique centré	0.245	0.1787
3	Cubique à face centrée	0.198	0.199

* valeur exacte

La probabilité d'appartenir à l'amas infini P_∞

$$\frac{\text{nombre de sites de l'amas infini}}{\text{nombre de sites actifs}} \quad (2.21)$$

Selon la même logique que pour l'amas infini, il est possible de calculer la probabilité d'appartenir à un amas fini dans un échantillon :

$$\frac{\text{nombre de sites en amas fini}}{\text{nombre total de sites actifs ou non}} \quad (2.22)$$

La taille moyenne des amas finis La probabilité qu'un site quelconque appartienne à un amas de taille s est sn_s , et celle qu'il fasse partie de n'importe quel amas fini est $\sum sn_s$. Soit w_s la probabilité que l'amas auquel s appartient à un site actif arbitraire :

$$w_s = \frac{sn_s}{\sum sn_s} \quad (2.23)$$

De là, la taille moyenne des amas finis se calcule telle que :

$$s = \sum w_s s = \frac{s^2 n_s}{\sum sn_s} \quad (2.24)$$

Cette définition du nombre moyen de sites par amas fini reste valable à la condition que l'amas infini, s'il existe, soit exclu de la somme. La taille moyenne des amas finis $S(p)$ devient donc :

$$S(p) = \begin{cases} \frac{\sum s^2 n_s}{p(1-P_\infty(p))} & \text{si } p > p_c \\ \frac{s^2 n_s}{p} & \text{si } p < p_c \end{cases} \quad (2.25)$$

Longueur de corrélation La fonction de corrélation est définie par

$$\Gamma(\vec{r}) = \sum_i (\langle (\vec{r}_i + \vec{r}) \cdot \vec{r}_i \rangle - \langle \vec{r}_i + \vec{r} \rangle \cdot \langle \vec{r}_i \rangle) \quad (2.26)$$

La longueur de corrélation (ξ) est définie par la probabilité $g(r)$ de trouver à une distance r d'un point de l'amas un autre point appartenant également à cet amas. La probabilité $g(r)$ suit le comportement

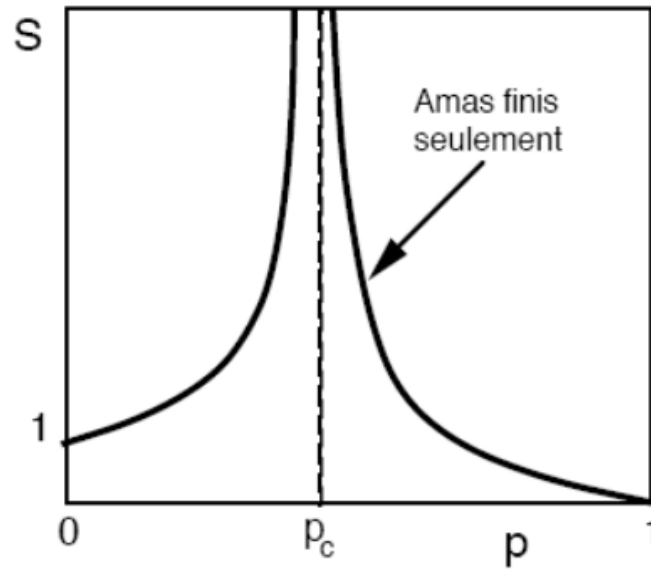


FIGURE 2.8 – Taille moyenne des amas finis de la percolation [30]

$$g(r) \sim \exp(-r/\bar{\zeta}) \quad \text{pour } p < p_c \quad (2.27)$$

Au voisinage de p_c , l'insensibilité du comportement des grandeurs caractéristiques d'un problème de percolation aux détails microscopiques de la structure sur lequel il évolue, se résume dans les relations appelées *lois d'échelle*. Celles-ci concernent principalement $\bar{\zeta}(p)$, $P_\infty(p)$, $S(p)$ et $n_s(p)$. Au voisinage de p_c c'est-à-dire lorsque $(p - p_c)$ est faible, les grandeurs varient :

$$\bar{\zeta}(p) \sim |p - p_c|^{-\nu} \quad (2.28)$$

$$P_\infty(p) \sim (p - p_c)^\beta \quad (2.29)$$

$$S(p) \sim (p - p_c)^{-\gamma} \quad (2.30)$$

$$\sum n_s(p) \sim |p - p_c|^{2-\alpha} \quad (2.31)$$

La question qui se pose est de savoir si la transition de phase dans le modèle d'Ising est une sorte de transition de percolation ?

Si on veut caractériser la transition de phase du modèle d'Ising d'une manière géométrique (avec des amas), on doit construire des amas de telle manière à faire coïncider le seuil de percolation avec la température critique du modèle d'Ising. Plusieurs définitions des amas ont été proposées par *Coniglio et Klein* [19]. Ils ont montré que des liens doivent être placés entre les plus proches voisins de même orientation avec une probabilité

$$p_b = 1 - \exp(-2\mathcal{J}/k_B T) \quad (2.32)$$

Le système de spins peut être divisé en des amas formés de spins parallèles connectés par des liens, qui percolent à la température critique. Avec ce choix particulier de p_b , et en utilisant le formalisme de *Fortuin et Kasteleyn* [14], les relations suivantes peuvent être prouver [28] :

$$m = P_\infty; \quad \chi = S(p) \quad (T \geq T_c) \quad (2.33)$$

La transition géométrique d'un système de percolation a de nombreuses caractéristiques en commun avec les transitions de phase thermiques. Nous résumons ici les plus importants :

- Au voisinage du point critique, la percolation ainsi que les grandeurs thermiques varient selon les lois de puissance :

$$\begin{aligned} P &\propto (p - p_c)^\beta, & S &\propto |p - p_c|^{-\gamma} && \text{pour } p > p_c; \\ M &\propto (T_c - T)^\beta, & \chi &\propto |T_c - T|^{-\gamma} && \text{Pour } T < T_c. \end{aligned}$$

- Les simples relations d'échelle sont valides comme la relation d'hyperscaling

$$d = \frac{\gamma}{\nu} + 2\frac{\beta}{\nu}$$

ou d représente la dimension du système.

- L'universalité des exposants critiques.

Dans le cas des domaines magnétiques du Fer, par exemple, on observe qu'ils se développent en abaissant la température de l'échantillon jusqu'à ce qu'ils fusionnent dans des structures macroscopiques au-dessous du point de Curie. On pourrait se demander si le comportement critique d'un système peut être décrit en termes de propriétés de certains amas. La croissance des corrélations approchant le point critique sera représentée par la croissance de la taille des amas. En outre, l'ordre spontané apparaît en dessous de la température critique T_c , pourrait être liée à la formation d'un amas infini, ce qui serait la carte de la transition thermique à une transition de percolation géométrique.

Simulation de la transition de phase 2^e ordre

Le présent chapitre décrit la méthode de simulation employée pour la résolution du modèle d'Ising. Une illustration détaillée de l'algorithme de MC Metropolis appliquée au modèle d'Ising est proposée. Suivie par les différents résultats des grandeurs thermodynamiques.

3.1 Introduction

Tout système physique subissant des changements est régi par un hamiltonien \mathcal{H} , qui donne l'énergie totale du système dans n'importe quel état. L'espace de phase (*space phase*) du système est l'ensemble de toutes les valeurs possibles du spin (± 1). Pour un système 10×10 spins sur un réseau carré, il y a 2^{100} états dans l'espace de phase.

La mesure d'une quantité thermodynamique peut se faire par un échantillonnage aléatoire de l'espace de phase. À haute température, les états désordonnés (différentes orientations des spins) sont beaucoup plus importants que les états ordonnés (même orientation des spins).

Un concept important en thermodynamique est celui de l'*équilibre thermodynamique*. Un système en équilibre thermodynamique ne subit aucun changement de ses propriétés, à savoir la masse, l'énergie, l'aimantation, ...

Pour obtenir une mesure réaliste d'une quantité thermodynamique, il faut échantillonner l'espace de phase de telle sorte que la probabilité de sélectionner un état est la même que l'état survenant lorsque le système est en équilibre.

On va utiliser la notion de *séquence d'état* ou *trajectoire* dans un espace de phase qui est analogue à l'évolution temporelle d'un système réel.

Un système de spins commence par un certain état initial et évolue selon un algorithme donné qui va générer des états successives à partir de n'importe quel état de la séquence d'état. En même temps, on mesure les grandeurs thermodynamiques souhaitées. Lorsque le système de spins atteint le point où la grandeur est stable, on dit que le système est en équilibre. Par la suite, on mesure les propriétés du système à l'équilibre en prenant la moyenne des grandeurs mesurées durant chaque état.

La probabilité d'occupation d'un état i lors d'un équilibre thermodynamique

est nommée *probabilité de Boltzmann*, donnée sous cette forme

$$p_i = \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}\right) \quad (3.1)$$

Où \mathcal{Z} est la *fonction de partition* exprimée par cette relation :

$$\mathcal{Z} = \sum_{S_i} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}\right) \quad (3.2)$$

avec k_B est la la constante de *Boltzmann* ($1.38 \cdot 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$).

Si l'on considère le calcul de la fonction de partition, qui représente l'élément essentiel pour le calcul des différentes grandeurs thermodynamiques d'un système, on se doit d'effectuer une sommation sur un grand nombre d'états (2^N , N est le nombre de spins du système) et la tâche devient difficile, d'où l'impossibilité de trouver une expression analytique exacte pour la fonction de partition. En l'absence de telles solutions exactes, on a recours à des techniques approximatives telle que la méthode de *Monte Carlo-Metropolis*

3.2 Algorithme de MC Metropolis

La méthode de *Monte Carlo-Metropolis* (MC Metropolis), très répandue en physique de la matière condensée, a été introduite par *Metropolis et al* en 1953 [10]. Basée sur l'utilisation de *nombres aléatoires*, elle repose sur la génération d'une séquence aléatoire d'états accessibles dans un système en utilisant le processus de *Markov* ; qui permet de générer un état ν du système à partir d'un autre état μ connu. La séquence d'états générés se déroule durant un *temps Monte Carlo* qui n'a aucun rapport avec le temps réel du système. L'état généré n'est pas toujours le même, il parcourt le système à la recherche de nouveaux

états avec une *probabilité de transition* $P(\mu \rightarrow \nu)$ [34], tel que :

$$P(\mu \rightarrow \nu) = \exp(-\beta\Delta E) \quad \Delta E = E_\nu - E_\mu, \quad \beta = \frac{1}{k_B T} \quad (3.3)$$

Pour un véritable processus de Markov, toutes les probabilités de transition doivent satisfaire à deux conditions [34] :

1. Une invariance dans le temps ;
2. Une dépendance unique des propriétés des états actuels ν et μ du système ;

En plus de ces conditions, la probabilité de transition doit vérifier cette relation :

$$\sum_\nu P(\mu \rightarrow \nu) = 1 \quad (3.4)$$

Le processus de Markov se répète pour générer la chaîne de Markov de nouveaux états. Il faut s'assurer qu'après un certain temps, ce processus finira par produire une succession d'états avec des probabilités données de Boltzmann. Pour cela, deux autres conditions sont imposées :

1. **Ergodicité** : c'est la possibilité d'atteindre n'importe quel état du système à partir d'un autre. Autrement dit, il faut que le nombre de déplacement acceptés quittant l'état μ doit être exactement égal au nombre de déplacement conduisant à l'état μ à partir de tous les autres états ν .
2. **Microréversibilité** : A l'équilibre, il faut que la probabilité de passage de μ vers ν soit la même que celle de passer de ν à μ , sinon on risquerait de rester piégé dans une région. C'est le principe du *bilan détaillé* (*detailed balance*).

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu) \quad (3.5)$$

La génération d'un état ν à partir d'un état initiale μ se fait par un *reverse-*

ment (*flip*) de différents spins dans le réseau. A vrai dire, le système réel passe le plus de temps dans un sous état avec un étroit intervalle d'énergie et fait rarement des transitions qui change l'énergie du système d'une manière spectaculaire [34]. Cela veut dire que pour réduire le temps de la simulation, on ne prend en considération que le flip d'un **spin unique**. On considère deux états μ et ν avec leurs énergies respectives E_μ et E_ν . Pour sélectionner un nouvel état qui possède une énergie inférieure au présent état, on doit toujours accepter cette transition. Par contre, s'il possède une énergie élevée on peut l'accepter, mais avec une certaine probabilité P . Le processus continu jusqu'à parcourir tout le système.

Une fois celle-ci vérifiée, on entreprend notre simulation en générant un nouvel état ν à partir d'un état μ par le biais d'un flip d'un seul spin S_m . Après cela, on calcule la différence d'énergie ΔE entre les deux états :

$$\Delta E = E_\nu - E_\mu = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J}(r) S_i^\nu S_j^\nu - \mathcal{B} \sum_i S_i^\nu + \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J}(r) S_i^\mu S_j^\mu + \mathcal{B} \sum_i S_i^\mu$$

avec S_i^ν et S_i^μ représentent respectivement le spin de l'état ν et μ . Après le calcul mentionné dans [34], on trouve l'expression simplifiée de ΔE indiquée comme suit

$$E_\nu - E_\mu = 2S_m^\mu \sum_i \mathcal{J}(r) S_i^\mu + 2\mathcal{B}S_m^\mu \quad (3.6)$$

Si ΔE est inférieure ou égale à 0, on accepte le transfert et on flip $S_m \rightarrow -S_m$. Par contre si ΔE est supérieure à 0, on flip avec une probabilité $P(\mu \rightarrow \nu)$. Cette dernière se trouve comparée à un nombre aléatoire w qui prend les valeurs entre 0 et 1. Si ce nombre est inférieur ou égal à la probabilité de transition, on effectue un flip, sinon le spin reste inchangé. Cette procédure est à répéter

sur tout le système à des différents intervalles de température (de la haute à la basse température) jusqu'à atteindre un intervalle où l'énergie se stabilise. Cette boucle est ce qu'on appelle un *cycle de Monte Carlo*. À la fin, la grandeur physique calculée est divisée par le nombre totale de cycles [40] et on obtient la valeur moyenne de cette grandeur. Cet algorithme est connu sous le nom de **single spin flip**.

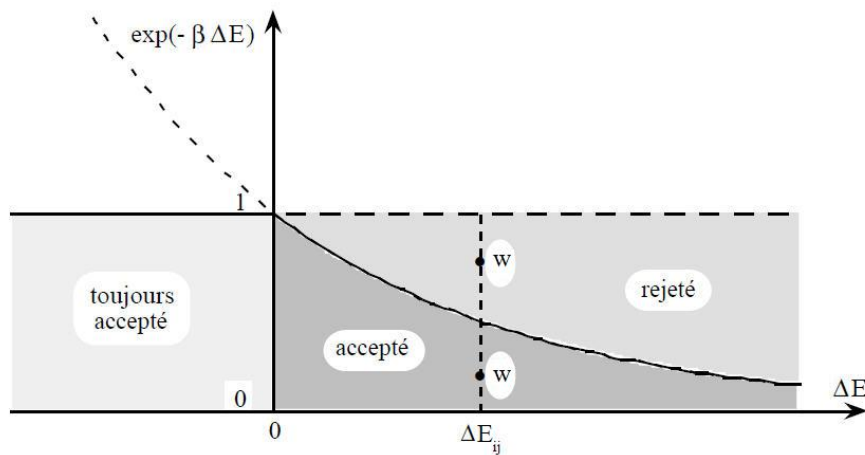


FIGURE 3.1 – Interprétation graphique de l'algorithme de MC Metropolis [38]

L'**algorithme 1** récapitule les différentes étapes vues précédemment.

Algorithm 1 : Algorithme de MC Metropolis

1. On part d'une configuration initiale (spins répartis aléatoirement)
2. On choisit un spin m au hasard et on considère son renversement $S_m \rightarrow -S_m$
3. On calcul la variation d'énergie ΔE correspondante
4. **if** $\Delta E \leq 0$ **then**
5. On accepte le renversement
6. **end if**
7. **if** $\Delta E > 0$ **then**
8. On accepte avec une probabilité $P = \exp(-\beta\Delta E)$
9. on tire un nombre aléatoire w entre 0 et 1
10. **if** $w \leq P$ **then**
11. on accepte
12. **else**
13. on refuse
14. **end if**
15. **end if**
16. Retour à l'étape 2

Dans ce qui suit, on s'intéressera à l'étude du modèle d'Ising en 2D.

3.3 Étude du Modèle d'Ising régulier en 2D

Le modèle d'Ising est l'un des modèles les plus simples et les plus étudiés en physique statistique. La méthode de MC-Metropolis est utilisée pour investiguer les propriétés de ce modèle. on prend un réseau carré avec des spins placés sur différents site du réseau. Chaque spin (s_i) peut prendre deux valeur ± 1 . Pour un réseau de N spins, le système possède 2^N états. L'hamiltonien du système en absence d'un champ magnétique externe s'écrit

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j \quad (3.7)$$

où \mathcal{J} est l'énergie d'interaction entre les plus proches voisins $\langle ij \rangle$.

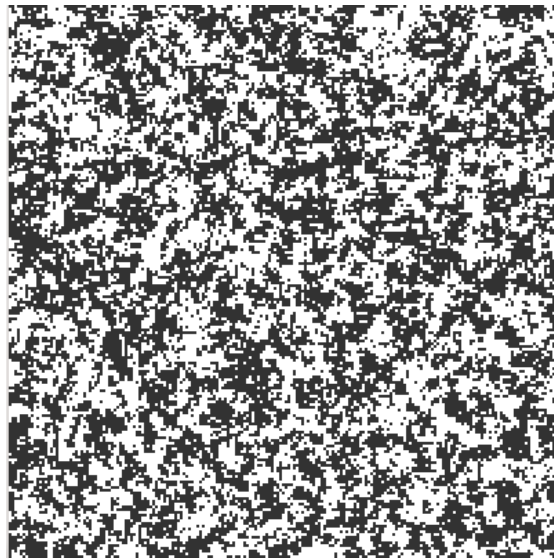


FIGURE 3.2 – Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 3.0\beta$.

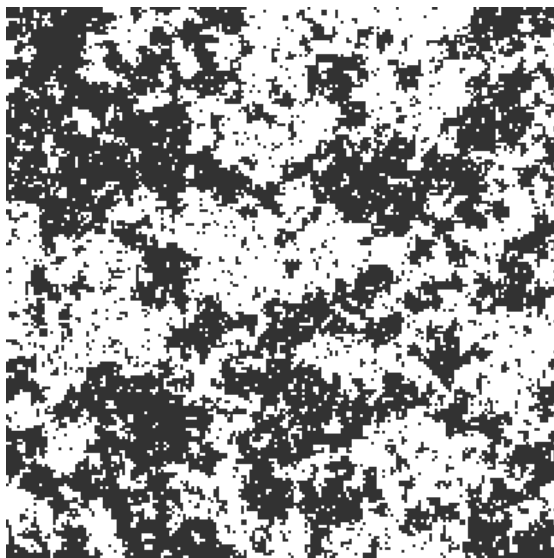


FIGURE 3.3 – Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 2.4\beta$.

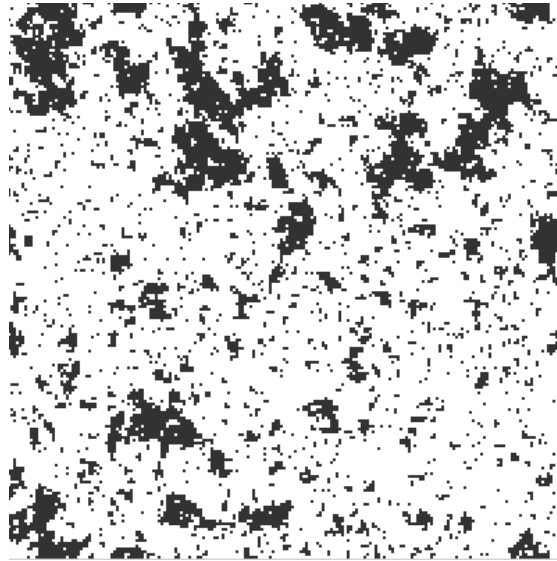


FIGURE 3.4 – Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 2.269\beta$.

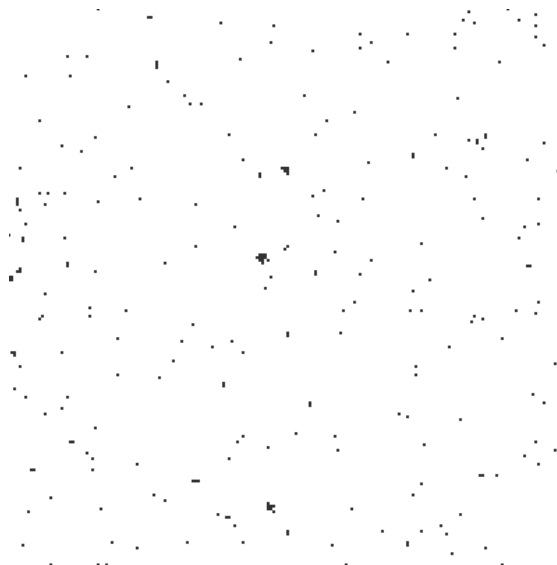


FIGURE 3.5 – Aperçu de l'état de système de spin 100×100 , en équilibre thermodynamique, pour $T = 1.5\beta$.

3.3.1 Analyse des données

On s'intéresse au calcul des grandeurs thermodynamiques telles que l'énergie moyenne $\langle E \rangle$, la capacité calorifique $C_v(T)$, l'aimantation moyenne $\langle M \rangle$, la susceptibilité magnétique $\chi(T)$ définies comme suit

$$\langle M \rangle = \left\langle \sum_i s_i \right\rangle \quad (3.8)$$

$$C_v(T, L) = \frac{\beta}{T} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (3.9)$$

$$\chi(T, L) = \beta (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2) \quad (3.10)$$

avec $\langle E \rangle$ et $\langle M \rangle$ représente l'énergie moyenne et l'aimantation moyenne respectivement.

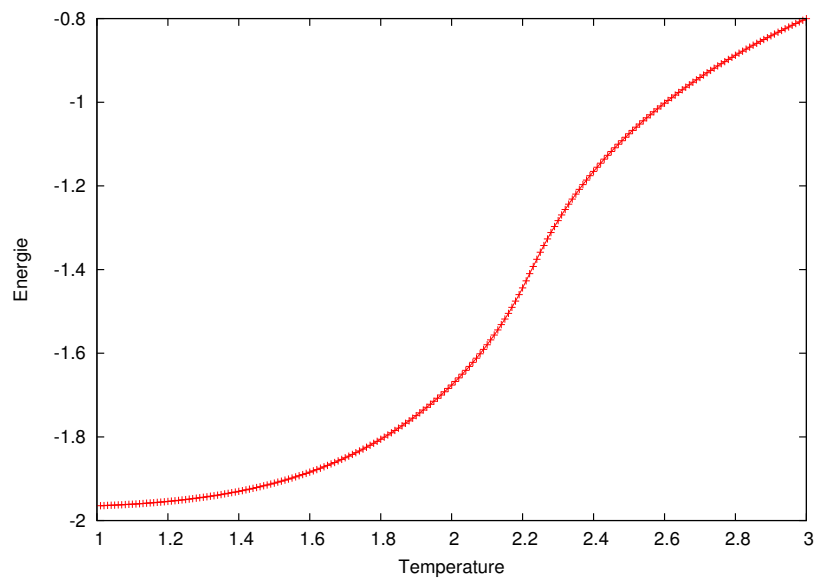


FIGURE 3.6 – Représentation de l'énergie moyenne $[\mathcal{J}]$ en fonction de la température $[\beta]$.

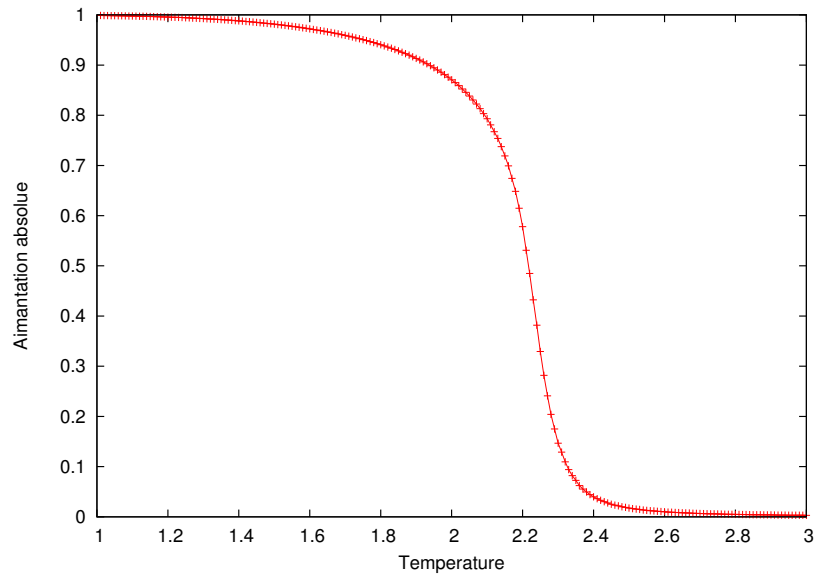


FIGURE 3.7 – Représentation de l'aimantation absolue en fonction de la température $[\beta]$.

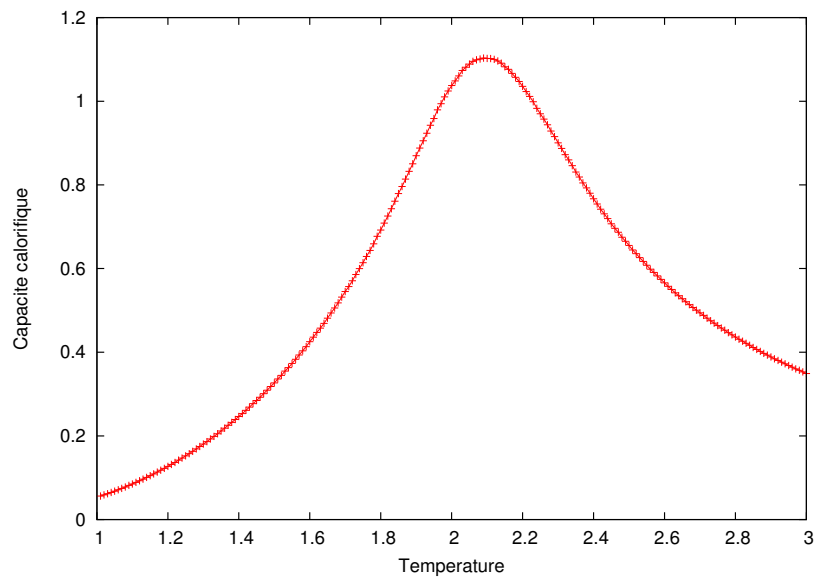


FIGURE 3.8 – Représentation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$.

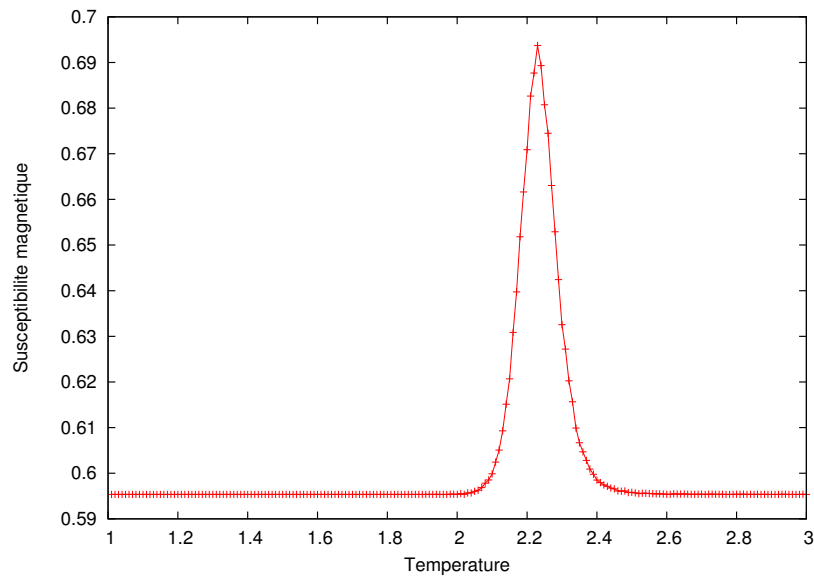


FIGURE 3.9 – Représentation de la susceptibilité magnétique en fonction de la température $[\beta]$.

La simulation est faite pour un système de spin 32×32 pour différentes températures entre $T = 1.0\beta$ et $T = 3.0\beta$ avec $\mathcal{J} = 1$. Le programme tourne pour 100000 Monte Carlo step (mcs) par spin. La moyennisation est sur les 10000 mcs/spin et par suite les grandeurs thermodynamiques sont calculées. Le programme commence par la génération d'un état de spin aléatoire et la simulation est effectuée dans un intervalle de température allant de $T = 1.0\beta$ à $T = 3.0\beta$. Les résultats sont présentés dans les FIGURES 3.6, 3.7, 3.8, 3.9. En récupérant les résultats depuis plusieurs simulations à différentes températures, on a constaté que le temps de l'équilibre thermodynamique à chaque température ne dépasse pas les 1000 mcs/spin, à l'exception des températures appartenant à l'intervalle $[2.1 - 2.8]\beta$ qui nécessite un temps beaucoup plus grand.

Si on regarde par exemple la FIGURE 3.7, on remarque qu'il y a un point d'inflexion aux alentours de $T = 2.3\beta$. L'aimantation pour les hautes températures est nulle vu que tous les spins sont orientés aléatoirement. Par contre, pour les

basses températures, le système de spins s'oriente dans une seule direction, ce qui va donner une aimantation qui tend vers 1 à $T = 0$. Ce changement est appelé *Transition de phase*, caractérisé par une température de transition de phase T_c , qui dans notre cas est égale à

$$T_c = \frac{2\mathcal{J}}{\ln(1 + \sqrt{2})} \approx 2.269 \mathcal{J} \quad (3.11)$$

Au-dessus de cette température, le système est en phase *paramagnétique*, dont l'aimantation moyenne est nulle. En dessous, le système est en phase *ferromagnétique* et une aimantation spontanée est observée.

Il y a plusieurs manières pour déterminer la valeur de la température de transition T_c . La méthode la plus courante est celle du *facteur de Binder* (Binder cumulant) [20] définit comme suit :

$$U(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (3.12)$$

Avec $\langle M^2 \rangle$ et $\langle M^4 \rangle$ la moyenne du carré de l'aimantation et de l'aimantation à la puissance quatre respectivement. Dans le modèle d'Ising, le cumulé $U(T, L)$ s'approche, dans la limite thermodynamique, de la la valeur de 2/3 pour une température $T < T_c$. Il tend vers 0 pour $T > T_c$.

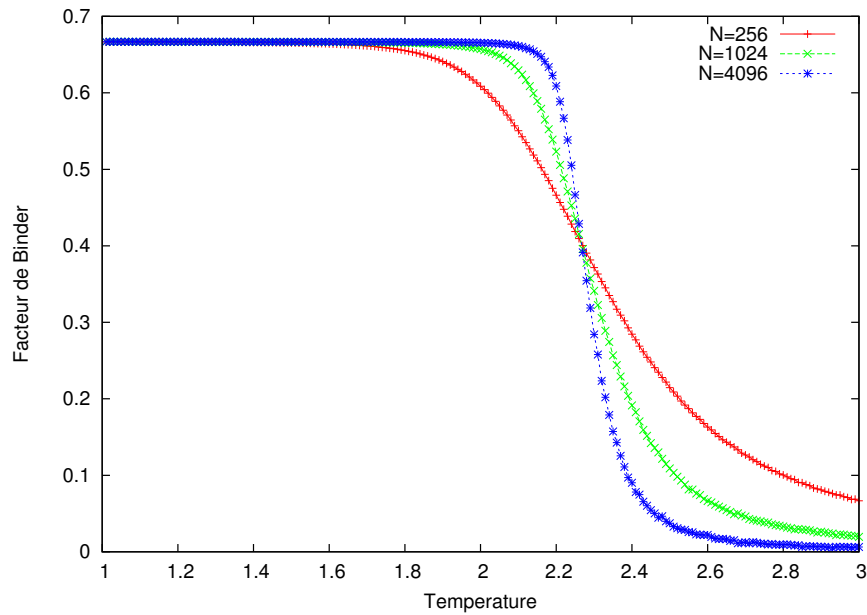


FIGURE 3.10 – Variation du facteur de Binder en fonction de la température pour différentes tailles du système.

Pratiquement, si l'on trace le facteur de Binder en fonction de la température (FIGURE 3.10), les courbes $U(T, L)$ se coupent en une même abscisse, ce qui permet de déterminer la température critique T_c du système.

Une autre méthode beaucoup plus simple consiste à déterminer la valeur du pic de la capacité calorifique $C_v(max)$ et par la suite la projeter sur l'axe des abscisses (température) pour déterminer la valeur de T_c .

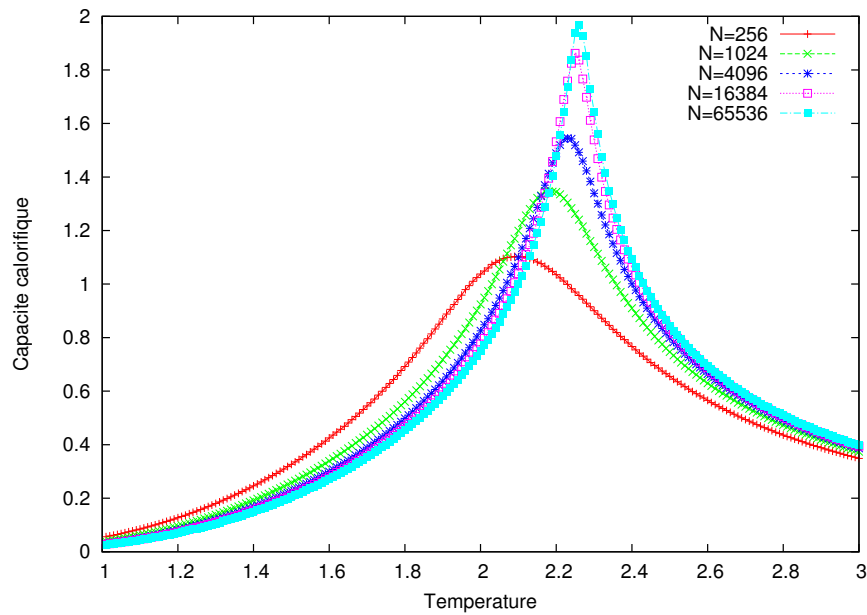


FIGURE 3.11 – Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différentes tailles du système.

En augmentant la taille du système, la courbe de la capacité calorifique devient de plus en plus pointue (FIGURE 3.11).

TABLE 3.1 – Valeurs de $C_v(max)$ et de la température critique T_c pour différentes Tailles du système.

L	$C_v(max)[\mathcal{J}/K_B^2]$	$T_c[\beta]$
256	1.0993	2.0990
1024	1.3431	2.1841
4096	1.5438	2.2306
16384	1.8641	2.2522
65536	1.9654	2.2599

La valeur de T_c déterminée par la méthode du facteur de Binder et celle du $C_v max$ pour $L = 4096$ ne sont pas les mêmes. plus la taille augmente, plus la valeur du T_c tend vers la valeur trouvée par la méthode du facteur de Binder (TABLE 3.1).

L'étude de la variation de la quantité mesurée en fonction de la taille du système est faite par l'analyse d'échelle à taille finie [29]. La (FIGURE 3.12) illustre la variation de $\log(C_v(max))$ en fonction de $\log(L)$.

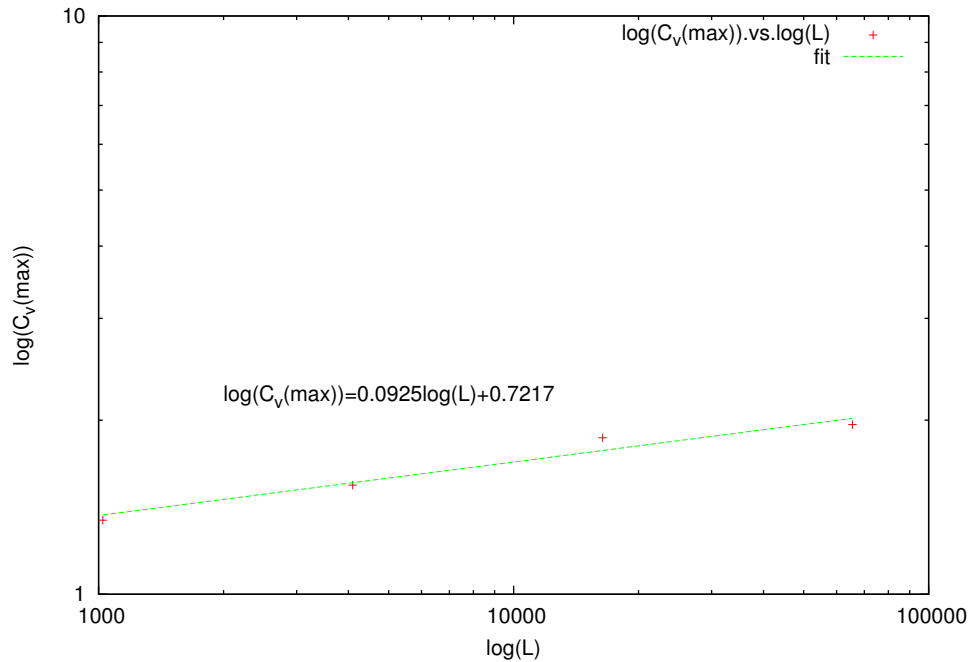


FIGURE 3.12 – Variation du logarithme de la capacité calorifique en fonction du logarithme de la taille du système.

La courbe présente une ligne droite à partir d'un fit des données. La pente de la droite est de 0.09, ce qui correspond à $\alpha/\nu = 0.09$. Cela ne reflète pas la vraie valeur telle que prédite par la théorie ; $\alpha = 0$. Une augmentation de la taille du système fera converger la valeur de la pente vers 0.

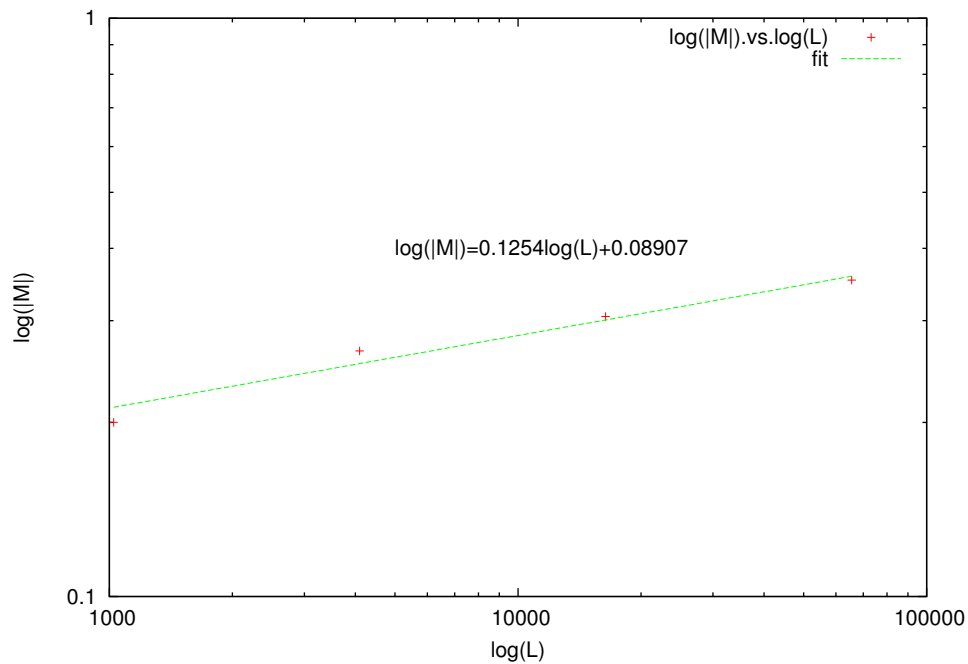


FIGURE 3.13 – Variation du logarithme de l'aimantation absolue en fonction du logarithme de la taille du système.

La courbe de la FIGURE 3.13 présente une droite avec une pente de 0.1254, ce qui coïncide avec la valeur théorique de $\beta/\nu = 1/8$.

3.4 Analyse d'erreurs

Il existe deux types d'erreurs dans la simulation Monte Carlo : *erreur statistique* et *erreur systématique*. L'erreur statistique survient à la suite de changements aléatoires dans le système de simulation d'une mesure à une autre et ne peut être éliminée que par la génération d'un grand nombre d'échantillons indépendants. L'erreur systématique est due à la procédure adaptée pour effectuer une mesure et qui affecte toute la simulation.

3.4.1 Erreur statistique

Soit y une quantité distribuée selon une distribution Gaussienne. La valeur moyenne $\langle y \rangle$ vaut

$$\langle y \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i \quad (3.13)$$

L'erreur standard se calcule comme suit :

$$\text{error} = \frac{\sigma}{\sqrt{N}} \quad (3.14)$$

ou $\sigma^2 = \langle y^2 \rangle - \langle y \rangle^2$. On remplaçant la valeur de σ ainsi que celle de $\langle y \rangle$ dans 3.14, on obtient :

$$\text{error} = \sqrt{\frac{1}{N(N-1)} \sum_{i=1}^N (y_i - \langle y \rangle)^2} \quad (3.15)$$

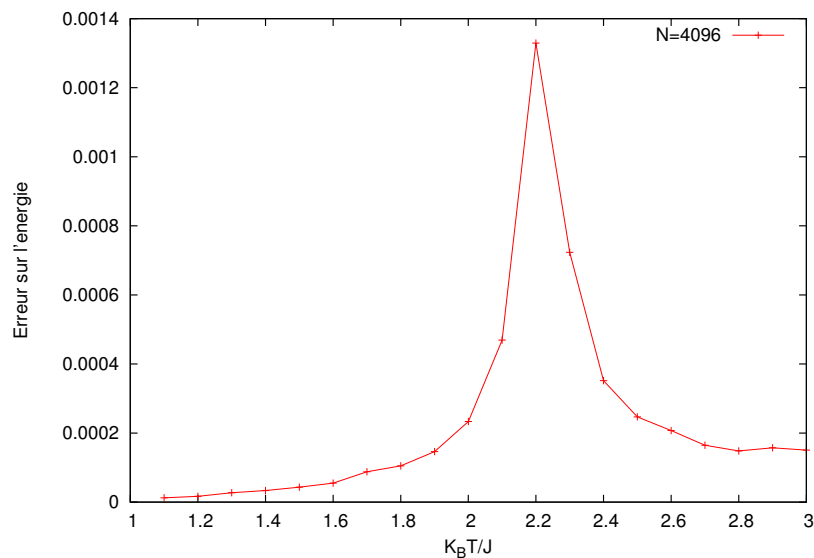


FIGURE 3.14 – Variation de l'erreur statistique sur l'énergie pour différentes valeurs de températures.

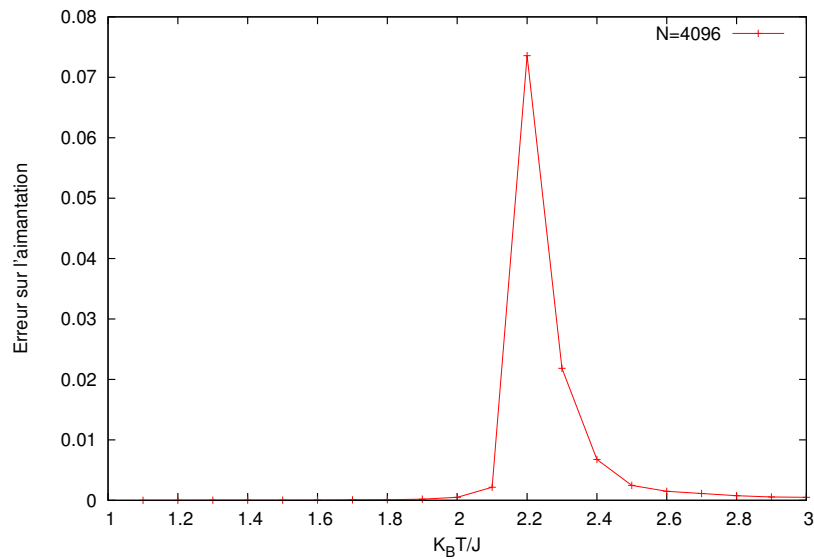


FIGURE 3.15 – Variation de l'erreur statistique sur l'aimantation pour différentes valeurs de températures.

Sur la FIGURE 3.14 la variation de l'erreur sur l'énergie pour différentes valeurs de températures. L'erreur est importante au voisinage de la transition de phase et tend à s'annuler vers les basses températures. Elle est aussi significative pour les hautes températures vu que le système présente des fluctuations.

Pour la FIGURE 3.15), l'erreur sur l'aimantation est imposante au voisinage de la phase de transition et s'annule de part et d'autre de la température de transition T_c .

3.4.2 Erreur systématique

Étant donné que les erreurs systématiques ne figurent pas dans la fluctuation de la mesure individuelle, elles sont plus difficiles à estimer que les erreurs statistiques. La principale source d'erreur systématique dans la simulation du modèle d'Ising est le choix du nombre de pas de temps Monte Carlo pour équilibrer le système.

Il n'y a pas une méthode générale pour estimer les erreurs systématiques. Chaque source de cette erreur doit être considérée séparément et une stratégie doit être identifiée afin de la minimiser au maximum ce type d'erreur.

3.5 Ralentissement critique

La simulation au voisinage du point critique prend énormément de temps pour entrer en équilibre. Le temps de relaxation τ ; qui est l'échelle de temps sur laquelle le système s'approche de l'équilibre devient de plus en plus grand et qui tend à diverger. Ce dernier est lié à la longueur de corrélation du système par la relation

$$\tau \sim \xi^z \quad (3.16)$$

où z est un autre exposant critique nommé *exposant dynamique*. Pour le modèle d'Ising, $z = 2$ dans le cas de l'algorithme de MC Metropolis. Pour un système de grande taille L , le temps de relaxation croît comme $\tau \sim L^z$. Cela a une conséquence très sérieuse dans l'étude des grands systèmes dans le régime près du point critique.

3.6 Autres algorithmes

L'algorithme de MC Metropolis peut être proche de la simulation des systèmes réels, mais il est lent à atteindre l'équilibre et représente des fluctuations de grande intensité au voisinage de la température de transition. Plusieurs algorithmes se sont développés pour palier ce problème.

3.6.1 L'algorithme de Swendsen-Wang

Après l'algorithme de MC Metropolis, vient celui de *Swendsen-Wang* (1987) [23] qui lui aussi se base sur le flippe des amas (clusters). L'idée était inspirée du travail de *Fortuin-Kesteleyn* (1972) [25].

L'algorithme ressemble à celui de Wolff; l'ensemble du réseau de spin est divisé en des clusters en joignant selon une probabilité $1 - \exp(-2\beta\mathcal{J})$ les spins voisins de même signe.

Les mêmes étapes de l'algorithme de Wolff sont répétées, à l'exception que tous les clusters sont flipés avec une probabilité 1/2. Pour chaque cluster flipé, une décision est prise avec une probabilité 1/2 si le flip est accepté ou non.

Algorithm 2 : Algorithme de Swendsen-Wang

1. On choisit un spin m au hasard
 2. Voir s'il existe un spin voisin qui possède le même signe et l'ajouter au cluster avec une probabilité $1 - \exp(-2\beta\mathcal{J})$.
 3. Pour chaque spin ajouter au cluster, examiner ses voisins qui ont le même signe que lui et l'ajouter au cluster selon la probabilité $1 - \exp(-2\beta\mathcal{J})$.
 4. Répéter 3 jusqu'à aucun spin ne sera ajouté.
 5. Flipper le cluster avec une probabilité 1/2.
 6. Retour à l'étape 1.
-

L'algorithme permet de réduire le temps de relaxation de façon drastique. Dans le modèle d'Ising sur un réseau de 512×512 , le temps de relaxation peut être 10 000 fois plus faible que pour l'algorithme de MC Metropolis. Des calculs ont montré que le temps de relaxation satisfait toujours la relation 3.16 avec $z \approx 0$ en 2D et $z \sim 0.35$ en 3D au lieu de 2 pour l'algorithme classique.

Un inconvénient de la méthode de Swendsen-Wang est que des efforts considérables sont déployés dans la détermination de l'amas qui comprend les petits et les grands clusters. Cependant, le petit cluster ne contribue pas au ralentissement critique. De ce fait, leur contribution ne participe pas à l'accélération du programme. Ce problème a été pris en charge dans l'algorithme de Wolff.

3.6.2 L'algorithme de Wolff

Cet algorithme a été proposé par *Ulli Wolff* en 1989 et est basé sur le travail de *Swendsen et Wang* (1987) [26]. L'idée de base est de chercher des clusters (amas de spins) de même orientation de spins et de les flipper une seule fois. L'algorithme repose sur le choix aléatoire d'un spin du réseau et voir s'il existe un voisin qui possède la même orientation. Puis on poursuit de proche en proche jusqu'à construire un cluster. L'ajout des spins au cluster est selon une probabilité $1 - \exp(-2\beta\mathcal{J})$. Le processus est répété jusqu'à ce qu'aucun spin ne s'ajoute. Par la suite, le cluster est flippé.

Algorithm 3 : Algorithme de Wolff

1. On choisit un spin m au hasard
 2. Voir s'il existe un spin voisin qui possède le même signe et l'ajouter au cluster avec une probabilité $1 - \exp(-2\beta\mathcal{J})$.
 3. Pour chaque spin ajouté au cluster, examiner ses voisins qui ont le même signe que lui et l'ajouter au cluster selon la probabilité $1 - \exp(-2\beta\mathcal{J})$.
 4. Répéter 3 jusqu'à ce qu'aucun spin ne s'ajoute.
 5. Flipper le cluster.
 6. Retour à l'étape 1.
-

L'avantage de l'algorithme Wolff est que dans cet algorithme un seul cluster est construit et peut générer un large nombre de clusters statistiquement indépendants afin d'obtenir de bonnes statistiques. Mais près du point critique, le cluster connecté peut être très grand et le nombre d'opérations pour trouver les sites à ajouter en une seule étape peut augmenter d'une façon sévère. Il faut beaucoup de temps pour générer chaque amas critique à partir des différents spins du réseau.

3.7 Conditions aux limites

Tout modèle numérique est fini, et aucune singularité ou discontinuité n'est observée dans un système fini. Le but d'une simulation est de reproduire un système réel infini d'une manière approximative. Pour cela, on utilise des conditions aux limites afin de simuler un système infini. Il existe plusieurs type de conditions aux limites ;

3.7.1 Condition aux limites périodique :

Elle consiste à joindre la première ligne des spins du réseau avec la dernière ligne, la première colonne du réseau avec la dernière colonne (FIGURE3.16).

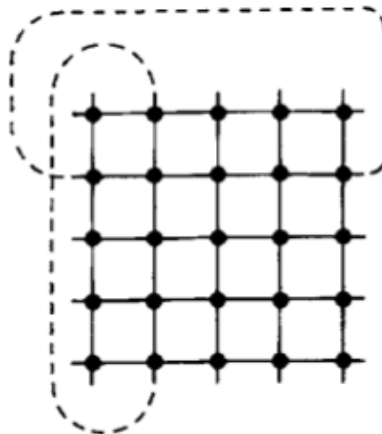


FIGURE 3.16 – Application des conditions aux limites pour le modèle d'Ising 2D : Condition aux limites périodique [47]

3.7.2 Condition aux limites elliptique :

Il s'agit d'une représentation des spins du réseau telle une chaîne unidimensionnelle qui s'enveloppe autour du système. le dernier spin de la ligne voit le premier spin de la ligne suivante (FIGURE3.17).

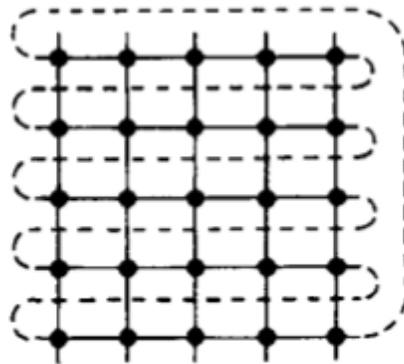


FIGURE 3.17 – Application des conditions aux limites pour le modèle d’Ising 2D : Condition aux limites elliptique [47]

3.7.3 Condition aux limites à bords libres :

Dans ce type de condition au limite, le dernier spin de la ligne ne voit aucun autre dans sa direction (FIGURE3.18).

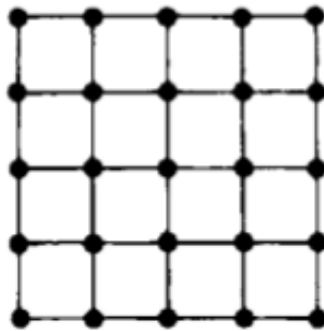


FIGURE 3.18 – Application des conditions aux limites pour le modèle d’Ising 2D : Condition aux limites à bords libres [47]

Étude numérique du modèle d'Ising dilué

Dans ce chapitre, on s'intéressera à l'étude numérique du modèle d'Ising à lien dilué en utilisant l'algorithme du MC-Metropolis. Une nouvelle approche de l'algorithme de MC-Metropolis est utilisée. Le calcul des grandeurs thermodynamiques en fonction du paramètre du désordre est abordé. Les conditions aux limites à bords libres sont employées.

4.1 Description du modèle

Ce modèle consiste à l'étude du modèle d'Ising à lien dilué. Ce dernier repose sur le fait que les interactions entre spins voisins ne sont pas toutes égales à 1, mais suivent une loi de probabilité \mathbb{P} avec :

$$\mathbb{P}(\mathcal{J}_{ij} = 1) = \sigma$$

$$\mathbb{P}(\mathcal{J}_{ij} = 0) = 1 - \sigma \quad (4.1)$$

avec $0 \leq \sigma \leq 0.5$, le paramètre du désordre (concentration de lien) ;

- $\sigma = 0.5$: correspond à un désordre totale,
- $\sigma = 0$: il n'y a pas de désordre.

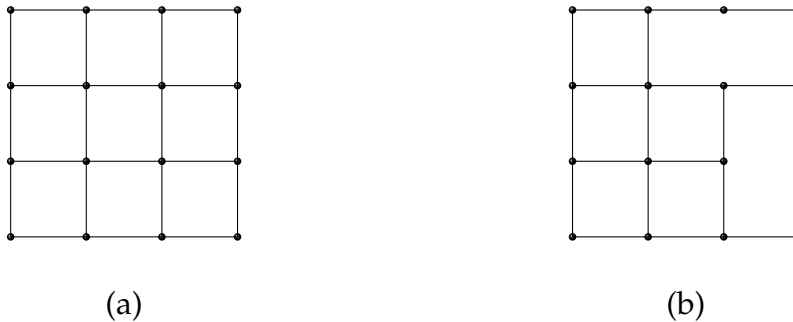


FIGURE 4.1 – Réseau régulier (a), réseau désordonné (b) avec $\sigma = 0.1$.

Ce type de désordre a été étudié pour la première fois par *Zobin* [16]. Une étude a été faite sur le comportement des propriétés thermiques en fonction du désordre pour des conditions aux limites périodiques. La température critique de transition décroît lorsque le désordre augmente. Dans le même contexte, un autre auteur a démontré que la région critique devient plus étroite que la concentration des liens diminue [18].

4.2 Méthode de simulation et résultats

L'hamiltonien du système s'écrit :

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} \mathcal{J}_{i,j} S_i S_j \quad (4.2)$$

ou $\mathcal{J}_{i,j}$ est l'énergie d'interaction entre les plus proches spins voisins $\langle i,j \rangle$.

La simulation utilise la méthode de MC Metropolis avec une approche différente de celle évoquée précédemment dans le chapitre précédent. L'idée consiste à diviser le processus d'équilibre thermodynamique en ce qu'on nomme *tranche de temps* (*Timeslice*), qui correspond au nombre de cycle Monte Carlo. Lorsque la différence d'énergie moyenne entre deux timeslice est inférieure à une certaine valeur ϵ_0 , la simulation est arrêtée. Ce processus est répété pour différentes valeurs de températures.

La FIGURE 4.2 illustre le temps nécessaire afin que la grandeur thermodynamique (énergie et aimantation absolue) cesse de fluctuer, pour un réseau carré de taille donnée et pour différentes températures sans désordre.

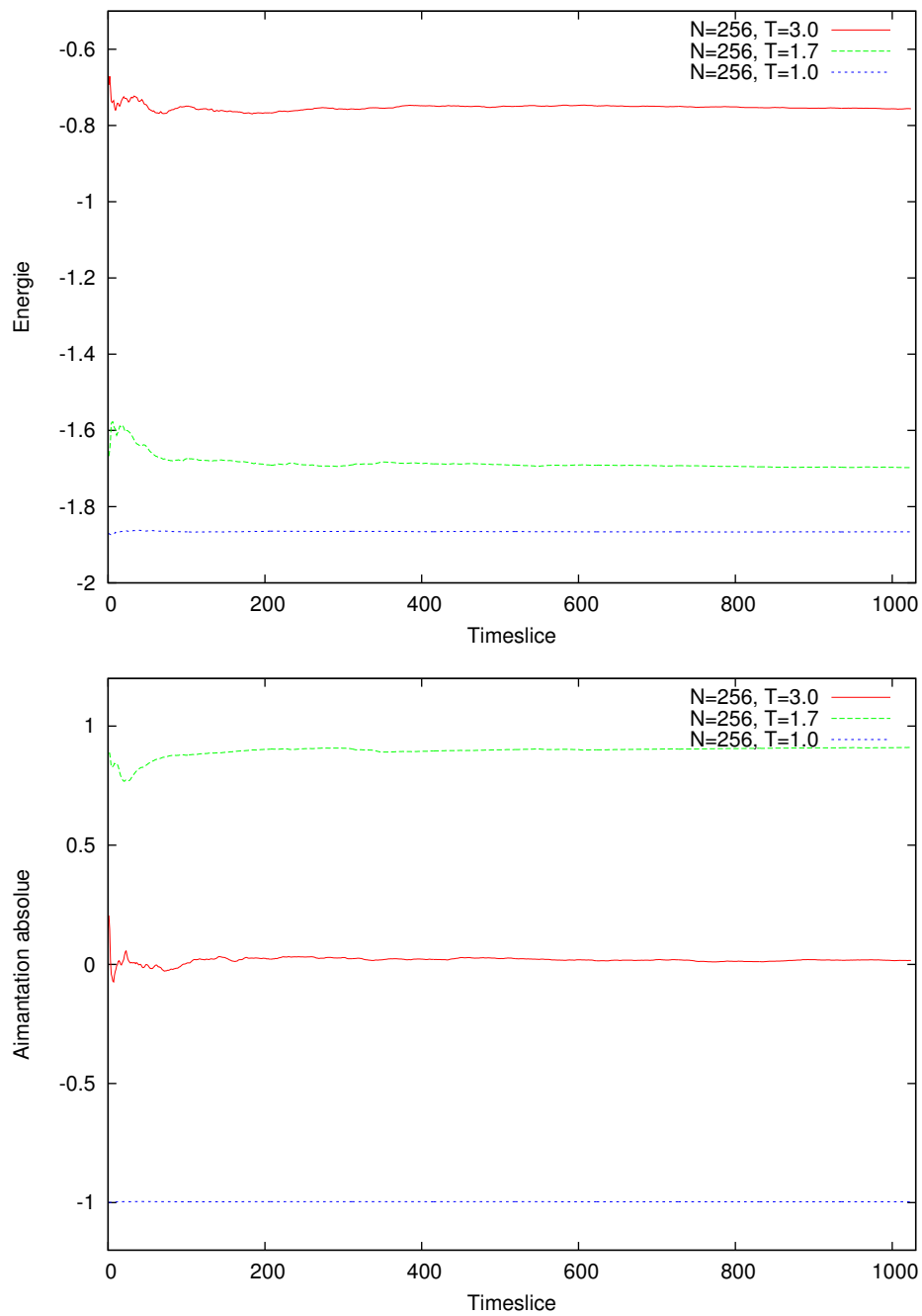


FIGURE 4.2 – Variation de l'énergie moyenne $[\mathcal{J}]$ ainsi que l'aimantation moyenne absolue en fonction du timeslice pour 100 échantillons.

Trois températures ont été choisies pour une taille $N = 256$; une à haute température ($T = 3.0\beta$), la seconde au voisinage de la température critique ($T = 2.0\beta$) et la dernière à basse température ($T = 1.0\beta$). Une forte fluctuation à haute température ainsi qu'au voisinage de la température critique est observée pour les deux grandeurs. La stabilisation est atteinte au delà de 100 timeslices. Ce qui n'est pas le cas pour la basse température; la stabilisation est observée à partir de 10 timeslices. Pour une bonne mesure de la grandeur thermodynamique, une moyennisation est faite à chaque timeslice sur un certain nombre d'échantillons.

4.2.1 Dépendance de la température critique T_c du désordre σ

Les résultats de la simulation sont présentés dans cette partie. Différentes tailles de système de spins avec des conditions aux limites à bord libre ($N = 256, 1024, 4096$) sont employées pour divers concentrations de lien ($\sigma \in [0, 0.5]$). 10000 échantillons sont pris pour la moyennisation.

La courbe de la FIGURE 4.3 a tendance à se décaler vers les basses températures avec un aplatissement de la courbe. Plus on augmente le désordre, plus l'énergie du système tends vers *Zéro*. D'une manière géométrique, le désordre provoqué sur le système permet la coupure des liens existants entre les spins du système. À partir d'une certaine valeurs du désordre, aucune communication n'existe entre eux, ce qui traduit l'annulation de l'énergie.

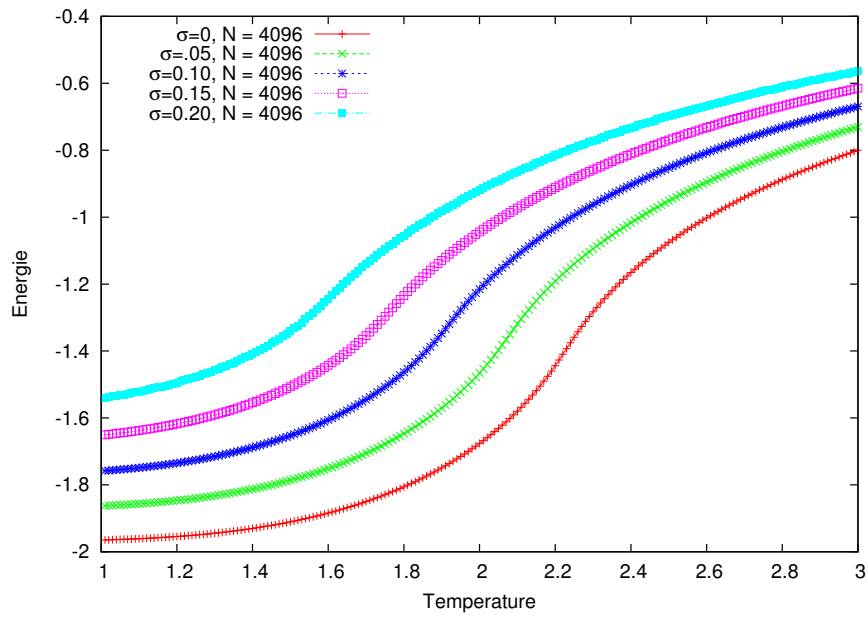


FIGURE 4.3 – L'énergie moyenne $[\mathcal{J}]$.vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.

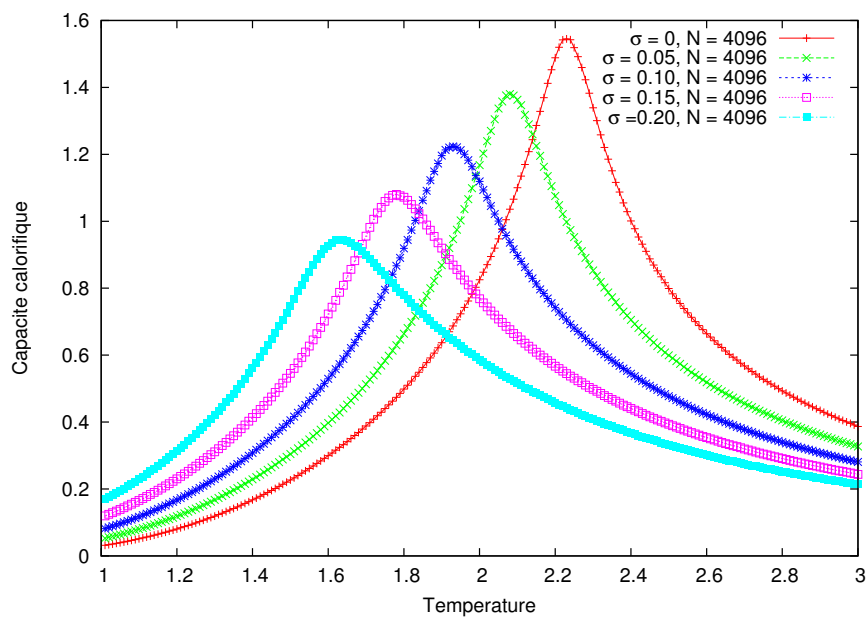


FIGURE 4.4 – La capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$.vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.

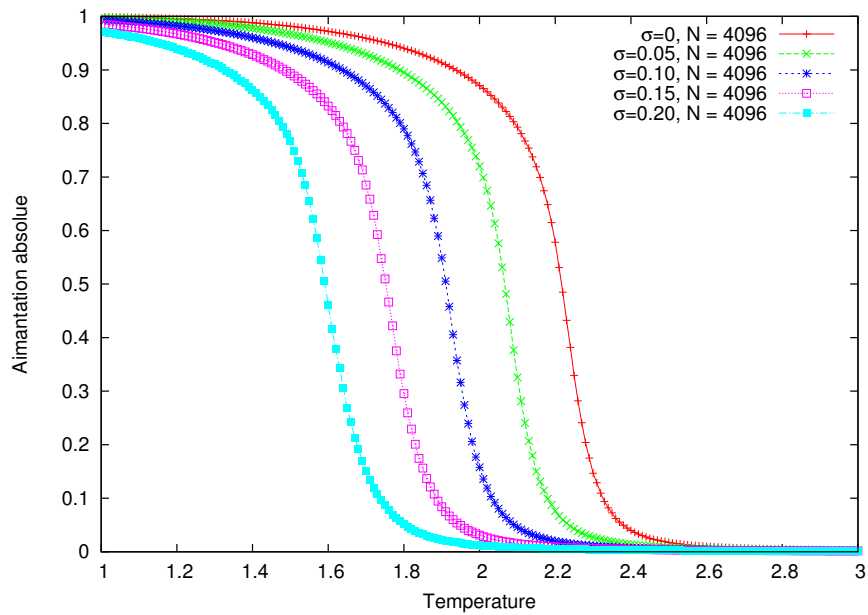


FIGURE 4.5 – L'aimantation absolue .vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.

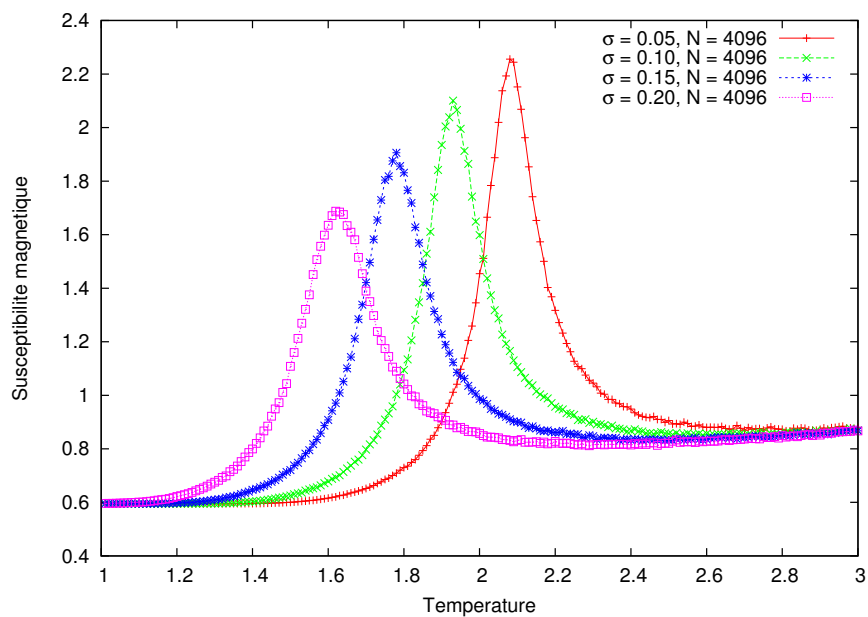


FIGURE 4.6 – La susceptibilité magnétique .vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.

La valeur de la température critique de transition T_c est déterminée en utilisant le facteur de Binder $U(T, L)$ défini comme dans l'équation 3.12.

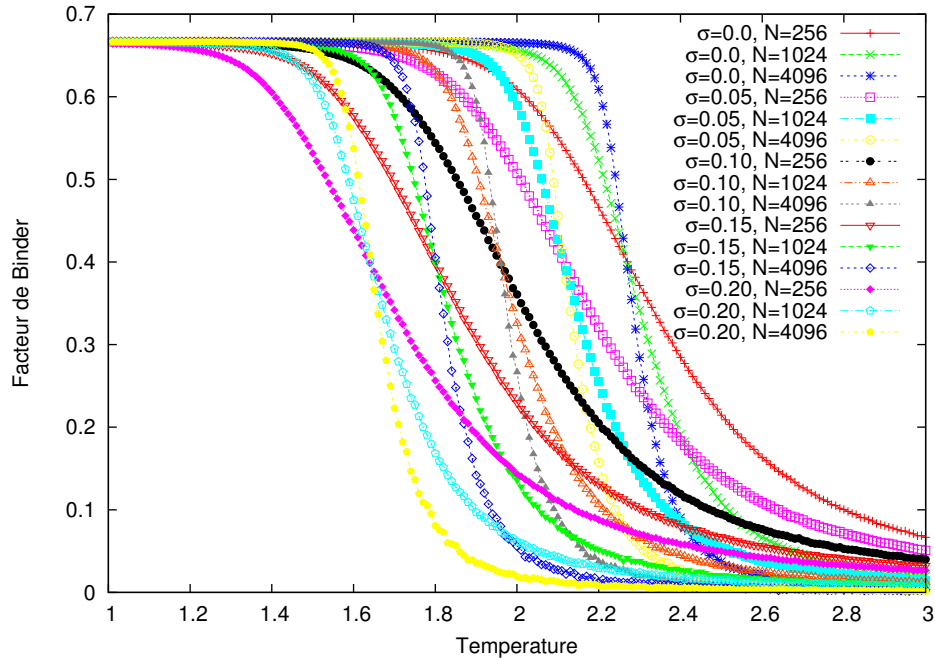


FIGURE 4.7 – Le facteur de Binder .vs. température $[\beta]$ pour différentes concentrations de lien.

L'intersection des différentes courbes du facteur de Binder pour différentes tailles défini la valeur critique de la température de transition T_c . Les FIGURES 4.8, 4.9, 4.10 illustrent une représentation détaillée de la FIGURE 4.7 qui montre la détermination graphique de la température critique T_c pour différentes valeurs de σ .

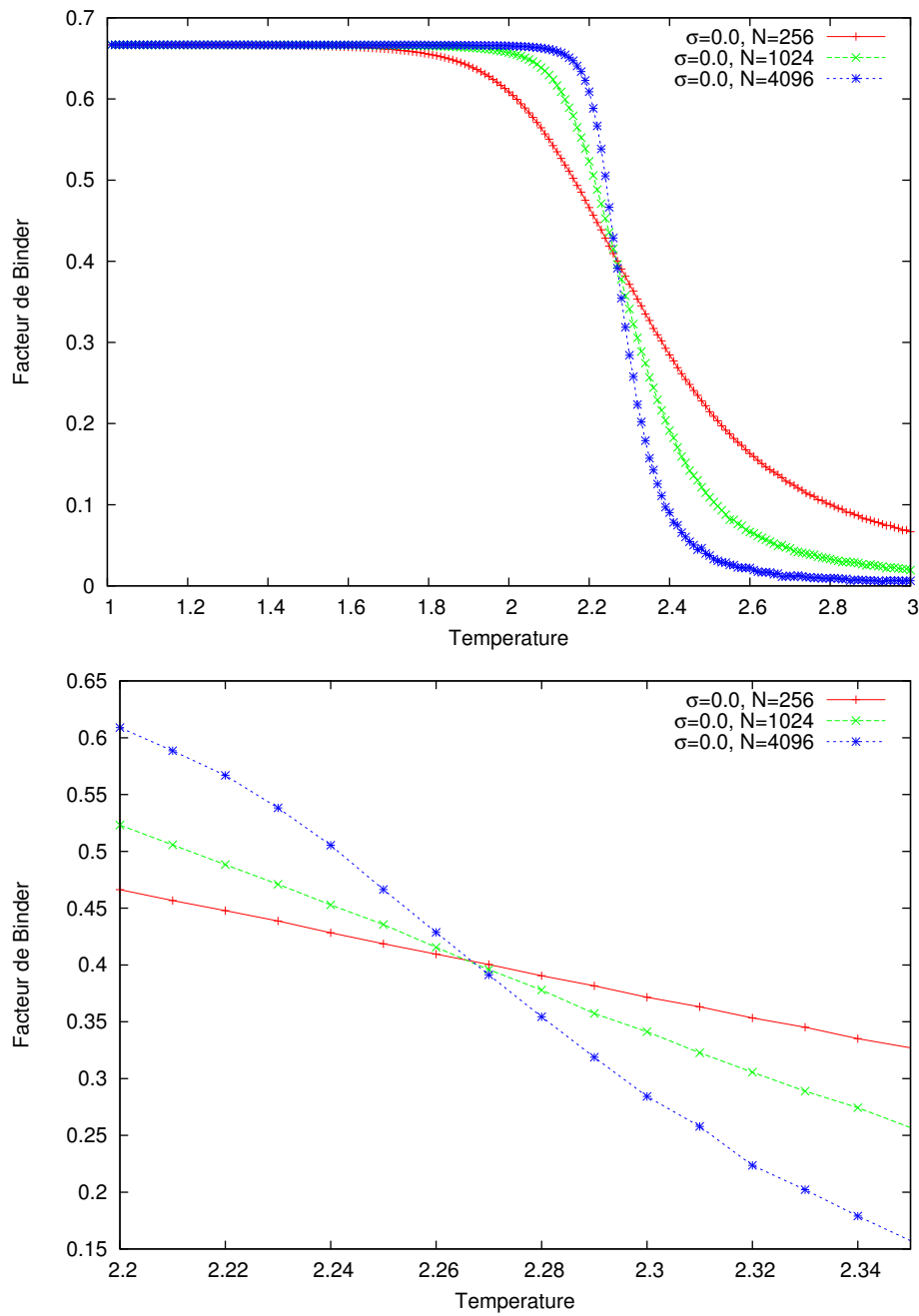


FIGURE 4.8 – Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0$.

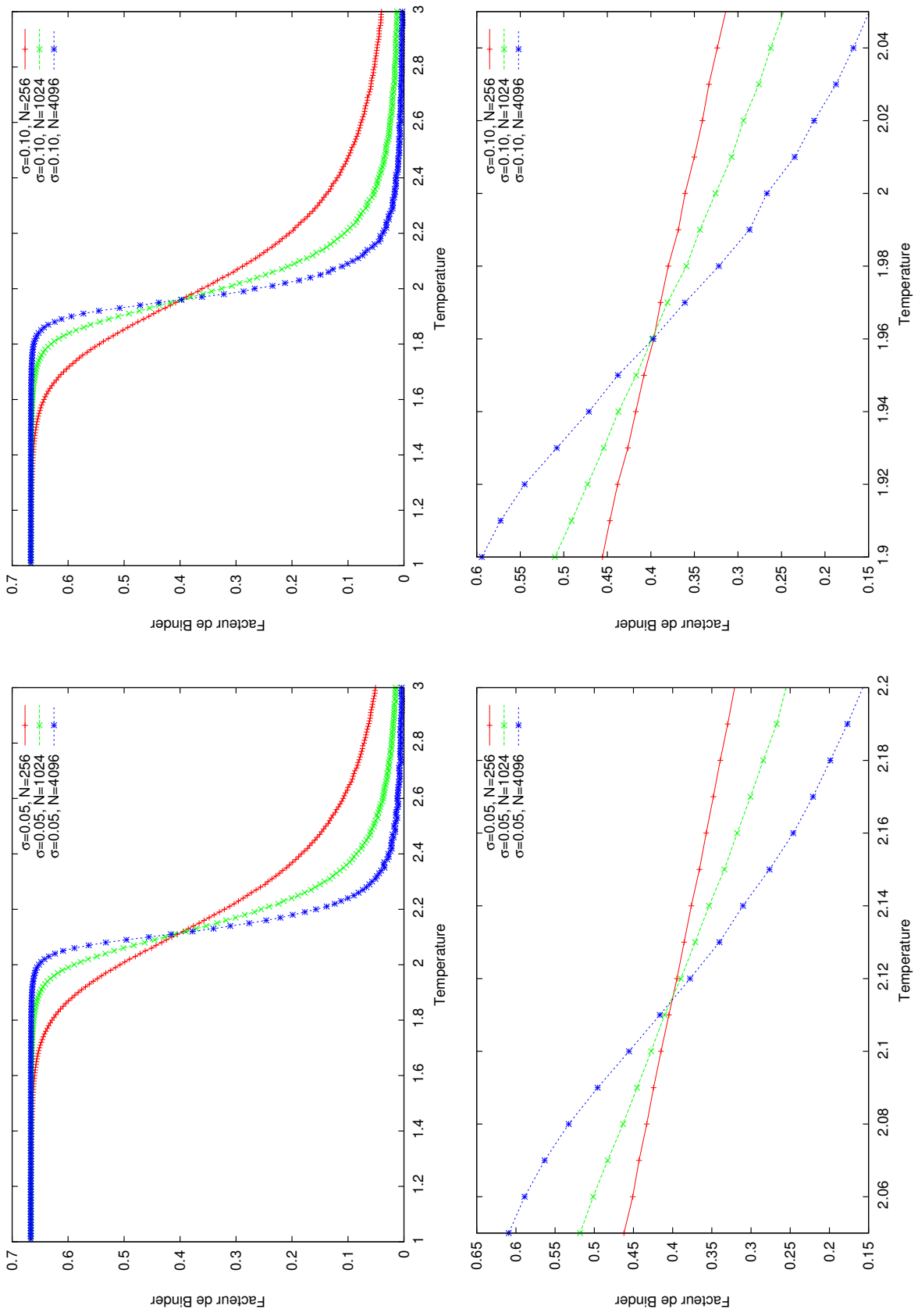


FIGURE 4.9 – Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.05$ et $\sigma = 0.10$.

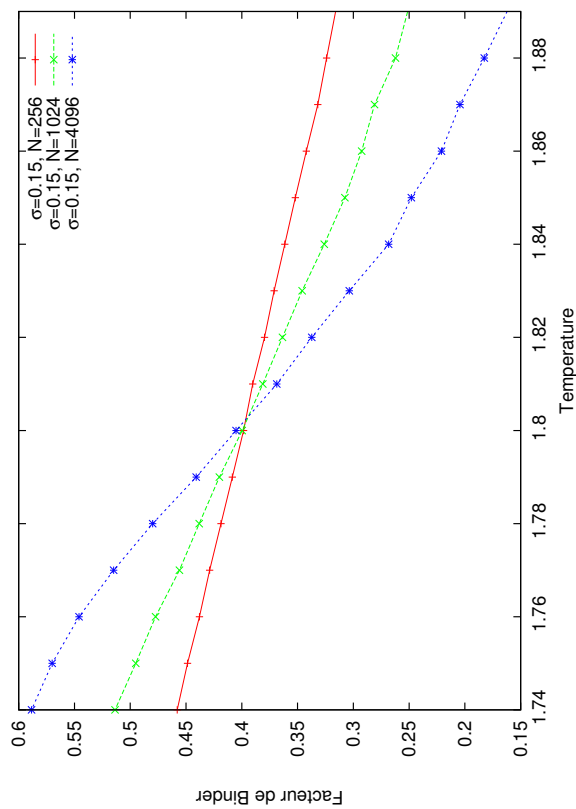
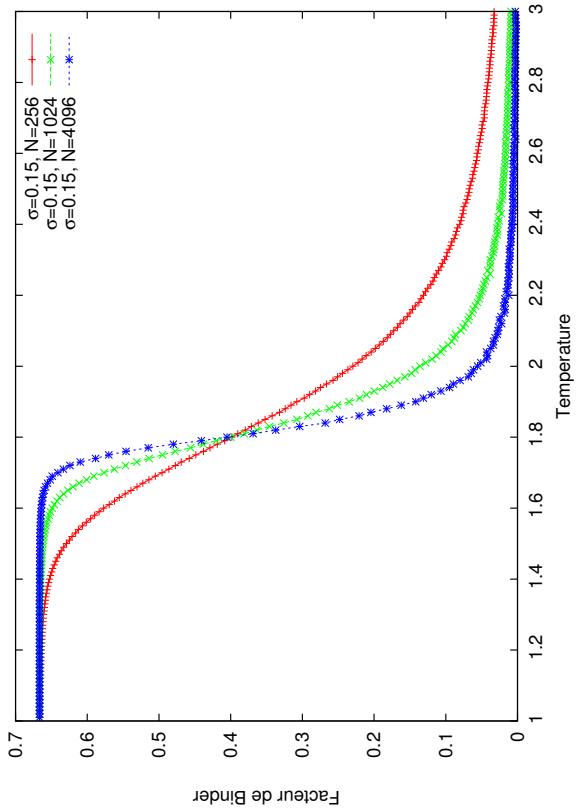
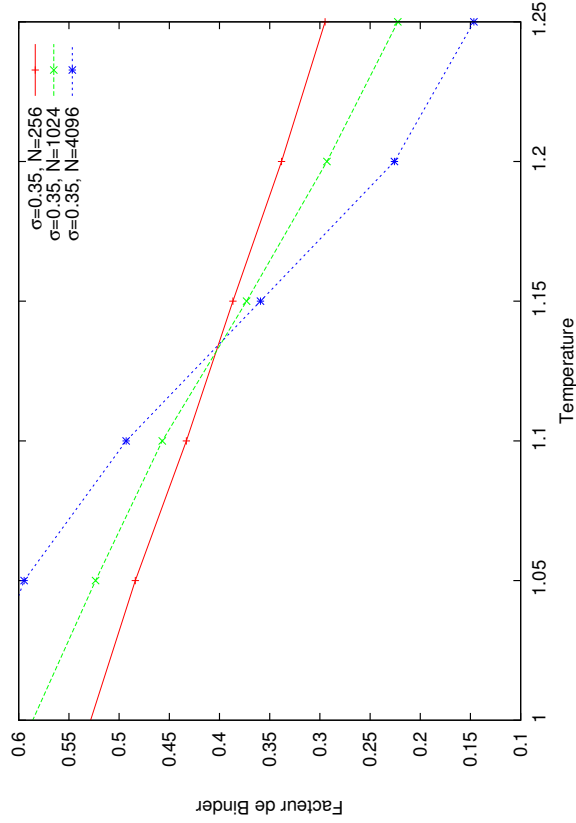
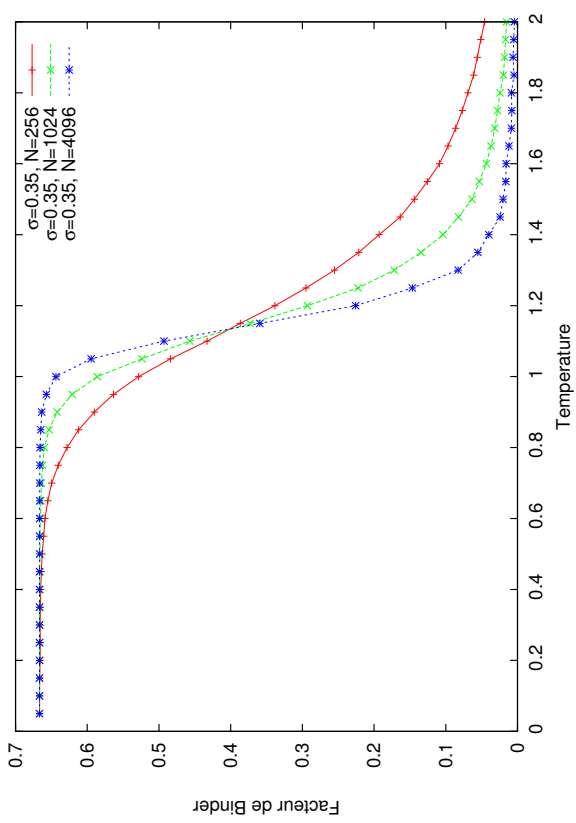


FIGURE 4.10 – Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.15$ et $\sigma = 0.20$.

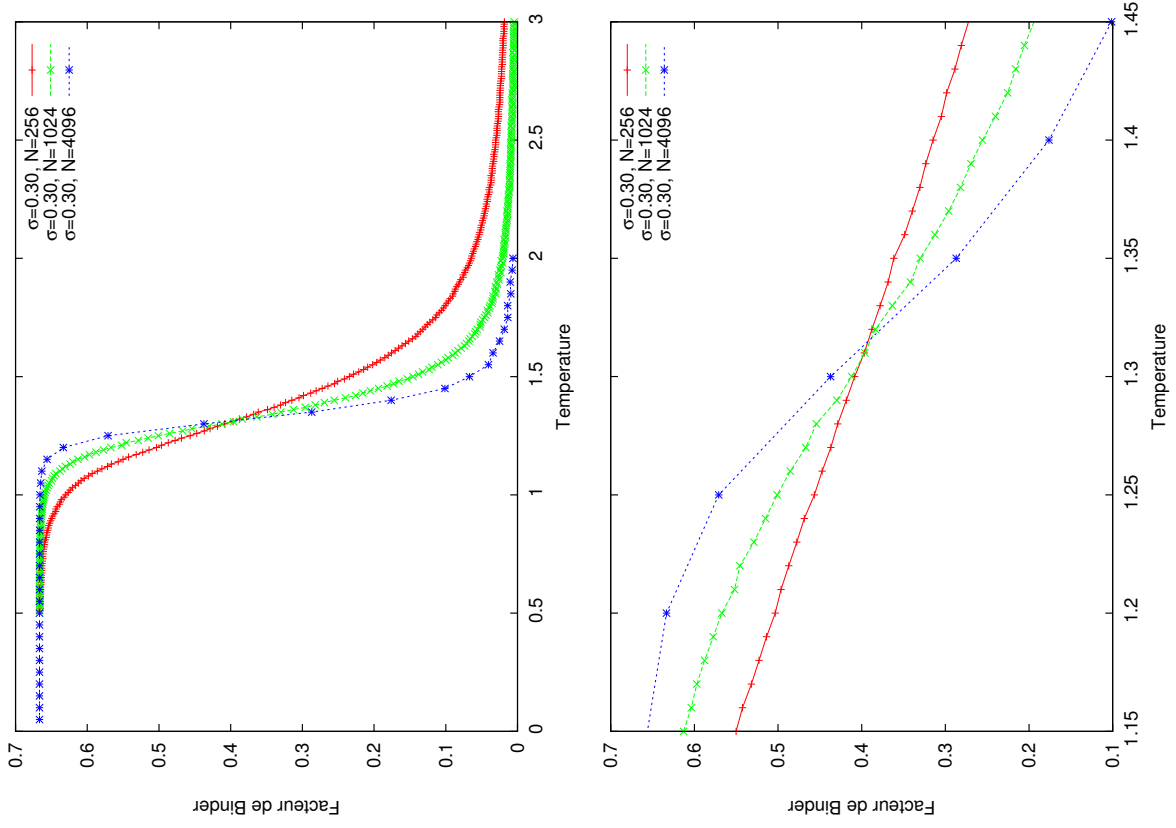


FIGURE 4.11 – Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.25$ et $\sigma = 0.30$.

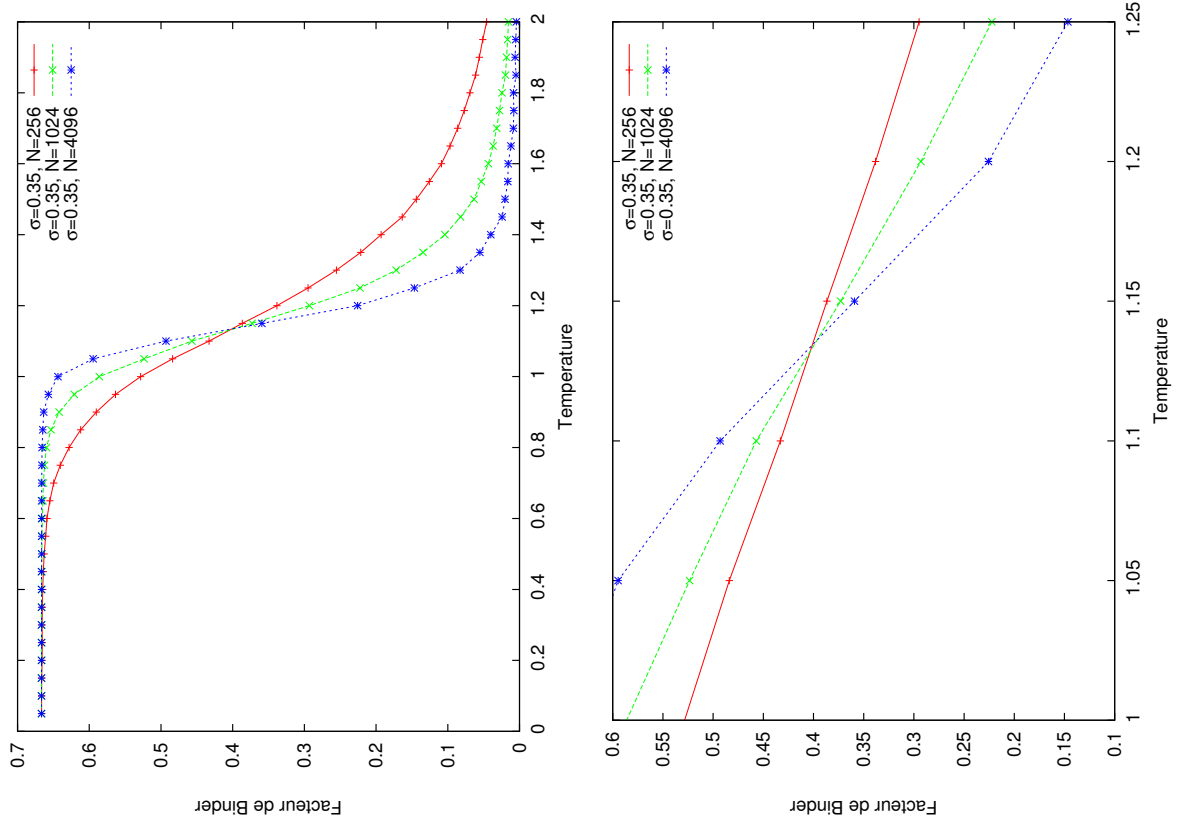


FIGURE 4.12 – Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.30$ et $\sigma = 0.350$.

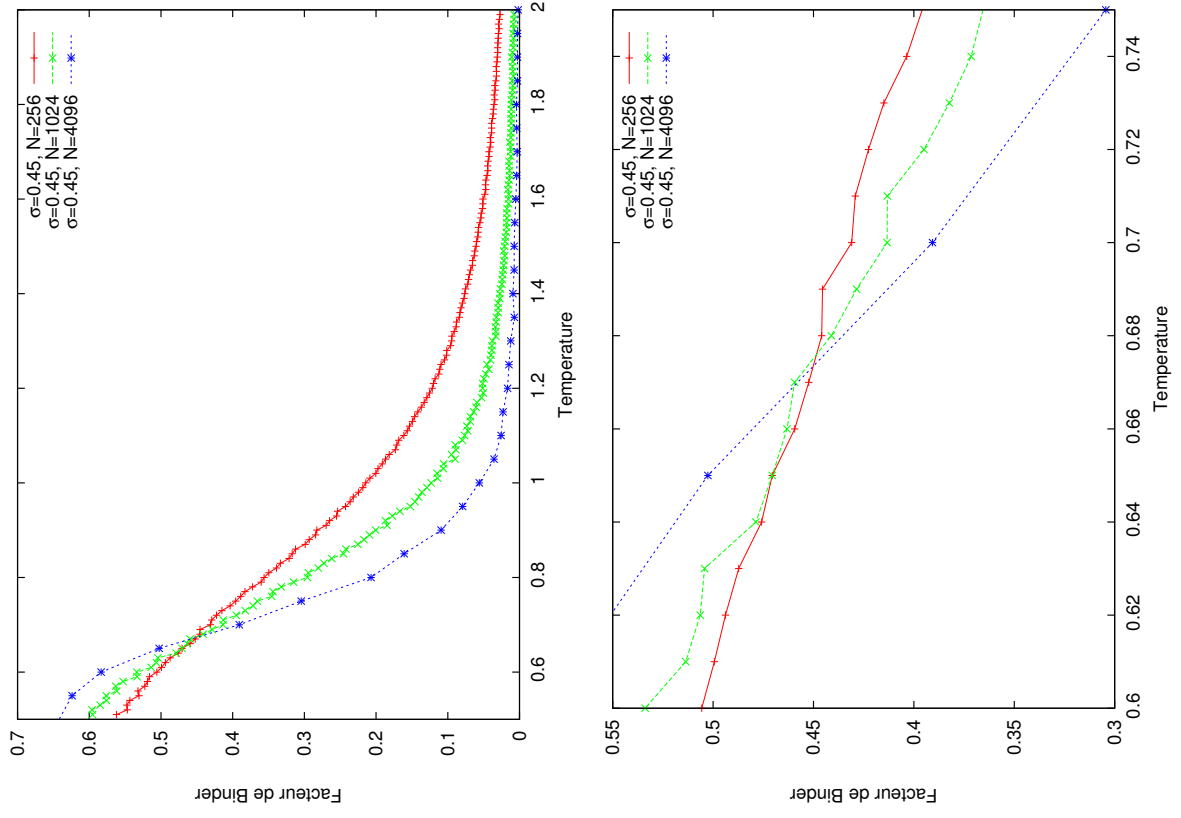


FIGURE 4.13 – Détermination de la température critique en utilisant le facteur de Binder pour $\sigma = 0.40$ et $\sigma = 0.450$.

Pour chaque valeur de la température critique T_c correspond une valeur critique du facteur de Binder U^* . Les valeurs sont représentées dans TABLE 4.1.

TABLE 4.1 – Valeurs du facteur de Binder critique U^* et de la température critique T_c pour différentes concentrations de lien.

σ	U^*	T_c
0.00	0.4017	2.2670
0.05	0.3992	2.1145
0.10	0.3965	1.9605
0.15	0.3960	1.8024
0.20	0.3954	1.6430
0.30	0.3914	1.3163

Les FIGURES 4.14, 4.15 représentent la variation de T_c et U_c en fonction de σ respectivement.

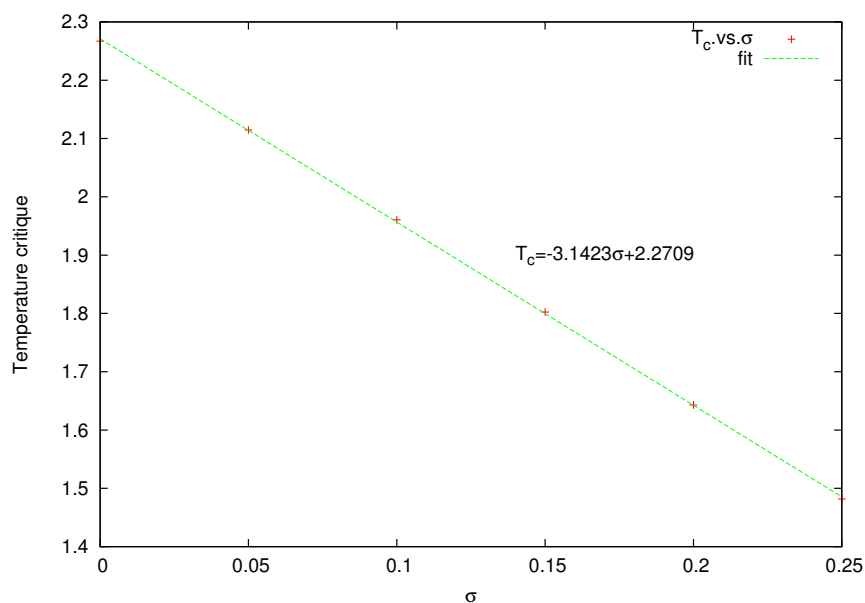


FIGURE 4.14 – Température critique en fonction du paramètre de désordre.

La pente de T_c en fonction de σ vaut 3.1423 ± 0.0172 par rapport à celle déterminée par *Harris* [15] qui est de 3.016, et celle de *Jayaprakash* [18] qui est

de 3.108. Le résultat obtenu s'approche de celui obtenu par *Domany* [17] dont la valeur exacte est de 3.145.

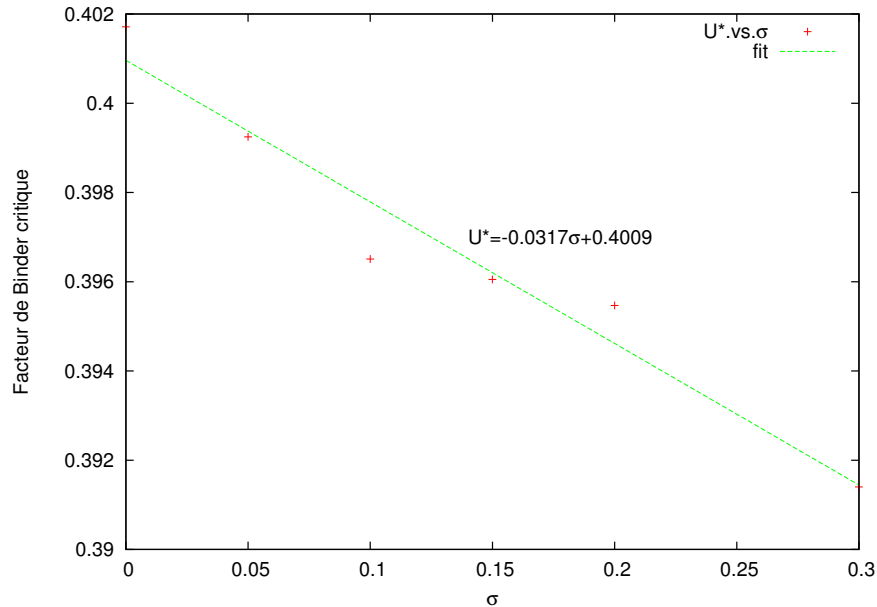


FIGURE 4.15 – Facteur de Binder critique en fonction du paramètre de désordre.

La variation U^* en fonction de σ est une ligne rectiligne décroissante. L'augmentation du désordre engendre la diminution de la valeur critique du facteur de Binder. La valeur de U^* à $\sigma = 0$ trouvée par Selke [44] est de $U^* = 0.396 \pm 0.002$, comparée au résultat obtenu qui est de 0.4007 ± 0.0007 .

4.2.2 Valeur de T_c à $\sigma = 0.5$

Par analogie à la percolation, le seuil de percolation de lien du modèle d'Ising est la concentration minimale de lien à laquelle un cluster infini apparaît. Pour un réseau carré, le seuil de percolation de lien vaut exactement **0.5** [22]. Il est intéressant de déterminer la valeur de T_c et U^* à $\sigma = 0.5$. On utilisera les deux méthodes de détermination de la température critique (celle de l'utilisation du facteur de Binder (méthode 1) et celle de l'utilisation de $C_v(max)$ (méthode 2)).

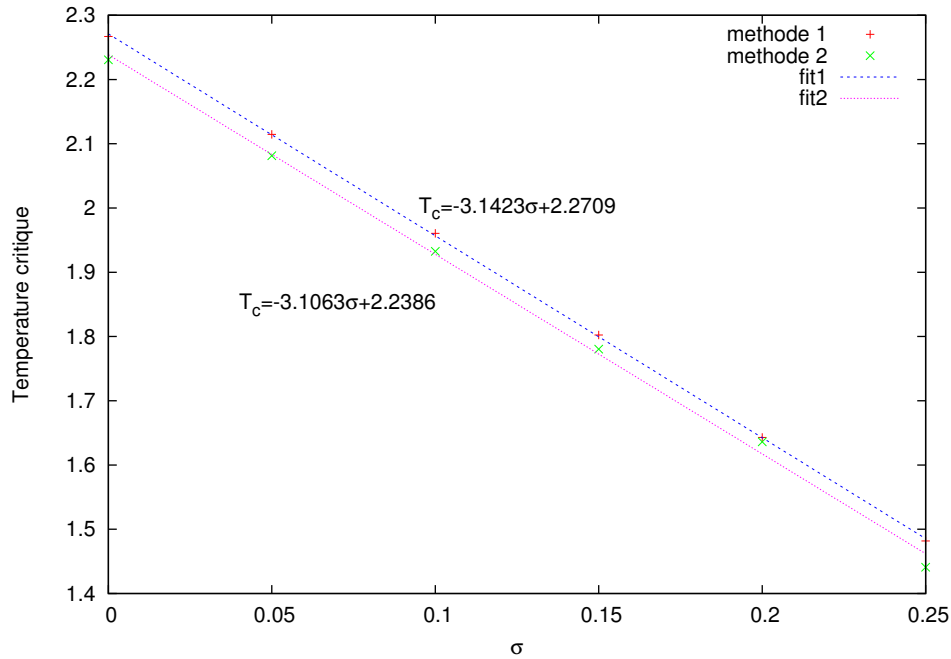


FIGURE 4.16 – Variation de la température critique en fonction du paramètre de désordre pour les deux méthodes.

La FIGURE 4.16 montre la variation de la température critique en fonction du paramètre de désordre pour les deux méthodes de détermination de la température critique. Une légère différence dans la détermination de la valeur de T_c existe entre les deux méthodes. Cette différence peut être palliée en augmentant la taille du système ainsi que le nombre d'échantillons, ce qui va rendre la courbe de la capacité calorifique beaucoup plus pointue et tend vers la valeur exacte de T_c .

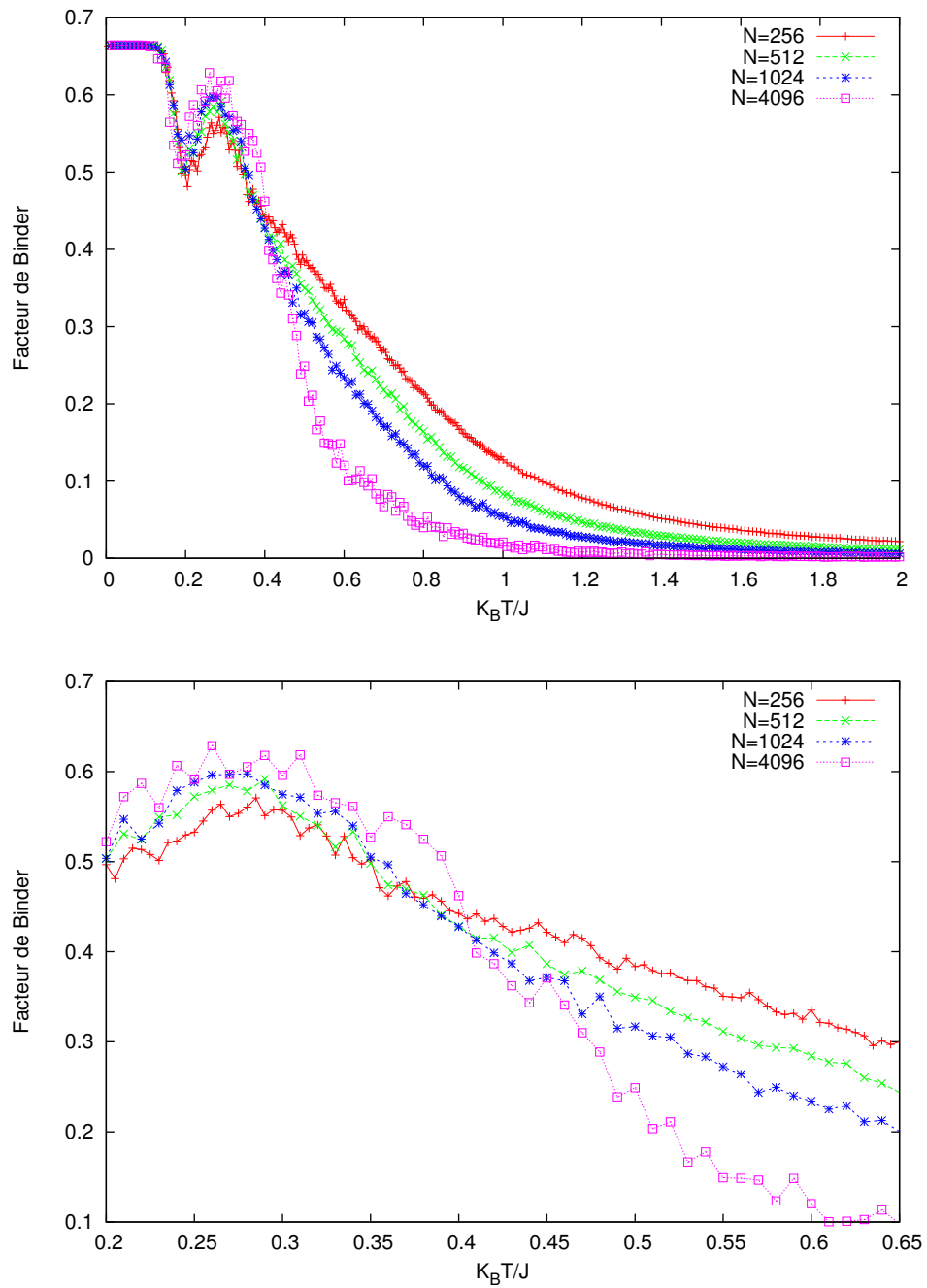


FIGURE 4.17 – Variation du facteur de Binder en fonction de la température pour $\sigma = 0.5$ (16384 échantillons).

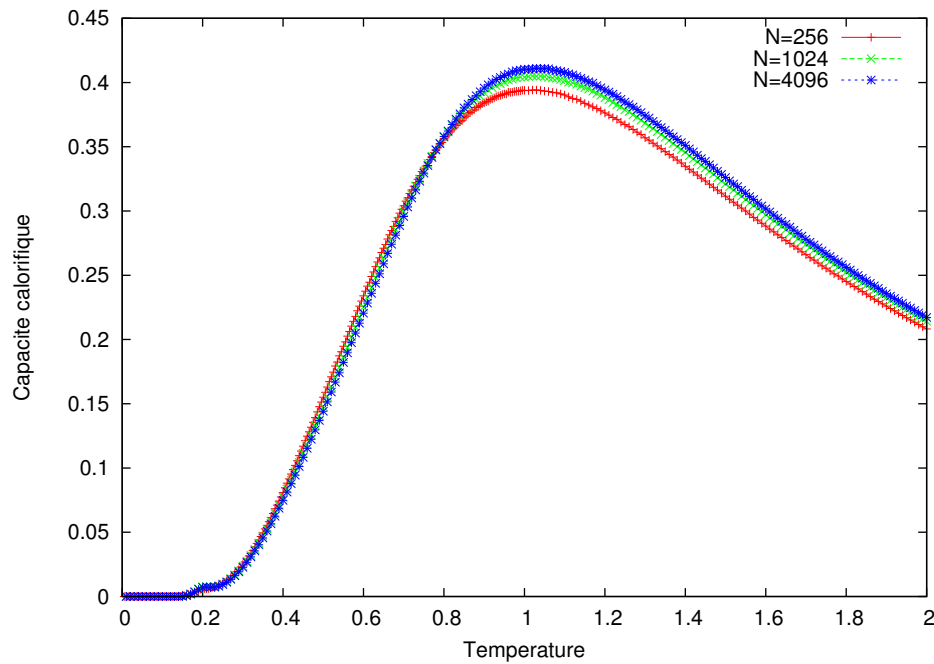


FIGURE 4.18 – Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour $\sigma = 0.5$ (16384 échantillons).

Au delà de $\sigma = 0.35$, deux valeurs différentes de T_c (TABLE 4.2) sont observées (FIGURE 4.17, 4.18).

TABLE 4.2 – Valeurs de $C_v(max)$ et de la température critique T_c déterminée par les deux méthodes pour différentes concentration de lien.

σ	$C_v(max)$	T_c (méthode 1)	T_c (méthode 2)
0.00	1.5438	2.2670	2.2306
0.05	1.3794	2.1145	2.0813
0.10	1.2191	1.9605	1.9325
0.15	1.0794	1.8024	1.7804
0.20	0.9408	1.6430	1.6360
0.25	0.8151	1.4817	1.4914
0.30	0.6225	1.3163	1.2930
0.35	0.6029	1.1342	1.2515
0.40	0.4848	0.9252	1.1438
0.45	0.4602	0.6733	1.1029
0.50	0.4093	0.3924	1.0365

Dans la FIGURE 4.17, plusieurs intersections sont observées pour différentes tailles de réseau compris dans l'intervalle [0.35-0.45]. L'augmentation du nombre d'échantillons (590000 échantillons) rend les courbes plus lisses et les courbes s'intersectent (FIGURE 4.19) à une valeur de température différente de celle prédite par la méthode 2 (4.2). Cela nous ramène à dire que pour un système fortement désordonné, la détermination de la température critique par la méthode utilisant le facteur de Binder n'est pas fiable. Son équation doit être revue.

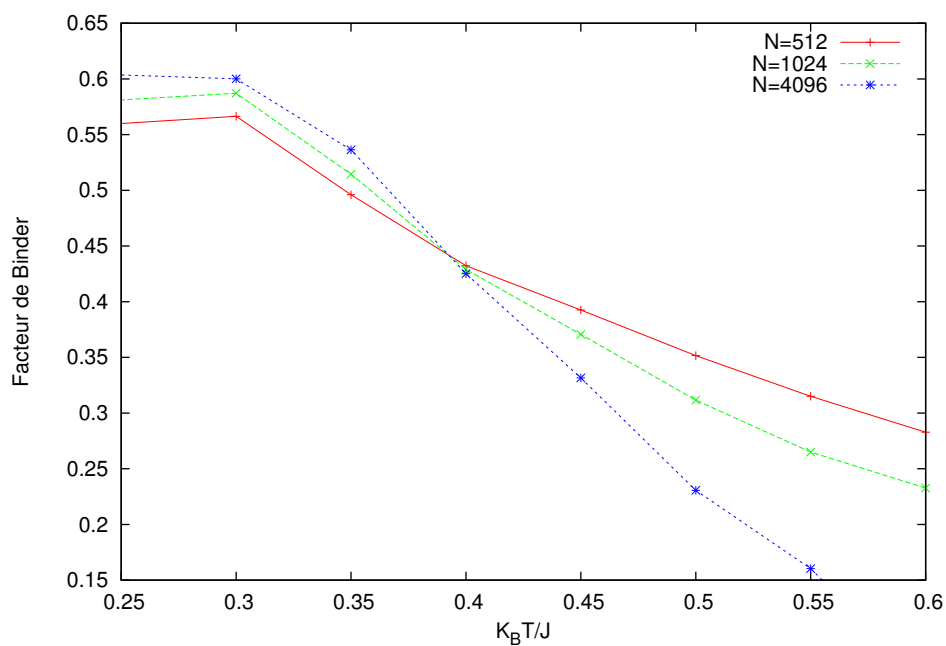


FIGURE 4.19 – Variation du facteur de Binder en fonction de la température pour $\sigma = 0.5$ (590000 échantillons).

Modèle d'Ising et la méthode de Frank et Lobb

Ce chapitre est consacré à la détermination de certaines grandeurs thermodynamiques du modèle d'Ising par le biais du calcul de la fonction de partition en utilisant la *méthode de Frank et Lobb*. Cette dernière a permis de déterminer la valeur exacte de la température critique de transition de phase du modèle d'Ising 2D régulier. L'introduction d'un faible désordre provoque une destruction et une disparition complète de la transition de phase dû à des instabilités numériques.

5.1 Introduction

Le calcul de la fonction de partition s'avère une étape très importante pour le calcul des différents grandeurs thermodynamiques. La complexité de sa résolution analytique a permis de passer au calcul numérique. La méthode de *Frank et Lobb* est l'une des méthodes de calcul numérique de la fonction de partition, elle est basée sur les transformations $Y\nabla$ très utilisées dans l'étude de certains réseaux électriques. Elle a été originalement développée pour le calcul de la conductivité d'un système aléatoire de résistance [27]. La méthode consiste à faire une séquence de transformations des liens d'un réseau afin de transformer le réseau en un seul lien qui a la même conductivité que l'ensemble du réseau.

L'extension de la méthode au modèle d'Ising a été développée et implémentée par *Loh et Carlson* [45]. Trois spins connectés par des liens à un spin central peuvent être convertis en trois spins sans le spin central tout en préservant la fonction de partition totale du système. C'est la transformation $Y\nabla$. Le développement de cette méthode est abordé dans la section suivante.

5.2 Méthode et résultats

La fonction de partition employée dans le modèle d'Ising s'écrit :

$$\mathcal{Z} = \sum_{s_i} \exp(-\beta\mathcal{H}) = \exp \sum_{i,j} \mathcal{J}_{ij} s_i s_j \quad (5.1)$$

La méthode élaborée par *Loh et Carlson* est basée sur la méthode de la propagation des liens de *Frank et Lobb* [27] : En partant du coin supérieur gauche dans la FIGURE 5.1, utiliser une réduction de série pour convertir le coin dans une liaison diagonale. En utilisant les transformations $Y\nabla$ et ∇Y , ce lien diagonal peut être multiplié successivement en diagonal vers le bas et vers la

droite jusqu'à ce qu'il soit "absorbé" sur le bord opposé. Les autres nœuds sont éliminés de la même manière.

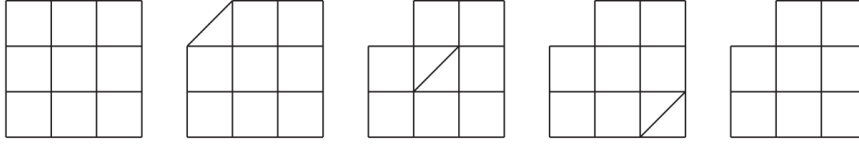


FIGURE 5.1 – La réduction du réseau

La répétition de la procédure précédente rend le réseau sous forme d'un lien unique qui correspond à la réduction de deux spin avec une énergie d'interaction effective \mathcal{J}_{eff} .

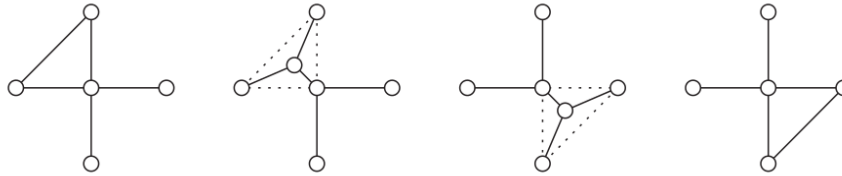


FIGURE 5.2 – Propagation des liens selon les transformations ∇Y et $Y\nabla$

On définit les différents étapes de transformation du réseau. La transformation $Y\nabla$ correspond à l'élimination du spin central et un changement de l'énergie libre F . L'égalité entre la fonction de partition en mode Y et en mode ∇ s'écrit :

$$\begin{aligned}
 \mathcal{Z}_Y[s_1, s_2, s_3] &= \sum_{s_i} \exp(\mathcal{J}_1 s_i s_1 + \mathcal{J}_2 s_i s_2 + \mathcal{J}_3 s_i s_3) \\
 &= \mathcal{Z}_{\nabla}[s_1, s_2, s_3] \\
 &= \exp(\delta F + \mathcal{J}_{23} s_2 s_3 + \mathcal{J}_{31} s_3 s_1 + \mathcal{J}_{12} s_1 s_2) \quad (5.2)
 \end{aligned}$$

Avec

$$\delta F = z_2^{1/4} z_3^{1/4} z_0^{1/4} z_1^{1/4}$$

$$\mathcal{J}_{31} = z_3^{1/4} z_0^{1/4} z_1^{-1/4} z_2^{-1/4}$$

$$\mathcal{J}_{23} = z_2^{1/4} z_3^{1/4} z_0^{-1/4} z_1^{-1/4}$$

$$\mathcal{J}_{12} = z_0^{1/4} z_1^{1/4} z_2^{-1/4} z_3^{-1/4}$$

ou

$$z_0 = \frac{1}{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3} + \mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3$$

$$z_2 = \frac{1}{\mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3 \mathcal{J}_1} + \mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3 \mathcal{J}_1$$

$$z_1 = \frac{\mathcal{J}_1}{\mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3} + \frac{\mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3}{\mathcal{J}_1}$$

$$z_3 = \frac{\mathcal{J}_2}{\mathcal{J}_3 \mathcal{J}_1} + \frac{\mathcal{J}_3 \mathcal{J}_1}{\mathcal{J}_2}$$



FIGURE 5.3 – Transformations $Y\nabla Y$

L'inverse de la transformé $Y\nabla$ est la transformée ∇Y , qui correspond à la réintégration d'un spin central. Cette transformation nous conduit aux relations suivantes :

$$\delta F = \frac{z_0}{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3 + \frac{1}{\mathcal{J}_1 \mathcal{J}_2 \mathcal{J}_3}}$$

$$\mathcal{J}_2 = \sqrt{\frac{1-t_2}{1+t_2}}$$

$$\mathcal{J}_1 = \sqrt{\frac{1-t_1}{1+t_1}}$$

$$\mathcal{J}_3 = \sqrt{\frac{1-t_3}{1+t_3}}$$

avec

$$t_1 = c_2^{1/2} c_3^{1/2} c_0^{-1/2} c_1^{-1/2}$$

$$t_3 = c_0^{1/2} c_1^{1/2} c_2^{-1/2} c_3^{-1/2}$$

$$t_2 = c_3^{1/2} c_0^{1/2} c_1^{-1/2} c_2^{-1/2}$$

où

$$c_0 = z_0 + z_1 + z_2 + z_3$$

$$c_2 = z_1 + z_2 + z_3 + z_0$$

$$c_1 = z_0 + z_1 - z_2 - z_3$$

$$c_3 = z_1 + z_2 - z_3 - z_0$$

et

$$z_0 = \frac{1}{\mathcal{J}_{23}\mathcal{J}_{31}\mathcal{J}_{12}}$$

$$z_2 = \frac{1}{\mathcal{J}_{31}\mathcal{J}_{12}\mathcal{J}_{23}}$$

$$z_1 = \frac{\mathcal{J}_{31}\mathcal{J}_{12}}{\mathcal{J}_{23}}$$

$$z_3 = \frac{\mathcal{J}_{12}\mathcal{J}_{23}}{\mathcal{J}_{31}}$$

Le calcul de la fonction de partition est répété pour chaque température T . La FIGURE 5.4 illustre la variation de la capacité calorifique en fonction de la température pour différentes tailles du système. Elle est calculée par la relation :

$$C_v = \frac{1}{N^2\beta^2} \frac{d^2 \ln \mathcal{Z}}{d\beta^2} \quad (5.3)$$

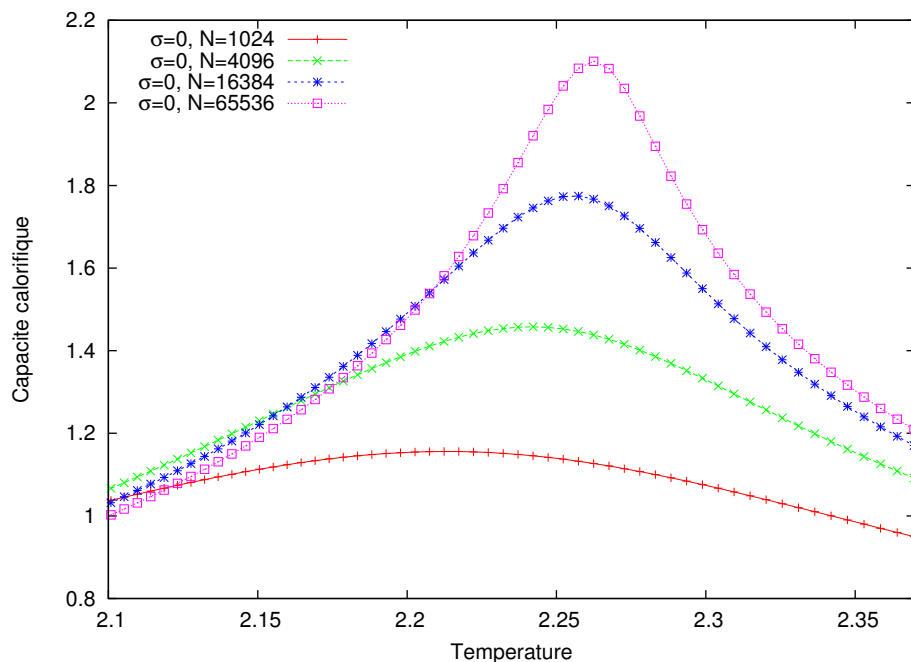


FIGURE 5.4 – Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différentes tailles à $\sigma = 0$.

La température de transition de phase T_c peut être déterminée avec précision à partir du point d'intersection de $\log(L^2 \mathcal{J}_{eff})$ pour différentes tailles du système (FIGURE 5.6). C'est la méthode \mathcal{J}_{eff} (méthode A)

La valeur de T_c trouvée par la méthode Frank et Lobb appliquée au modèle d'Ising est égale à celle trouvée par *Onsager*; $T_c = 2.269\beta$.

L'introduction du désordre, comme vu dans le chapitre précédent, correspond à des coupures de liens entre les spin. Mais n'est pas du tout le cas avec la méthode de Frank et Lobb. En d'autres termes, le désordre correspond à un **affaiblissement** des liens entre les spins (coupure partielle), selon une loi de probabilité \mathbb{P} :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(\mathcal{J}_{ij} = 1) &= \sigma \\ \mathbb{P}(\mathcal{J}_{ij} = \epsilon_0) &= 1 - \sigma \end{aligned} \tag{5.4}$$

avec $\epsilon_0 \simeq 0$ et $0 \leq \sigma \leq 0.5$, le paramètre du désordre (concentration de lien) ;

- $\sigma = 0.5$: correspond à un désordre totale,
- $\sigma = 0$: il n'y a pas de désordre.

En mettant $\epsilon_0 = 0$ (coupure totale), des instabilités numériques s'installent et un résultat erroné est observé (FIGURES 5.5).

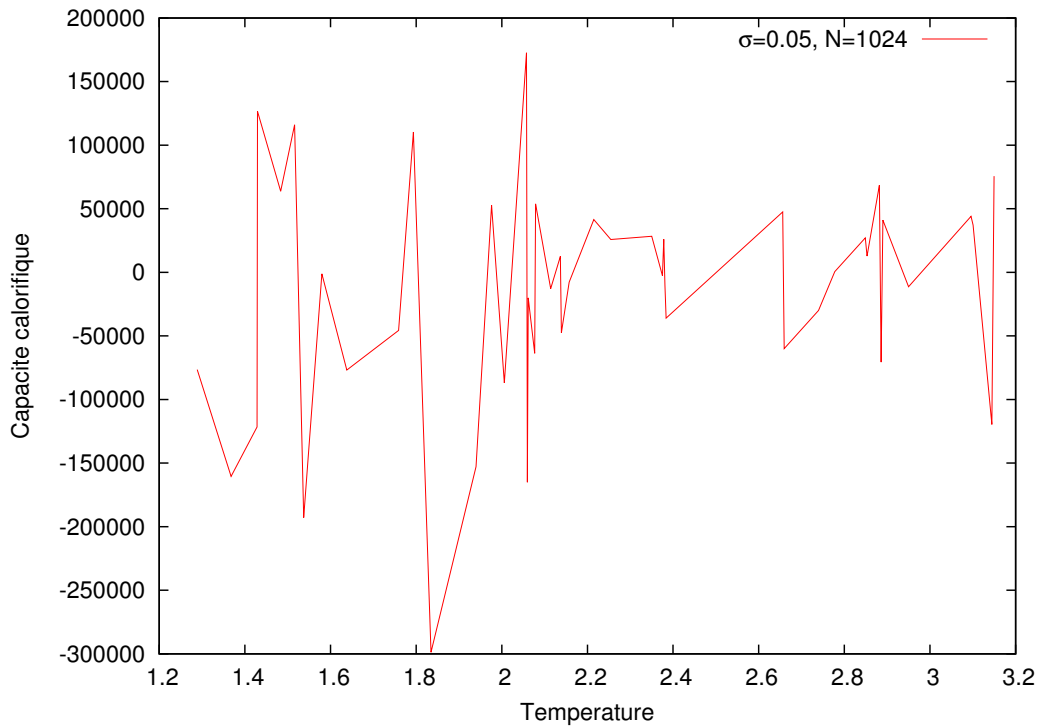


FIGURE 5.5 – Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour $\sigma = 0.05$, $N = 1024$ avec $\epsilon_0 = 0$.

L'augmentation du degré de désordre σ avec $\epsilon_0 = 10^{-1}$ va engendrer une diminution de la température de transition en allant vers les basses températures (FIGURES 5.7, 5.8, 5.9, 5.10, 5.11).

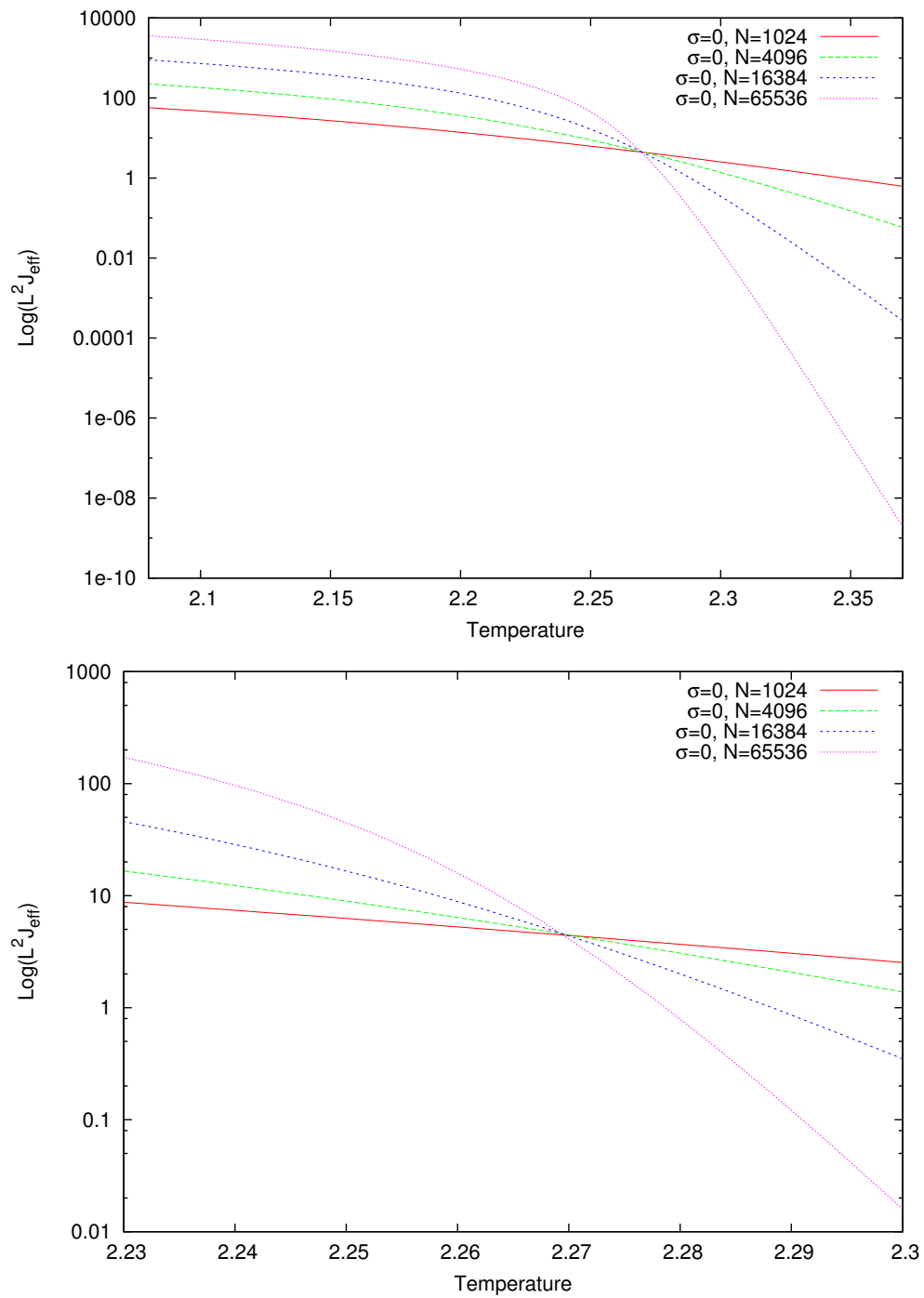


FIGURE 5.6 – Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0$.

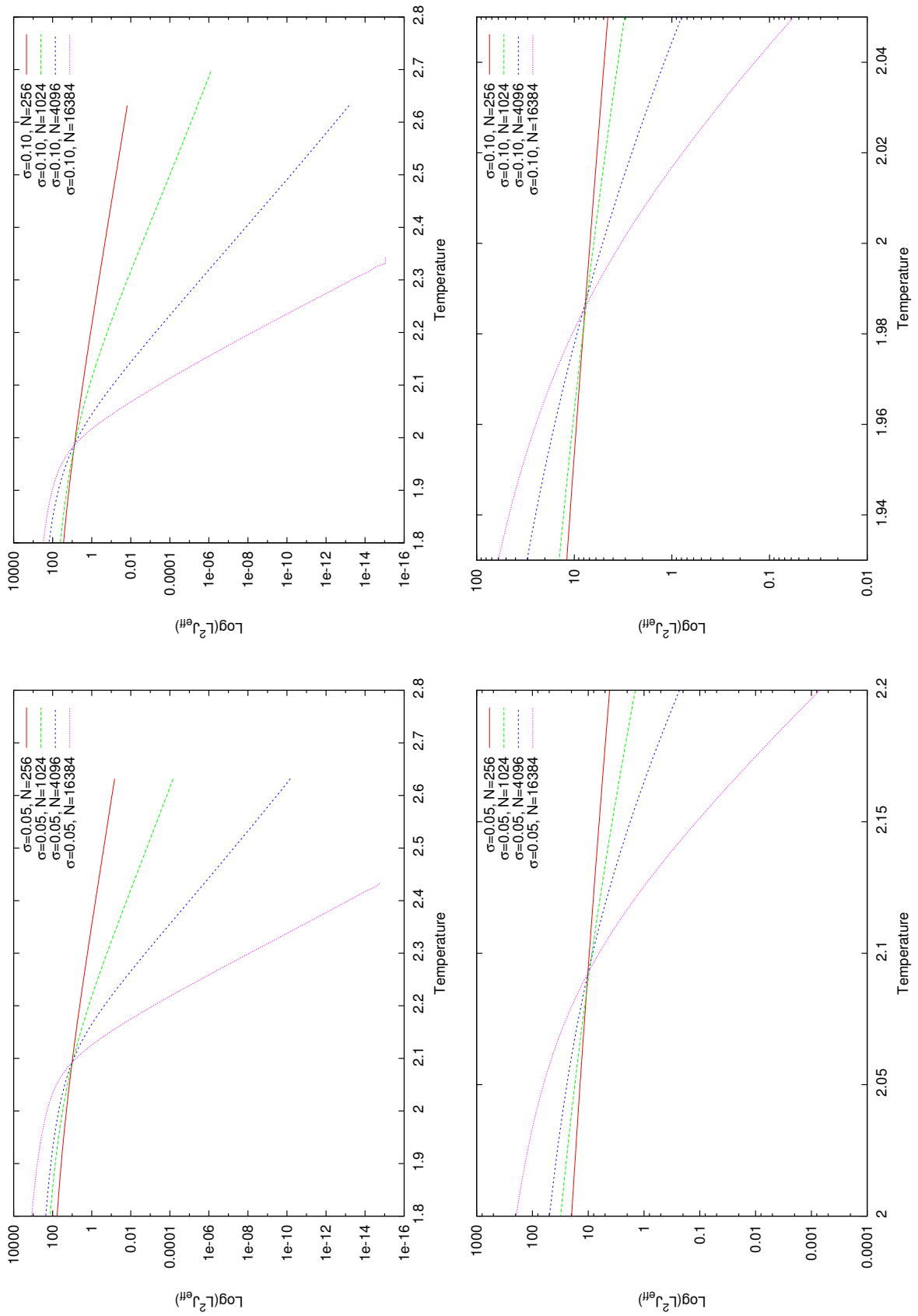


FIGURE 5.7 – Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.05$ et $\sigma = 0.10$.

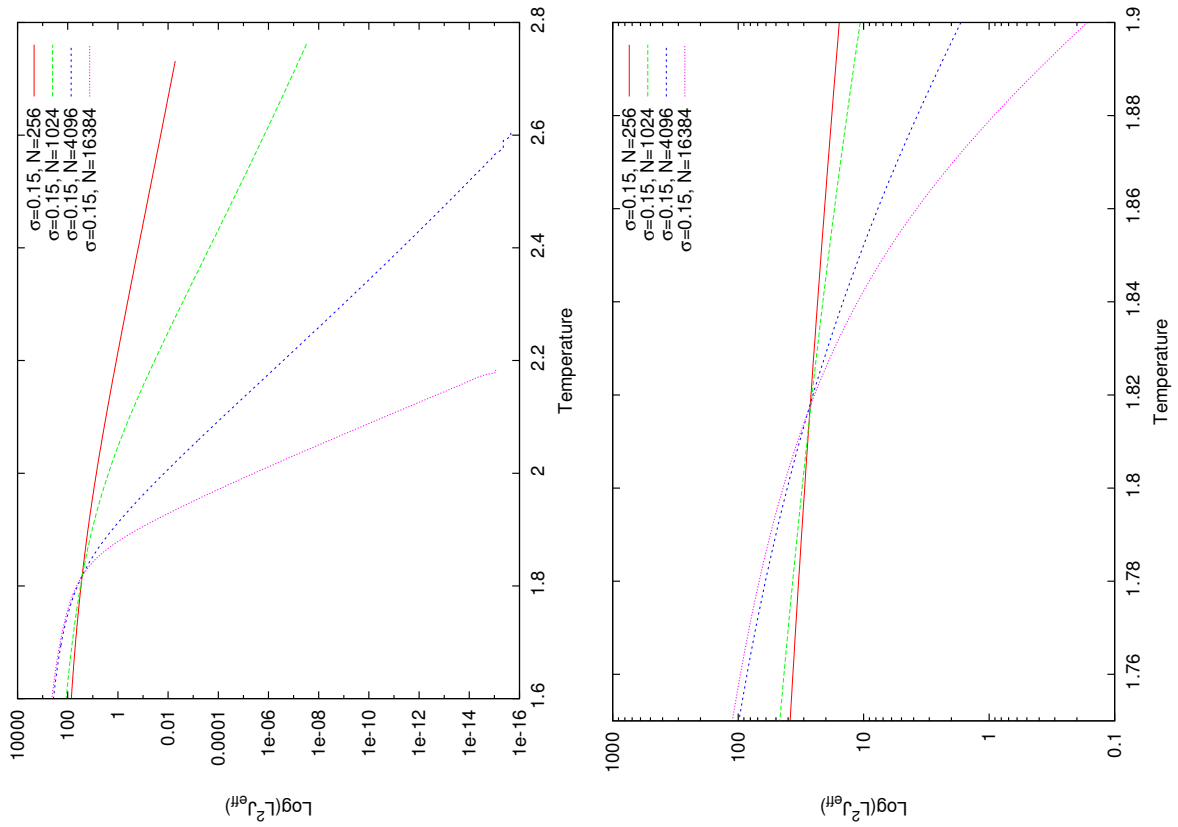
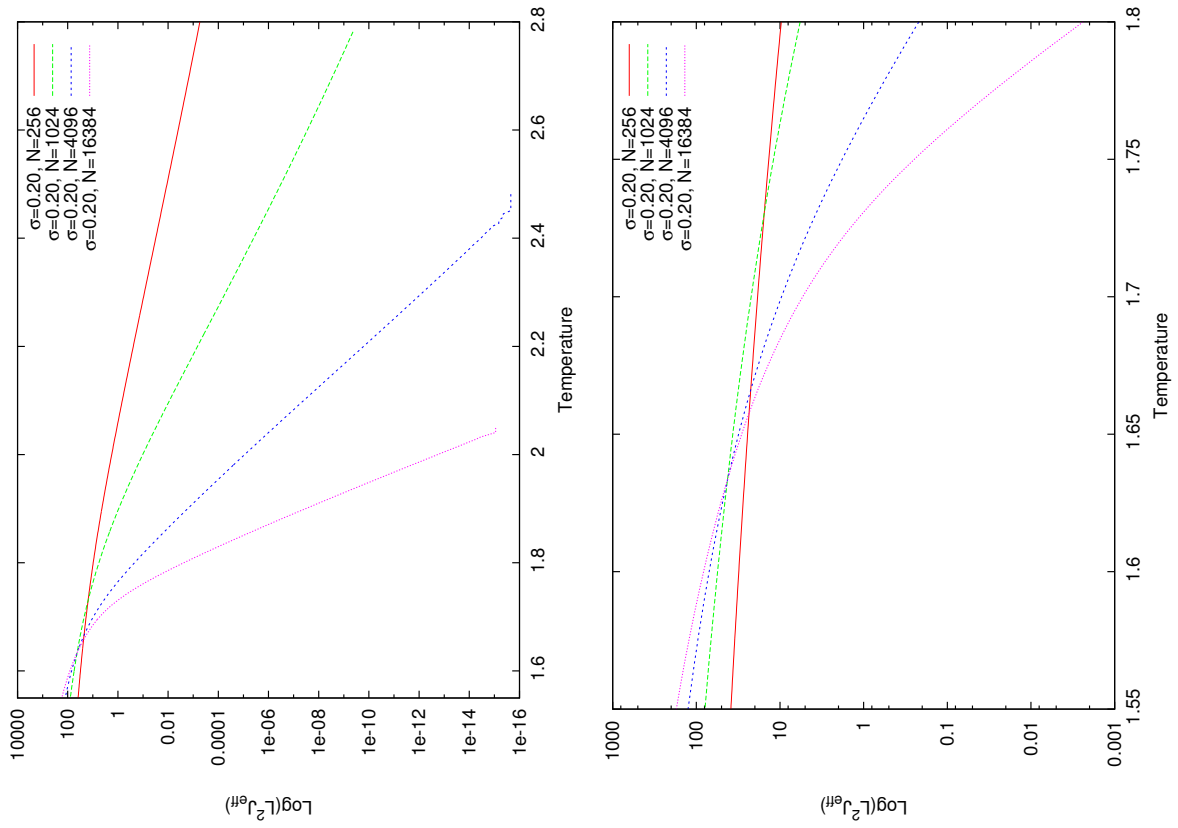


FIGURE 5.8 – Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.15$ et $\sigma = 0.20$.

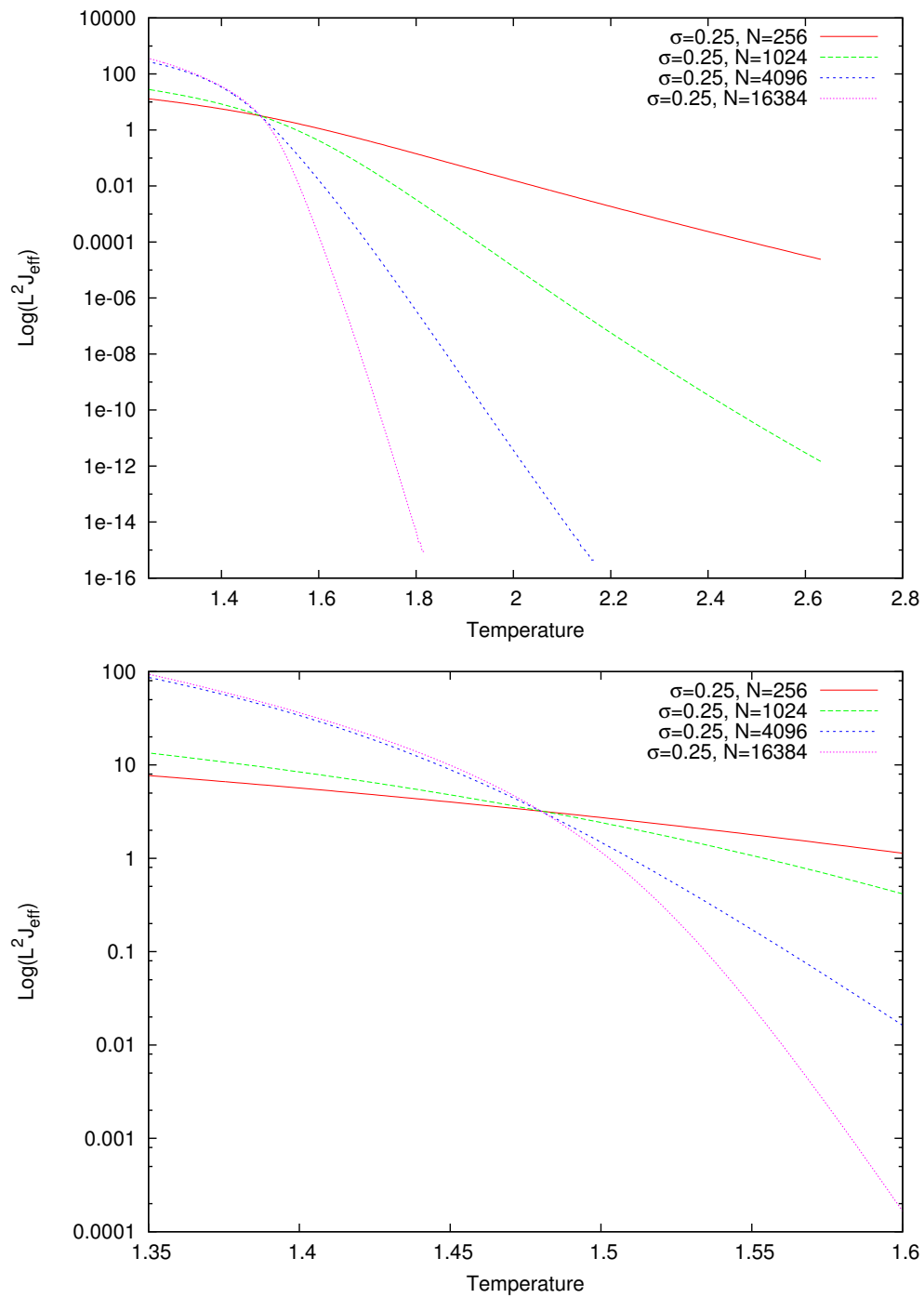


FIGURE 5.9 – Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.25$.

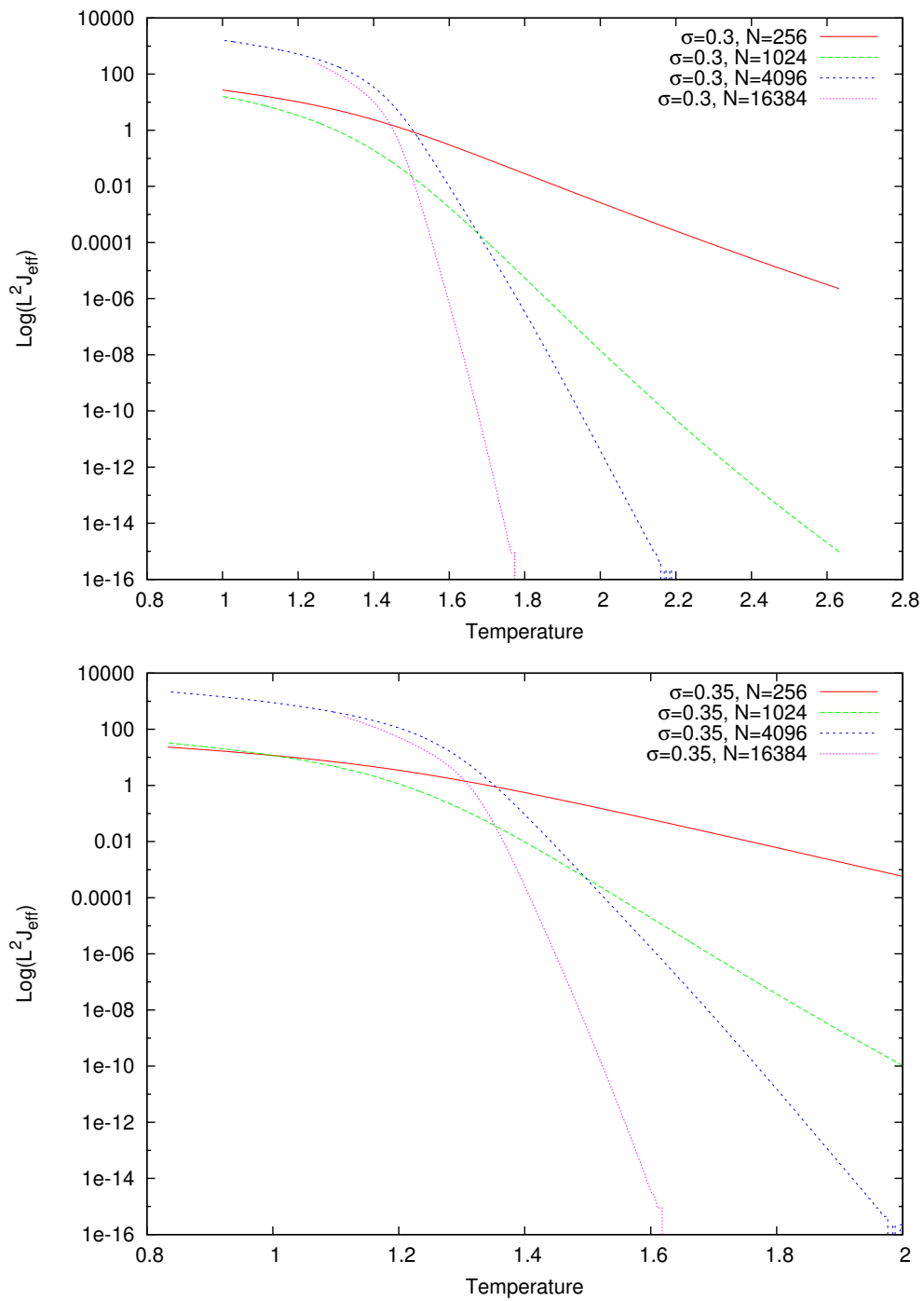


FIGURE 5.10 – Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.3$ et $\sigma = 0.35$.

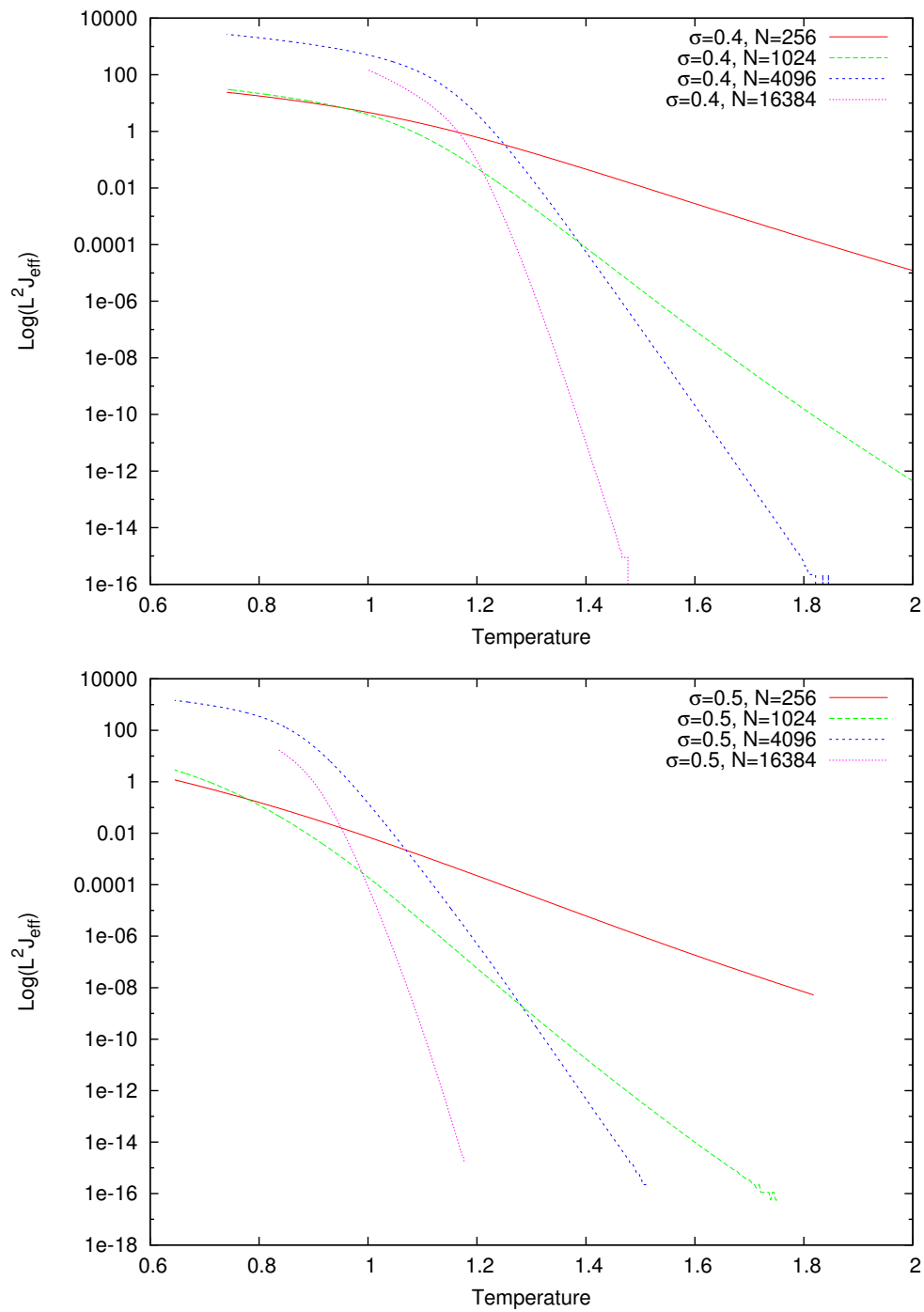


FIGURE 5.11 – Détermination de la température critique en utilisant la méthode du \mathcal{J}_{eff} pour $\sigma = 0.4$ et $\sigma = 0.5$.

Au delà de $\sigma = 0.3$, l'intersection n'est plus significative et les courbes ne s'intersectent pas à un point unique (FIGURES 5.10, 5.11). La méthode du \mathcal{J}_{eff} reste incapable de déterminer la valeur de la température de transition. Pour palier cette contrainte, la méthode du $C_v(max)$ (méthode B) reste intéressante.

TABLE 5.1 – Valeurs la température critique T_c déterminée par les deux méthodes pour différentes concentration de lien.

σ	T_c (méthode A)	T_c (méthode B)
0.00	2.2695	2.2624
0.05	2.0924	2.1321
0.10	1.9730	1.9960
0.15	1.8180	1.8621
0.20	1.6330	1.6806
0.25	1.4800	1.6077
0.30	/	1.4749
0.35	/	1.3315
0.40	/	1.1962
0.45	/	1.0604
0.50	/	0.9250

La FIGURE 5.12 représente une comparaison de la variation de T_c en fonction de σ entre la méthode de *Frank et Lobb* (FLIsing) et celle de *Monte Carlo* (MCIsing). La pente de T_c en fonction de σ calculée par la méthode de FLIsing vaut 3.1318 ± 0.0820 dont s'approche du résultat trouvé par *Domany* [17] dont la valeur est de 3.145, et celle trouvé par la méthode MCIsing qui est de 3.1423 ± 0.0172 .

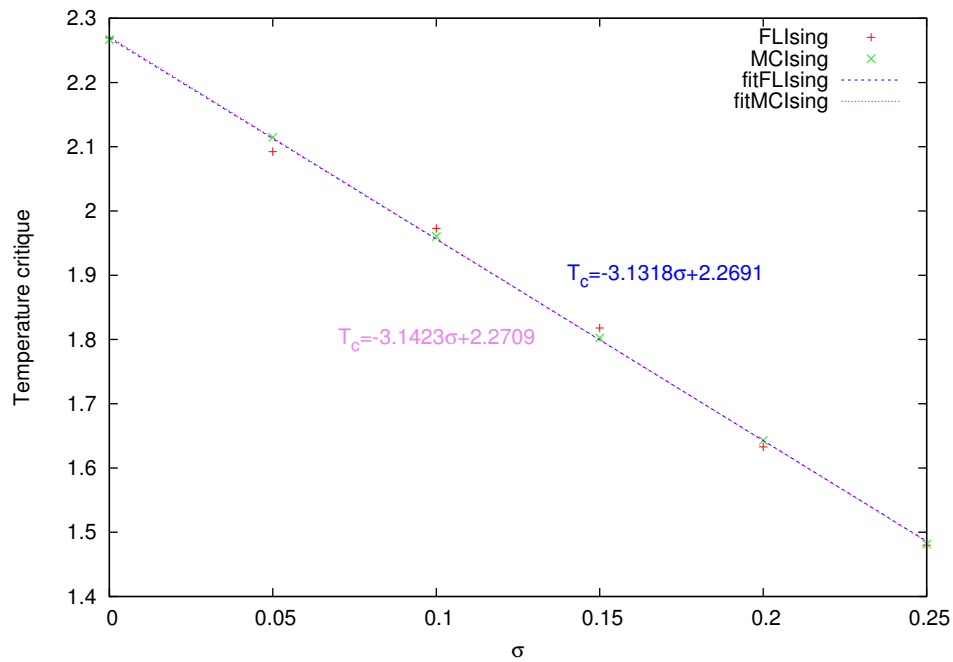


FIGURE 5.12 – Comparaison de la variation de la température critique T_c en fonction du paramètre de désordre σ entre la méthode de *Frank et Lobb* (FLIsing) et celle de *Monte Carlo* (MCIsing).

Les FIGURES 5.13, 5.14 illustrent la variation de la capacité calorifique en fonction de la température pour différents degrés de désordre avec deux valeurs différentes de ϵ_0 .

La plus grande taille dans la transition de phase est observée pour $\sigma \in [0.05-0.5]$ à $\epsilon_0 = 10^{-1}$ est $N = 16384$, et à $\epsilon_0 = 10^{-3}$ est $N = 256$.

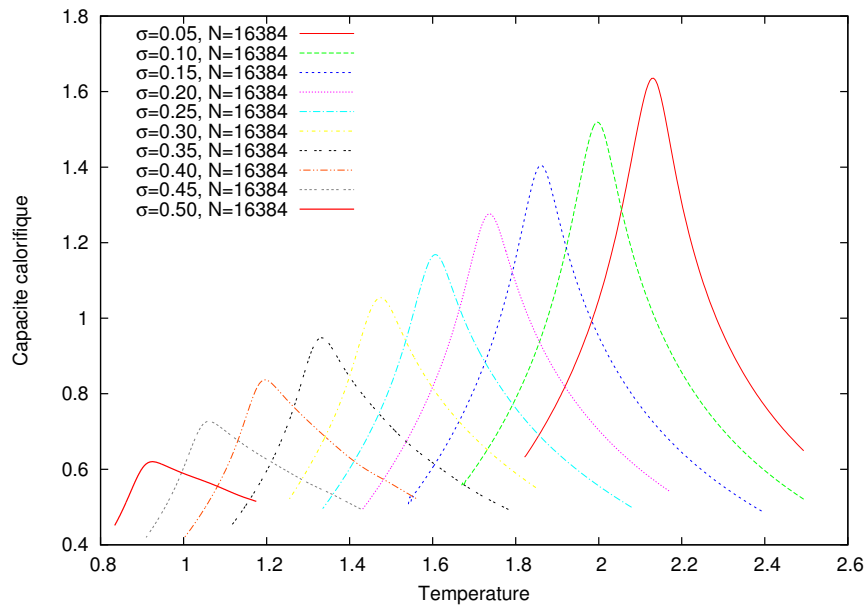


FIGURE 5.13 – Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différents σ à $N=16384$ avec $\epsilon_0 = 10^{-1}$.

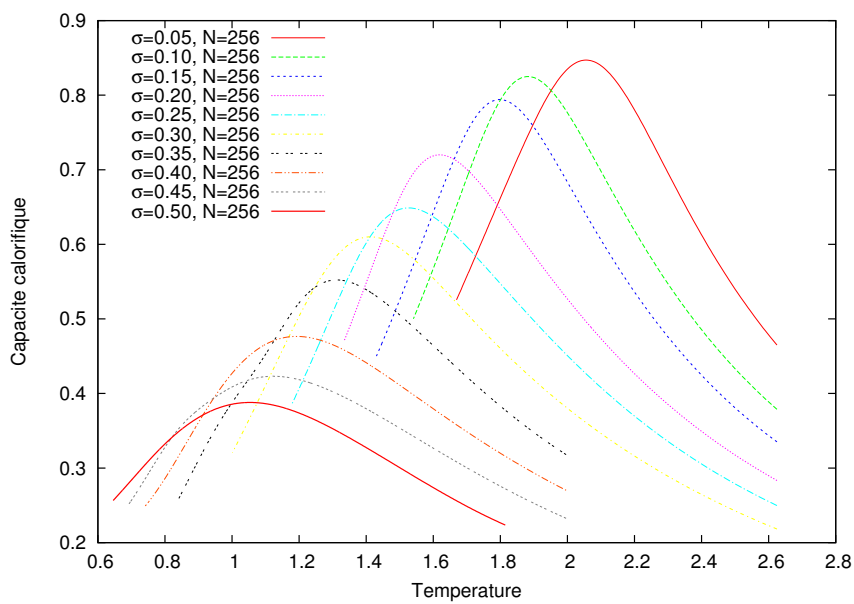


FIGURE 5.14 – Variation de la capacité calorifique $[\mathcal{J}/K_B^2]$ en fonction de la température $[\beta]$ pour différents σ à $N=256$ avec $\epsilon_0 = 10^{-3}$.

La FIGURES 5.15 montre la variation de $C_v(max)$ en fonction de σ pour différentes valeur de ϵ_0 . Les courbes se resserrent et convergent quand ϵ_0 devient de plus en plus petit.

Au delà de $\epsilon_0 = 10^{-8}$, aucune transition de phase n'est observée, ni pour de petits systèmes ni pour de grands systèmes à faible désordre. Cela est due à la nature du désordre qui engendre une accumulation rapide de l'erreur numérique. Ce qui provoque des instabilités numériques plus prononcées avec l'augmentation de la taille du système. Les calculs sont donc fiables pour des petits systèmes à très faible désordre.

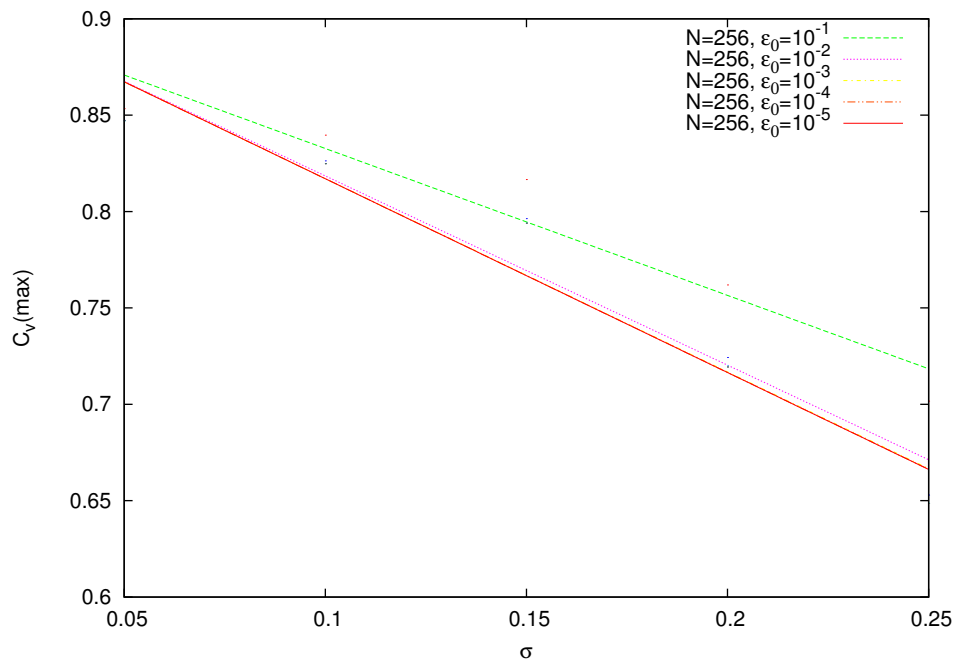


FIGURE 5.15 – Variation du maximum de la capacité calorifique en fonction de σ à $N=256$ pour différents ϵ_0 .

Avec la méthode de Frank et Lobb, même avec des liens faiblement coupés, on est arrivé à retrouver le même résultat que celui des liens coupés.

Conclusion

Tout au long de ce travail, la notion du désordre et son impact sur le modèle d'Ising bidimensionnel a été abordée. On s'est intéressé au comportement d'un tel modèle pour différents degrés de désordres.

Dans un premier temps, on a développé notre propre algorithme basé sur la méthode de Monte Carlo-Metropolis. La validation de cet algorithme a été faite par le biais de la détermination de la valeur de la température de transition T_c du modèle d'Ising régulier qui vaut 2.269β . Deux méthodes ont été évoquées. La première en utilisant le facteur de Binder et la deuxième par le biais de la valeur maximum du C_v .

L'insertion du paramètre de désordre σ a montré la diminution de la valeur de T_c en augmentant la valeur de σ . Les deux méthodes montrent le même résultat, à 1% d'incertitude, jusqu'à la valeur $\sigma = 0.35$. Avec la méthode utilisant le facteur de Binder, la valeur de la température critique T_c décroît rapidement en comparant à celle du maximum de C_v lors de l'augmentation de σ jusqu'à 0.5. La relation de Binder doit être revue pour un degré de désordre important.

Il s'est avéré que la méthode de Frank et Lobb inspirée de la transformation $Y - \nabla$ permet de calculer la fonction de partition du modèle d'Ising 2D. Des

résultats très précis ont été trouvés en absence du désordre. L'introduction d'un désordre fait ne nous permet pas de calculer les grandeurs thermodynamiques. Cela est dû aux instabilités numériques engendrés lors du processus employé par la méthode de Frank et Lobb. En principe, une augmentation de la précision de calcul permettrait de résoudre ce dilemme.



Calcul Parallèle avec MPI

Un code de calcul ou programme peut être écrit suivant deux modèles de programmation : séquentiel ou parallèle.

Dans le modèle séquentiel, un programme est exécuté par un unique processus. Ce processus tourne sur un processeur d'une machine et a accès à la mémoire du processeur. Il arrive que pour certains codes de calcul, la mémoire d'un seul processeur ne suffise plus et/ou le temps de calcul soit trop important. Dans ce cas là, le calcul parallèle s'avère une solution adéquate pour palier ce problème.

On distingue deux méthodes de parallélisation : Programmation parallèle avec OpenMP et Programmation parallèle avec MPI.

Dans un modèle de programmation parallèle par échange de messages (MPI), le programme est dupliqué sur plusieurs processus. Chaque processus exécute un exemplaire du programme et a accès à sa mémoire propre. De ce fait, les variables du programme deviennent des variables locales au niveau de chaque processus. De plus un processus ne peut pas accéder à la mémoire des processus voisins. Il peut toutefois envoyer des informations à d'autres processus à condition que ces derniers (processus récepteurs) soient au courant qu'ils devaient recevoir ces informations du processus émetteur.

La communication entre processus se fait uniquement par passage de messages entre processus (c'est à dire : envoi et réception de messages). Techniquement, cette communication se fait via des fonctions de la bibliothèque MPI appelées dans le programme. L'environnement MPI permet de gérer et interpréter ces messages. Cet ensemble repose sur le principe du **SPMD** (Single Program Multiple Data). Chaque processus dispose de ses propres données, sans accès direct à celles des autres.

Il se réfère très souvent à une architecture d'ordinateur à *mémoire distribuée*. Un ordinateur à mémoire distribuée est constituée d'un ensemble d'ordinateurs indépendants, appelés *nœuds*. Chaque nœud commence son propre programme et communique avec d'autres nœuds par l'envoi et la réception de messages par un certain nombre de mécanismes de communication, Gigabit Ethernet (TCP/IP), ou à travers des interconnexions à haute vitesse tels que *Myrinet* et *infiniband*.

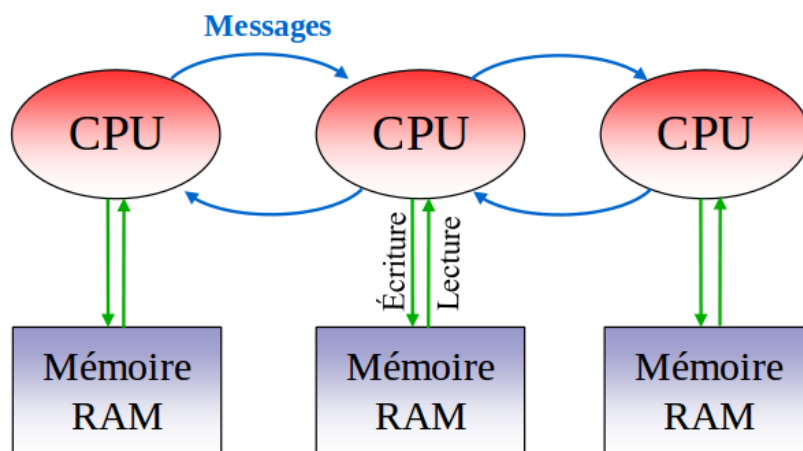


FIGURE A.1 – Mémoire distribuée

A.1 Bibliothèque MPI

La bibliothèque MPI est constituée de plusieurs routines classées en plusieurs catégories. Il y a celles qui traitent de

1. l'environnement MPI ;
2. des communications point à point ;
3. des communications collectives ;

A.1.1 Environnement MPI

Pour utiliser la bibliothèque MPI, le programme source doit impérativement contenir :

- L'appel au module MPI : **include mpif.h** en fortran77, **use MPI** en fortran90, **include mpi.h** en C/C++.
- l'initialisation de l'environnement via l'appel à la subroutine **MPI_INIT(code)**. Cette fonction retourne une valeur dans la variable code. Si l'initialisation s'est bien passée, la valeur de code est égale à celle dans **MPI_SUCCESS**.
- La désactivation de l'environnement via l'appel à la subroutine **MPI_FINALIZE (code)**. L'oubli de cette subroutine provoque une erreur.

Une fois l'environnement MPI initialisé, on dispose d'un ensemble de processus actifs et d'un espace de communication au sein duquel on va pouvoir effectuer des opérations MPI . Ce couple (processus actifs, espace de communication) est appelé *communicateur*.

Le communicateur par défaut est **MPI_COMM_WORLD** et comprend tous les processus actifs. Il est initialisé lors de l'appel à la fonction **MPI_INIT()** et désactivé par l'appel à la fonction **MPI_FINALIZE()**. On peut connaître le nombre de processus actifs gérés par un communicateur avec la fonction **MPI_COMM_SIZE**

(*comm,nb_procs,code*) ainsi que le rang (ou numéro) d'un processus avec la fonction **MPI_COMM_RANK** (*comm,rang,code*).

- **comm**(in) est en entier désignant le communicateur,
- **nb_procs**(out) est en entier donnant le nombre de processus,
- **rang**(out) est un entier indiquant le rang du processus. Il est important dans le sens où il sert lui d'identificateur dans un communicateur.
- **code**(out) est un entier retournant un code d'erreur.

A.1.2 Communication point à point

La communication point à point est une communication entre deux processus (émetteur \Leftrightarrow récepteur). Ce message doit contenir un certain nombre d'informations pour assurer une bonne réception et interprétation par le récepteur, à savoir :

- Le rang du processus émetteur (*rang_proc_source*),
- Le rang du processus récepteur (*rang_proc_dest*),
- L'étiquette du message (*tag_emis* pour message émis, *tag_recu* pour message reçu),
- Le nom du communicateur (*comm*),
- Le type des données échangées (*type_emis* pour message émis, *type_recu* pour message reçu),
- Le nom données échangées (*val_emis* pour message émis, *val_recu* pour message reçu).
- La taille des données échangées (*taille_emis* pour message émis, *taille_recu* pour message reçu) (scalaire, vecteur, matrice, ...).

Plusieurs modes de transfert sont possibles pour échanger des messages :

1. **MPI_SEND**(*val_emis,taille_emis,type_emis,rang_proc_dest,tag_emis,comm,code*) pour l'envoi du message suivi de **MPI_RECV**(*val_recu,taille_recu,type_recu,*

rang_proc_dest, tag_recu, comm, statut, code) pour la réception. Quand un message est envoyé, il faut être sûr qu'il a été bien reçu.

- **val_emis**(in) : élément envoyé,
- **taille_emis**(in) : entier indiquant la taille de l'élément envoyé (scalaire, vecteur, ...),
- **type_emis**(in) : type de l'élément envoyé,
- **rang_proc_dest**(in) : entier indiquant le rang du processus qui reçoit le message,
- **tag_emis**(in) : entier désignant l'étiquette du message,
- **comm**(in) : entier désignant le communicateur (*MPI_COMM_WORLD* par défaut),
- **code**(out) : entier donnant un code d'erreur,
- **val_recu**(in) : élément reçu,
- **taille_recu**(in) : entier indiquant la taille de l'élément reçu (scalaire, vecteur, ...). Il doit correspondre à celui indiqué dans *taille_emis*,
- **type_recu**(in) : type de l'élément reçu. Il doit aussi correspondre à celui indiqué dans *type_emis*,
- **tag_recu**(in) : entier désignant l'étiquette du message,
- **statut**(out) : tableau d'entiers de taille *MPI_STATUS_SIZE* contenant de nombreuses informations sur le message.

2. **MPI_SENDRECV**(*val_emis, taille_emis, type_emis, rang_proc_dest, tag_emis, val_recu, taille_recu, type_recu, rang_proc_source, tag_recu, comm, statut, code*) pour l'envoi et la réception de messages. Attention, si on utilise la même variable pour l'envoi et la réception (*val_emis*= *val_recu*), il y a écrasement.

rang_proc_source(in) est un entier indiquant le rang du processus qui a émis le message.

3. **MPI_SENDRECV_REPLACE**(*val_emis_recu, taille_emis_recu, type_emis_recu,*

rang_proc_dest, tag_emis, rang_proc_source, tag_recu, comm, statut, code) pour l'envoi et la réception de messages en utilisant le même variable *val_emis_recu* pour l'envoi et la réception. Cette fois-ci il n'y a pas d'écrasement.

A.1.3 Communications collectives

Elles permettent de communiquer en un seul appel avec tous les processus d'un communicateur.

Diffusion générale : `MPI_BCAST()`

Cette fonction permet à un processus de diffuser (BCAST pour broadcast) un message à tous les processus du communicateur indiqué, y compris à lui-même (FIGURE A.2). `MPI_BCAST(val_emis, taille_emis, type_emis, rang_proc_source, comm, code)`.

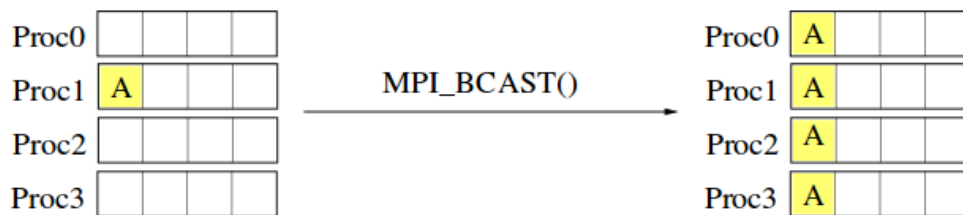


FIGURE A.2 – Fonction `MPI_BCAST()`. Le processus Proc1 diffuse la donnée A (stockée dans sa mémoire) à tous les processus Proc0 à Proc3

Diffusion sélective de données réparties : `MPI_SCATTER`

Cette fonction permet à un processus de diffuser des données aux processus du communicateur indiqué de façon sélective. En fait le processus émetteur dispose de données qu'il répartit. Chaque processus (émetteur même compris) reçoit un paquet de données différent (FIGURE A.3). `MPI_SCATTER(val_emis, taille_emis, type_emis, val_recu, taille_recu, type_recu, rang_proc_source, comm, code)`.

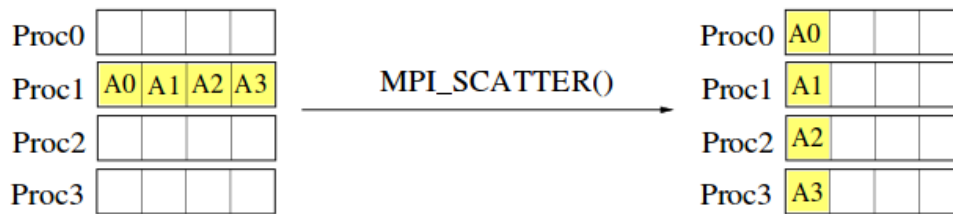


FIGURE A.3 – Fonction *MPI_SCATTER()*. Le processus Proc1 diffuse ses données A0,...,A3 (stockées dans sa mémoire) à tous les processus Proc0 à Proc3 de façon répartie.

Collecte de données réparties : *MPI_GATHER()*

Cette fonction permet au processus récepteur de collecter les données provenant de tous les processus (lui-même compris). Attention, le résultat n'est connu que par le processus récepteur (FIGURE A.4). *MPI_GATHER(val_emis, taille_emis, type_emis, val_recu, taille_recu, type_recu, comm, code)*.

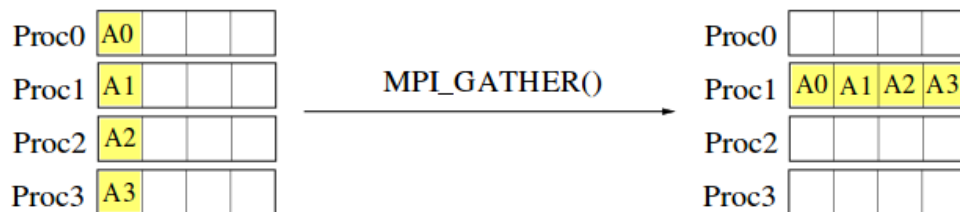


FIGURE A.4 – Fonction *MPI_GATHER()*. Le processus Proc1 collecte les données A0,...,A3 provenant des processus Proc0 à Proc3.

Collecte générale : *MPI_ALLGATHER()*

Cette fonction effectue la même chose que la fonction *MPI_GATHER*, excepté que le résultat de la collecte est connue de tous les processus du communicateur (FIGURE A.5). Ce serait l'équivalent d'un *MPI_GATHER* suivi d'un *MPI_BCAST*.

MPI_ALLGATHER(*val_emis*, *taille_emis*, *type_emis*, *val_recu*, *taille_recu*, *type_recu*, *rang_proc_dest*, *comm*, *code*).

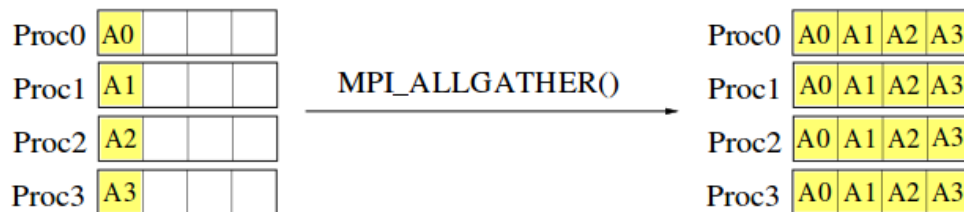


FIGURE A.5 – Fonction *MPI_ALLGATHER*(*val_emis*, *taille_emis*, *type_emis*, *val_recu*, *taille_recu*, *type_recu*, *rang_proc_dest*, *comm*, *code*). Le processus Proc1 collecte les données A0,...,A3 provenant des processus Proc0 à Proc3 et le diffuse à tous les processus.

Synchronisation globale : **MPI_BARRIER**

Cette fonction bloque les processus à l'endroit où elle est appelée dans le programme. Les processus restent en attente au niveau de cette barrière jusqu'à ce qu'ils y soient tous parvenus. Ensuite, ils sont libérés. **MPI_BARRIER**(*comm*, *code*).

A.1.4 Opérations de réduction et communications collectives

Une réduction consiste à appliquer une opération à un ensemble d'éléments pour obtenir un scalaire. Cela peut être la somme des éléments d'un vecteur ou la valeur maximale d'un vecteur.

TABLE A.1 – Quelques opérations de réduction prédéfinies.

Nom	Opération
MPI.SUM	Somme des éléments
MPI.PROD	Produit des éléments
MPI.MAX	Recherche du maximum
MPI.MIN	Recherche du minimum

Certaines fonctions MPI permettent de faire des opérations de réductions en plus des communications collectives. C'est le cas des fonctions :

- **MPI_REDUCE()** qui permet de faire des opérations de réduction sur des données réparties. Le résultat de l'opération de réduction est récupéré sur un seul processus. **MPI_REDUCE**(*val_emis*,*val_recu*, *taille_emis*, *type_emis*, *operation*,*rang_proc_dest*, *comm*,*code*)

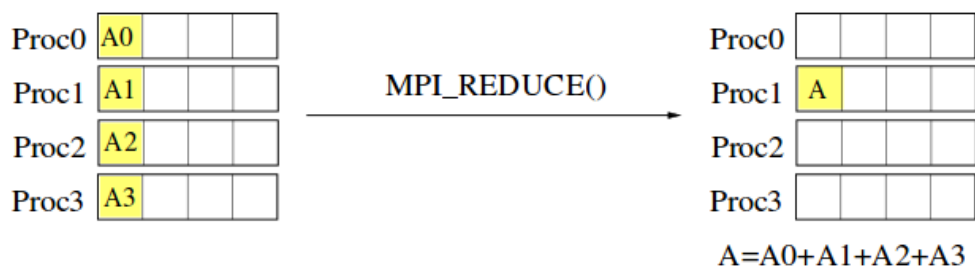


FIGURE A.6 – Fonction `MPI_REDUCE()`. Le processus Proc1 collecte les données `A0, ..., A3` provenant des processus Proc0 à Proc3 et fait une opération de réduction.

- **MPI_ALL_REDUCE()** qui permet de faire les mêmes opérations de réduction que `MPI_REDUCE()`. La différence est que le résultat de l'opération de réduction est connu de tous les processus d'un même communicateur. **MPI_ALL_REDUCE**(*val_emis*,*val_recu*,*taille_emis*,*type_emis*, *operation*,*comm*,*code*).

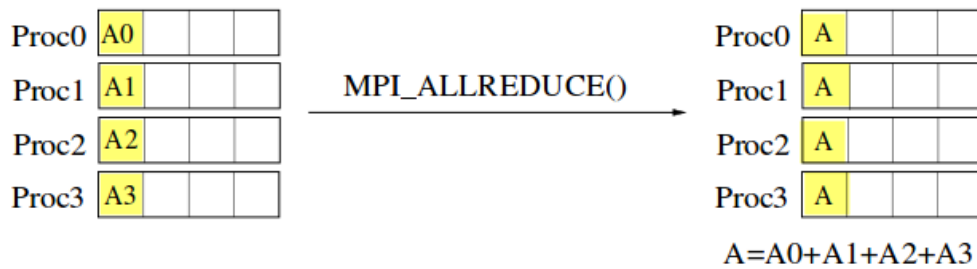


FIGURE A.7 – Fonction `MPI_ALLREDUCE()`. Opération de réduction et diffusion du résultat à l'ensemble des processus.

A.2 Optimisation d'un programme parallèle

L'optimisation d'un code séquentiel concerne la minimisation du temps de calcul. Lorsqu'on parallélise un code, un autre temps s'ajoute au temps de calcul, c'est le temps de communication entre les processus :

$$\text{temps total} = \text{temps calcul} + \text{temps communication}$$

L'optimisation d'un code parallèle consiste donc à minimiser le temps de communication entre les processus. Celui-ci peut être mesuré via la fonction `MPI_WTIME()`. Avant de se lancer dans l'optimisation d'un programme parallèle, il faut d'abord comparer le temps de calcul et le temps de communication au temps total de simulation. Si le temps de communication est prépondérant devant le temps de calcul, alors on peut passer à la phase d'optimisation. Cette étape consiste à réduire le temps de communication. Celui-ci contient un temps de préparation du message et un temps de transfert. Le temps de préparation contient un temps de latence pendant lequel les paramètres réseaux sont initialisés. Le reste du temps de préparation des messages (temps de surcoût) est lié à l'implémentation MPI et au mode de transfert utilisé.

Il existe plusieurs possibilités pour optimiser le temps de communication,

parmi elles :

- Recouvrir les communications par des calculs.
- Limiter les modes de transfert qui utilisent la recopie du message dans un espace mémoire temporaire (Buffering).
- Limiter les appels répétitifs aux fonctions de communication MPI (qui coûtent cher en temps).

A.3 Modes d'envoi des messages avec MPI

A.3.1 Standard

MPI choisit ou non de recopier le message à envoyer dans une zone mémoire tampon du processus émetteur. S'il y a recopie, l'action d'envoi se termine lorsque la recopie est terminée, donc avant que la réception du message ait commencé. Ceci permet de découpler l'envoi de la réception (asynchrone). S'il n'y a pas recopie du message, l'envoi s'achève une fois que le processus destinataire a bien reçu le message. L'envoi et la réception sont alors couplés (synchrone). MPI bascule automatiquement du mode asynchrone au mode synchrone suivant la taille des messages à transférer. Pour les petits messages, il y a recopie dans une zone tampon et pour les messages de grande taille, il n'y a pas de recopie.

A.3.2 Synchrone

Ou synchrone, l'utilisateur impose un couplage entre l'envoi et la réception. L'envoi peut commencer avant même que l'opération de réception ait été initialisée. L'opération d'envoi s'achève une fois que l'opération de réception a été postée (par le processus récepteur) et le message a été bien reçu.

A.3.3 Buffered

L'envoi du message s'achève une fois que la copie du message dans une zone tampon est terminée. L'envoi et la réception sont découplés. Attention, l'utilisateur doit effectuer lui-même la copie. Ce type d'envoi est déconseillé.

TamiHPC, un ordinateur de haute performance

TamiHPC est un ordinateur de haute performance. Le système appartient à la catégorie de *Shared Memory* (mémoire partagée) et utilise la bibliothèque *MPI* (Message Passing Interface) afin d'autoriser la communication entre les différents nœuds. L'utilisation primaire prévue du TamiHPC est de résoudre les problèmes liés à la Physique Statistique qui nécessitent un grand nombre d'échantillon pour converger vers des résultats appréciables.



FIGURE B.1 – TamiHPC

TamiHPC est composé de 36 diskless nodes (nœud sans disque dure) divisés en deux parties (16+20 nœuds). Chaque un d'entre eux est doté d'un processeurs DualCore 3 Ghz et 1 Go de RAM.



FIGURE B.2 – Les switches

La connexion entre les nœuds est établit par le biais d'un switch Gigabits CISCO et un autre Mégabits TENDA.



FIGURE B.3 – Serveur Debian

Le serveur possède un processeur Core2Duo 2.4Ghz et 2Go de RAM. Il tourne sous un système Linux Debian.

La consommation moyenne hors calcul est de 8 ampères. En fonction, il a besoin de 13 ampères. Le TamiHPC atteint en moyenne les 60 GFLOPS¹. Il

1. Un FLOPS signifie FLoating-point Operations Per Second

contient 36 Go de RAM. Ce type d'installation est peu coûteux, ne nécessite qu'une simple prise murale (3kW) et ne requière aucun système de refroidissement supplémentaire.

HPC Test

Quantity of processors = 93

Calculation time = 0.02 seconds

Cluster speed= 59445.5 MFLOPS



Publications

- I. Zergoug, R. Bouamrane, *Binder cumulant for bond diluted Ising model*, International Review of Physics (I.RE.PHY.), Vol.8, N ° 1, 15 (2014).
- Zergoug Ismail et al, *Bond diluted Ising model in 2D*, 1st International Conference on Numerical Physics, October 13-15, 2012 USTOMB, Oran, Algeria, EPJ Web of Conferences 44, 01004 (2013).
- Zergoug Ismail et al, *Bond diluted Ising model in 2D*, Présentation Poster, 1st International Conference on Numerical Physics, October 13-15, 2012 USTOMB, Oran, Algérie.
- Zergoug Ismail, *Modèle d'Ising dilué : Étude numérique sur super calculateur*, Salon de l'Innovation Universitaire, Juin 2012, Centre des Conventions d'Oran, Algérie.

Bond diluted Ising model in 2D

ZERGOUG Ismail^{1,a}, BOUAMRANE Rachid¹, and ADDI Djamel¹

Laboratoire d'Etude Physique des Matériaux (LEPM)
USTOMB Université des Sciences et de la Technologie Mohamed Boudiaf
PB 1505 El Mnaouer Oran Algeria

Abstract. The bond diluted Ising model is studied by Monte Carlo method. The simulation is carried out on a two dimensional square lattice with missing bonds and free boundary conditions. The aim of this work is to investigate the thermodynamical properties of this model for different disorder degree parameter σ . The critical temperature is determined from the Binder cumulant and is shown to decrease as the disorder parameter σ increases linearly.

1 Introduction

The 2D Ising model has been solved exactly by Onsager back on 1944 [1] and still holds nowadays an important place in the physics of phase transition and beyond. This model, in the two dimensional case, consists on a set of N spins located at fixed nodes. In its simplest form, each spin has two values (+1 or -1) and interacts equally with its four nearest neighbours. With no external magnetic fields, the Hamiltonian of the system \mathcal{H} is:

$$\mathcal{H} = -\mathcal{J} \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (1)$$

The exchange coupling constant (a unique interaction factor) between nearest neighbours $\langle ij \rangle$ is represented by \mathcal{J} while S_i and S_j are the respective nearest neighbour spins.

Disordered systems have been the subject of several studies due to important effect of disorder on their thermodynamic behaviour in comparison to ordered ones [10]. Disorder can be manifested in different manner: random field [5], random interaction factors [7], site diluted [4] [8] (some of the sites are randomly occupied by either vacant lattice sites or by non magnetic atoms in the presence of magnetic ones), bond diluted [6] [3] (bonds are randomly removed from the system), etc.

In this work, we use the Binder cumulant to determine the critical temperature in the case of randomly bond diluted systems. This type of disorder was studied for the first time by D.Zobin [2] only for periodic boundary conditions. In the same context, another author has shown that the critical region becomes narrower as the concentration of bonds decreases [12].

The purpose of this paper is to report preliminary results of Monte Carlo simulations of the thermal and magnetic properties of the 2D bond diluted Ising model as done by [2] using a different approach. For now, the simulation was carried out with relatively small systems and already we have obtained interesting results worth mentioning. The value of the critical temperature at the phase transition is determined using the fourth-order cumulant Binder [9] (only free boundary conditions are considered).

^a e-mail: zergoug.ismail@gmail.com

2 Model and simulation

The Hamiltonian of the model considered here reads[2]:

$$\mathcal{H} = - \sum_{i,j} \mathcal{J}_{i,j} S_i S_j \quad (2)$$

where the exchange coupling constant $\mathcal{J}_{i,j}$ is 0 for non-nearest-neighbours and 1 or 0 with probabilities σ or $1 - \sigma$ respectively. Free boundary conditions are used, and the regular square lattice size is $L = \sqrt{N}$ (where N is the total number of spins in the system). The value of the critical temperature T_c is determined using the Binder cumulant $U(T, L)$ defined as [9]

$$U(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3\langle M^2 \rangle^2} \quad (3)$$

where $\langle M^2 \rangle$ and $\langle M^4 \rangle$ denote thermal averages of the second and fourth moments of the total magnetization M . The $U(T, L)$ versus T curves for various L converge toward a fixed point for large L values. The reached fixed point is by definition the T_c (Fig3).

We have performed the Monte Carlo simulation using the single spin flip algorithms [11] where we divided the equilibration process into *Timesteps*, the Monte Carlo steps per spin. The measurement of the thermodynamic quantities are carried out after many Timesteps, the *Timeslice*. To go beyond the thermodynamic equilibration stage, measurements are taken after four Timeslices and averaged at each Timeslice over a larger number of samples is done. When the average energy difference between two successively Timeslices is lower than a certain fixed error value, the simulation is stopped. This process is repeated for several temperatures T .

We have computed the magnetization M and the specific heat C_v in the standard manner:

$$M = \frac{1}{N} \sum_i S_i \quad (4)$$

$$C_v = N\beta^2(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (5)$$

where N is the total number of spins system, $\beta = 1/k_B T$ (T is the temperature and k_B is the Boltzmann constant taken to unity here).

3 Results and discussions

The calculations were carried out for $\sigma = 1.0, 0.95, 0.90, 0.85$ and 0.80 using lattice sizes $L = 256, 1024$ and 4096 . 10000 samples were used for averaging.

The thermodynamic quantities are plotted in Fig1 and Fig2 for $L = 4096$ and for various disorder degree σ (the concentration of bond).

From Figure 3, we can get the value of the critical temperature T_c for different degree of disorder σ from the intersection of the cumulant for different sizes.

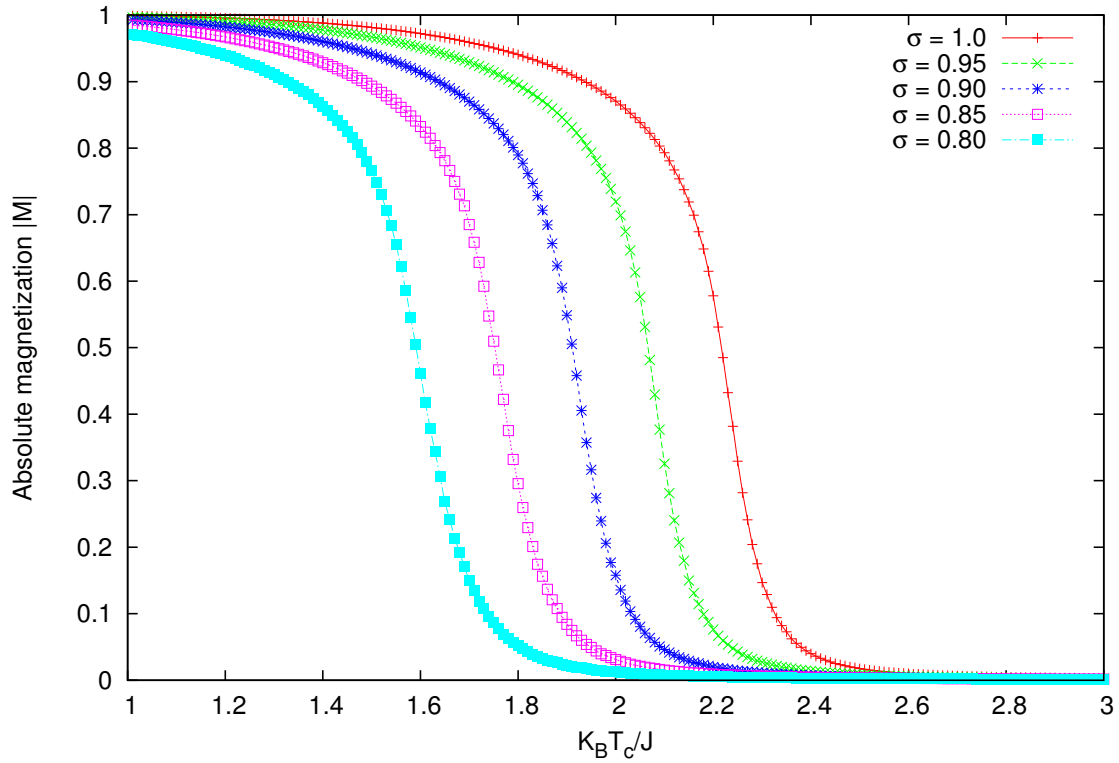


Fig. 1. The absolute magnetization $|M|$ as a function of the temperature

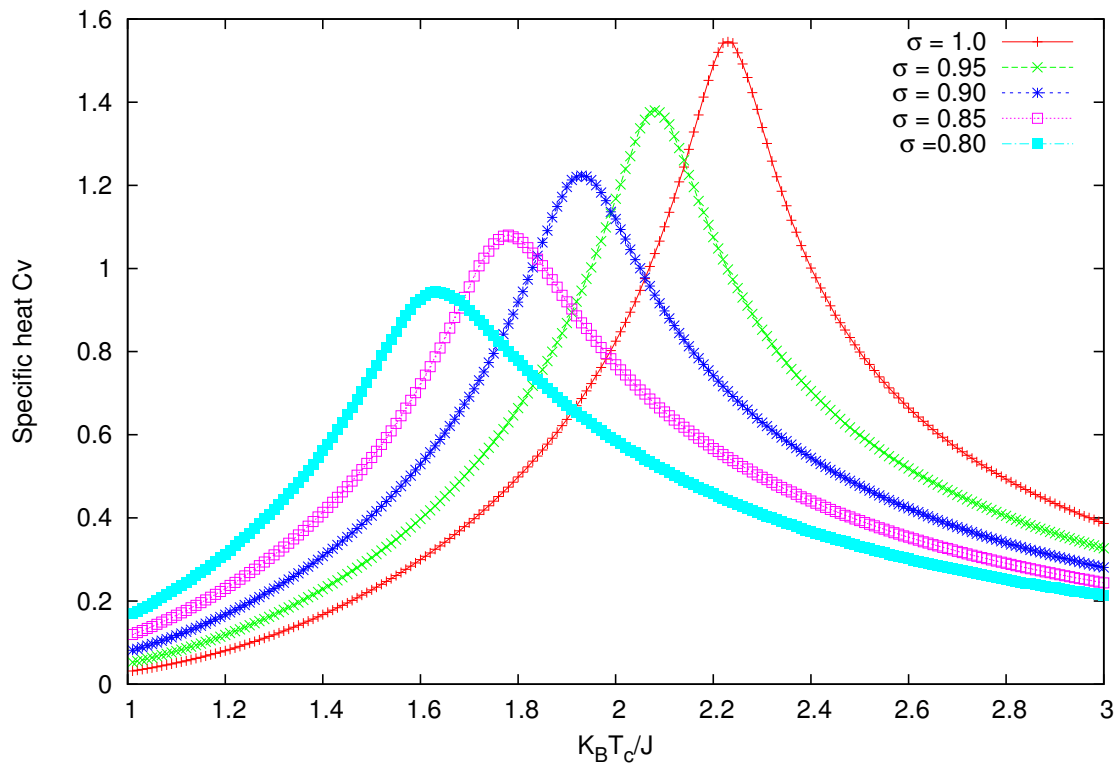


Fig. 2. The specific heat C_v as a function of the temperature

The critical temperature T_c has shown decrease linearly with respect to σ (fig 4). For $\sigma = 1.0$ (pure system), $T_c = 2.2686 \pm 0.0028$ which tends to the exact critical temperature $(2 / \ln(\sqrt{2} + 1) = 2.26918\dots)$ [1] for a larger lattice sizes and samples.

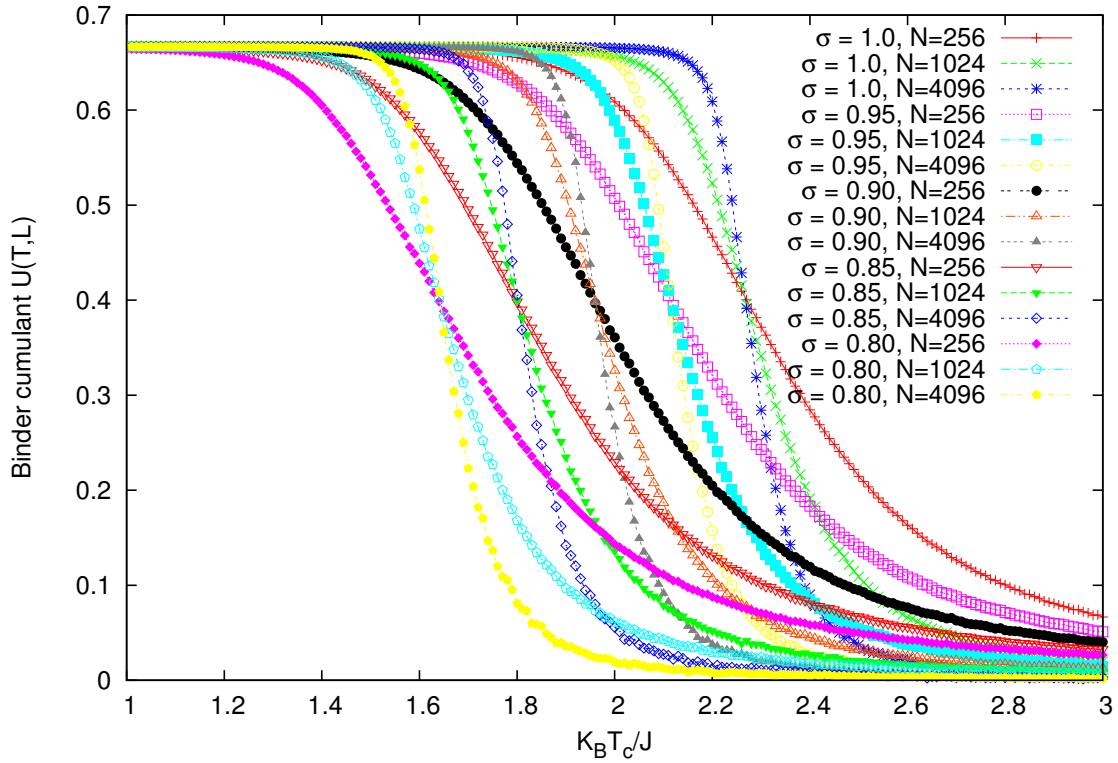


Fig. 3. The Binder cumulant $U(T, L)$ versus the temperature

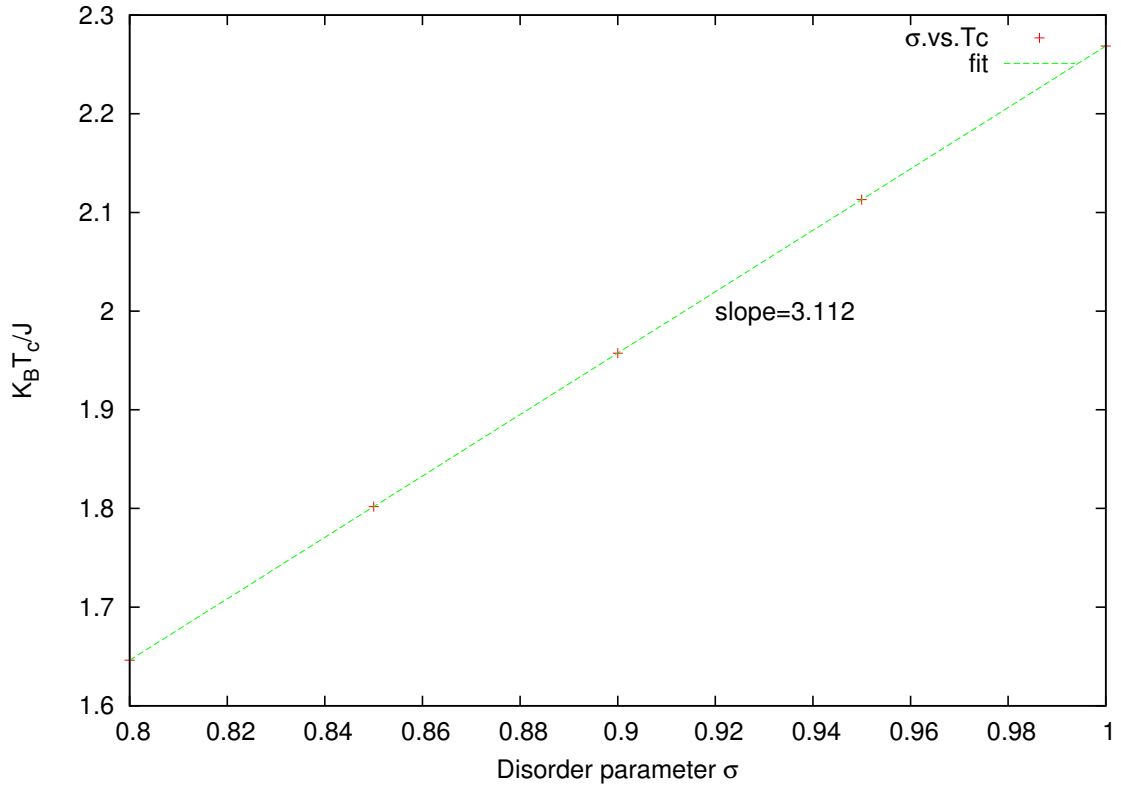


Fig. 4. The variation of the critical temperature relative to the disorder parameter σ

The slope of the $T_c(\sigma)$ line is found to be 3.112 ± 0.023 relative to that determined by Harris [13] which is 3.016 and for Jayaprakash [12] is 3.108. This value of the slope is calculated near the

bond concentration $\sigma = 1.0$. Domany [14] has determined the exact value of the slope near $\sigma = 0.5$ (critical bond concentration) which is equal to 3.145.

4 Conclusion

We have performed the Monte Carlo study for the bond diluted Ising model on the square lattice. The obtained results are in agreement with previous works [2], [3]. At this point, the effect of the free boundary conditions does not seem to affect the value of the critical temperature T_c . Further investigations are being done with larger system sizes and larger samples to get more precision in order to settle this issue.

References

1. L. Onsager, Physical Review **65**, (1944) 117.
2. D. Zolin, Physical Review B **18**, (1978) 2387.
3. Ioannis A. Hadjiagapiou, Physica A **390**, (2011) 2229.
4. L. F. da Silva et al, J.Phys, Condens.Matter **21**, (2009) 346005.
5. Ioannis A. Hadjiagapiou, Physica A **389**, (2010) 3945.
6. S. Davatolhagh, M.Moshfeghian, Physica A **389**, (2010) 3349.
7. ZHANG, X, NOVOTNY, M. A, Braz. J. Phys**36**, (2006) 664.
8. Ioannis A. Hadjiagapiou, Physica A **387**, (2008) 2256.
9. K. Binder, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter **43**, (1981) 119.
10. Ioannis A. Hadjiagapiou, Physica A **390**, (2011) 1279.
11. D. P. Landau and K. Binder, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge: University Press, 2000).
12. C. Jayaprakash, E. K. Riedel, M. Wortis, Phys.Rev B **18**, (1978) 2244.
13. A. B. Harris, J. Phys. C **7**, (1974) 1671.
14. E. Domany, J. Phys. C **11**, (1978) L337.

International Review of Physics (IREPHY)

Contents:

- A Studying of Some Physical and Mechanical Properties
for Hybrid Particular Composites Polyester** 1
by Kareem A. Jasim, R. S. Al-Khafaji
- Numerical Tribute to Achievements of Euler** 5
by Carlos Figueroa, Lamberto Castro, Julio C. Campos
- Binder Cumulant for Bond Diluted Ising Model** 15
by I. Zergoug, R. Bouamrane
- Effect of Laser Pulse Energy and Vacuum Pressure
on the Cu Laser Induced Plasma Plume Length** 19
by Kadhim A. Aadam, Ali A-K. Hussain, Mohammed R. Abdulameer
- Dielectric and Microwave Properties of Natural Rubber Based Composites
Containing Fullerene Black** 23
*by Omar A. Al-Hartomy, Ahmed Al-Ghamdi, Nikolay Dishovsky, Desislava Slavcheva, Vladimir Iliev,
Farid El-Tantawy*



International Review of Physics (IREPHY)

Editorial Board:

Vladimir M. Agranovich	(U.S.A.)	University of Texas at Dallas – Nano Tech. Institute
Anastasios Anastasiadis	(Greece)	National Observatory of Athens
Jean-Pierre Badioli	(France)	Université Pierre et Marie Curie
Marcia C. Barbosa	(Brasil)	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
Israel Felner	(Israel)	The Hebrew University - Racah Institute of Physics
Peter Hanggi	(Germany)	University of Augsburg - Institute of Physics
Hans Herrmann	(Brasil)	Universidade Federal do Ceará - Departamento de Física
Joshua Jortner	(Israel)	Tel Aviv University – School of Chemistry
Vladimir G. Kadshevsky	(Russia)	Joint Institute for Nuclear Research
Yuri Kozitsky	(Poland)	Maria Curie-Skłodowska University, Lublin
Bo Lehnert	(Sweden)	Royal Institute of Technology- Alfvén Laboratory
Jukka Maalampi	(Finland)	Department of Physics - University of Jyväskylä
Tito Mendonça	(Portugal)	IPFN, Instituto Superior Técnico
Risto M. Nieminen	(Finland)	Helsinki University of Technology – Dep. of Eng. Physics
Dorin Poenaru	(Romania)	H. H. National Institute of Physics & Nuclear Engineering
Rajeev Kumar Puri	(India)	Panjab University
Kestutis Pyragas	(Lithuania)	Semiconductor Physics Institute
Antoni Rogalski	(Poland)	Military University of Technology - Institute of App. Physics
Padma K. Shukla	(Germany)	Universitaet Bochum - Fakultät fuer Physik und Astronomie
Gowind Swarup	(India)	National Centre for Radio Astrophysics
Hugo Thienpont	(Belgium)	Vrije Universiteit Brussel
Sergey Vladimirov	(Australia)	University of Sydney - School of Physics
Christian Von Ferber	(U.K.)	Coventry University - Applied Mathematics Research Centre
Miki Wadati	(Japan)	University of Tokyo - Department of Physics
Xin-Nian Wang	(U.S.A.)	Lawrence Berkeley National Laboratory

The *International Review of Physics (IREPHY)* is a publication of the **Praise Worthy Prize S.r.l.**

The Review is published bimonthly, appearing on the last day of February, April, June, August, October, December.

Published and Printed in Italy by **Praise Worthy Prize S.r.l.**, Naples, February 28, 2014.

Copyright © 2014 Praise Worthy Prize S.r.l. - All rights reserved.

This journal and the individual contributions contained in it are protected under copyright by **Praise Worthy Prize S.r.l.** and the following terms and conditions apply to their use:

Single photocopies of single articles may be made for personal use as allowed by national copyright laws.

Permission of the Publisher and payment of a fee is required for all other photocopying, including multiple or systematic copying, copying for advertising or promotional purposes, resale and all forms of document delivery. Permission may be sought directly from **Praise Worthy Prize S.r.l.** at the e-mail address:

administration@praiseworthyprize.com

Permission of the Publisher is required to store or use electronically any material contained in this journal, including any article or part of an article. Except as outlined above, no part of this publication may be reproduced, stored in a retrieval system or transmitted in any form or by any means, electronic, mechanical, photocopying, recording or otherwise, without prior written permission of the Publisher. E-mail address permission request:

administration@praiseworthyprize.com

Responsibility for the contents rests upon the authors and not upon the **Praise Worthy Prize S.r.l.**

Statement and opinions expressed in the articles and communications are those of the individual contributors and not the statements and opinions of **Praise Worthy Prize S.r.l.** **Praise Worthy Prize S.r.l.** assumes no responsibility or liability for any damage or injury to persons or property arising out of the use of any materials, instructions, methods or ideas contained herein.

Praise Worthy Prize S.r.l. expressly disclaims any implied warranties of merchantability or fitness for a particular purpose. If expert assistance is required, the service of a competent professional person should be sought.

Binder Cumulant for Bond Diluted Ising Model

I. Zergoug, R. Bouamrane

Abstract – The fourth order Binder cumulant U and the critical Binder cumulant U^* of bond-diluted Ising model on a square lattice are studied using Monte Carlo techniques. The values of the transition temperature T_c obtained from U^* for different probabilities of bond dilution p are discussed. When p is no too large ($p < 0.35$), T_c decreases when p increases and U^* also decreases. For $p > 0.35$, things are not so clear and our results show that the determination of T_c from U is questionable. **Copyright © 2014 Praise Worthy Prize S.r.l. - All rights reserved.**

Keywords: Diluted Ising Model, Binder Cumulant, Monte Carlo Simulation

Nomenclature

U	Binder cumulant
U^*	Critical Binder cumulant
p	Concentration of dilution
T_c	Critical temperature of transition
L	Lattice size
H	Hamiltonian
J	Exchange coupling constant
S	Spin value
N	Total number of spins
k_B	Boltzmann constante
M	Magnetization
E	Energy
C_v	Specific heat

I. Introduction

The Binder cumulant U , the fourth order cumulant of the order parameter [1], plays an important role in the field of phase transition and critical phenomena. It is well known that the determination of the transition phase point is obtained by locating the intersection of the cumulant function of temperature at different sizes.

The cumulant may also be used to compute the critical exponent of the correlation length, and thence identify the universality class of the transition.

U^* , the value of the Binder cumulant at the transition temperature T_c , has received a lot of interest. The numerical value of critical binder cumulant has been determined very accurately in the case of two dimensional Ising model with ferromagnetic nearest neighbour, using Monte Carlo techniques [2], [15] and transfer matrix methods augmented by finite size extrapolations to the thermodynamic limit [3], [16]. In the case of square lattice with periodic boundary conditions, the resulting value is $U^* = 0.61069$ [3].

In fact, different values of U^* have been obtained when considering various boundary conditions, lattice shapes, and lattice structures (anisotropic interactions)

[1], [3], [4], [5], [9]-[14]. For instance, with free boundary conditions, the critical cumulant of nearest neighbour Ising model on square and triangular lattice are respectively $U^* = 0.396 \pm 0.002$ and $U^* = 0.379 \pm 0.001$ [5]. In the present paper, we report the value of the critical Binder cumulant in the case of bond diluted Ising model on a square lattice with free boundary conditions.

The paper is organized as follows: in the next section, the model and the Monte Carlo method are introduced.

Then, simulation results are presented and finally, results are shown and discussed.

II. Model and Method

The Hamiltonian of the model considered here reads [6]:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (1)$$

where $S_i = \pm 1$ is the spin at the site i . The exchange coupling constant J_{ij} is 0 for non-nearest-neighbours and 1 or 0 with probabilities p or $(1-p)$ respectively. Free boundary conditions are used, and the regular square lattice size is $L = \sqrt{N}$ (where N is the total number of spins in the system).

We have calculated the Binder cumulant at the phase transition T_c for different probability of bond dilution p (concentration of dilution). The exact critical temperature T_c for the regular square lattice is given by [7]

$$k_B T_c / J = 2 / \ln(\sqrt{2} + 1) = 2.26918\dots$$

The binder cumulant, the fourth-order cumulant of the magnetization, as usually defined, is [1]

$$U(T, L) = 1 - \frac{\langle M^4 \rangle}{3 \langle M^2 \rangle^2} \quad (2)$$

where $\langle M^2 \rangle$ and $\langle M^4 \rangle$ denote thermal averages of the second and fourth moments of the magnetization. In the Ising model case, the cumulant $U(T, L)$ approaches the value $2/3$ at temperature $T < T_c$ and the value 0 at $T > T_c$, reflecting the Gaussian form of the magnetization distribution [1]. At T_c , the Binder cumulant U^* acquires a non-trivial value, which will be estimated in this paper for different p dilution value. To achieve this, we performed Monte Carlo simulation [8] using standard single spin flip algorithms. We divided the equilibration process into "timesteps", a Monte Carlo step per spin.

The measurement of the thermodynamic quantities is carried out after a certain number of timesteps which we name a "timeslice". To estimate accurately the fluctuations of thermodynamic quantities, measurements are taken at each timeslice and averaged over a larger number of samples. When the difference of the averaged energy between two successively timeslices is lower than a certain given value, the simulation is stopped and various thermodynamic quantities are obtained. This process is repeated for several temperature values T .

As usual, the energy E and the specific heat C_v are obtained by:

$$E = -\frac{1}{N} \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} S_i S_j \quad (3)$$

$$C_v = N\beta^2 \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \quad (4)$$

where N is the total number of spins in the system, $\beta=1/k_B T$ (T is the temperature and k_B is the Boltzmann constant taken to unity here).

III. Results and Discussion

We consider nearest neighbour Ising model on the square lattice with free boundary conditions. The calculations were carried out for $p = 0.0, 0.05, 0.10, 0.15$ and 0.20 using lattice sizes $L = 256, 1024$ and 4096 . 10000 samples are used for averaging.

First of all, thermodynamic quantities are plotted in Fig. 1 and Fig. 2 for $L = 4096$ and for various concentration of dilution.

A calculation is added in case of $p = 0.5$ for lattice size $L = 512, 1024$ and 4096 with 16384 averaging samples for the two first sizes, 590000 averaging samples for the last one. From Fig. 3, we can get the value of the critical temperature T_c for different concentration of dilution p from the intersection of the Binder cumulant for different lattice sizes. The critical temperature T_c are shown decrease linearly as the dilution p increases (see Fig. 4).

We focus now on the study of the critical binder cumulant U^* . In previous simulation [5], for isotropic nearest neighbour Ising model on square lattice and free boundary conditions the value of $U^* = 0.396 \pm 0.002$ has been found.

The author claimed that the critical cumulant depends only on the shape not on the lattice structure.

In our case, we study the critical binder cumulant U^* dependence as a function of the dilution p (see Fig. 5).

For $p = 0$ we get $U^* = 0.4022 \pm 0.0007$. The value of U^* decreases linearly the increase of the dilution p . An interesting results is shown for $p = 0.5$. On Fig. 6 and Fig. 7 is shown the variation of the Binder cumulant U and the specific heat C_v against the temperature respectively.

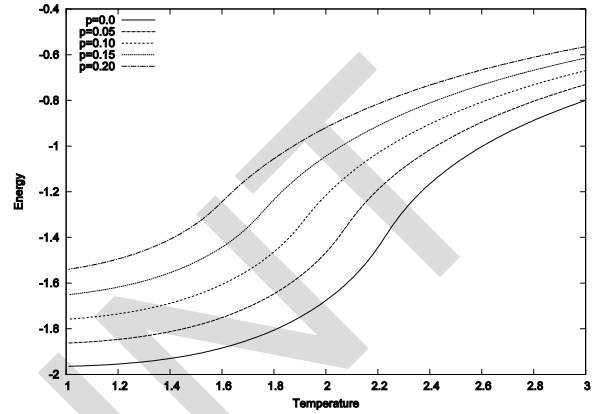


Fig. 1. The energy E as a function of the temperature for different concentration of dilution p

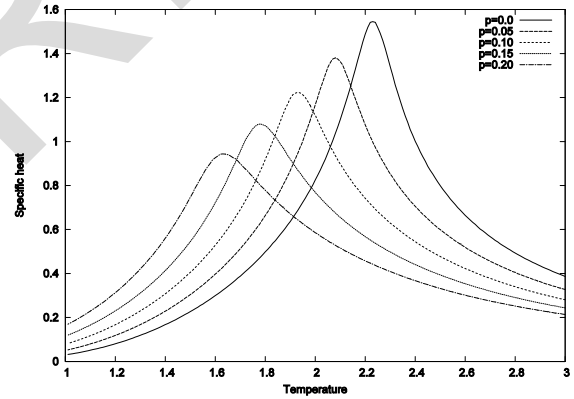


Fig. 2. The specific heat C_v as a function of the temperature for different dilution p

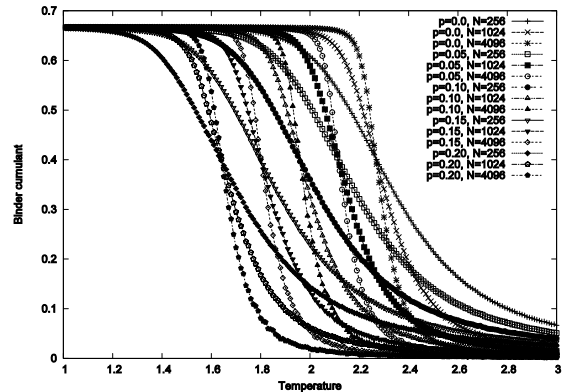


Fig. 3. The Binder cumulant U versus the temperature for different dilution p

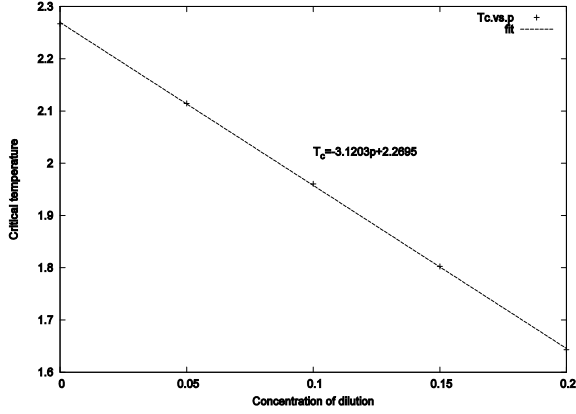


Fig. 4. Variation of the critical temperature T_c versus dilution p

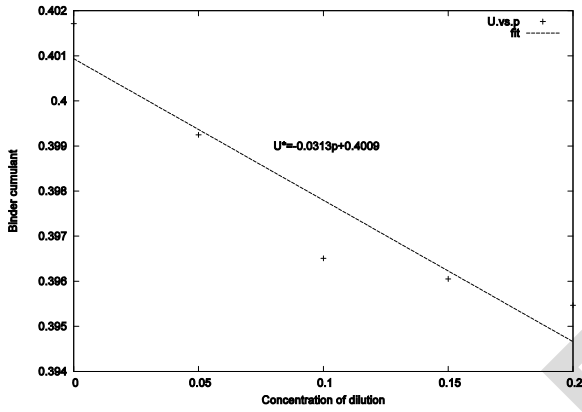


Fig. 5. Variation of the critical Binder cumulant U^* versus dilution p

It is comment practice that the value of the critical temperature T_c is obtained from intersecting critical Binder cumulant (U^*) curves for various system sizes. Also, T_c normally corresponds to the maximum value of the specific heat $C_v(\max)$. Using the first method, 590000 averaging samples are used for $p=0.5$ and the intersection of $U(T)$ curves for different lattice sizes yields the value $T_c = 0.39$ (see Fig. 6). Moreover, if we seek T_c from locating the maximum of $C_v(T)$, we get $T_c = 1.03$ (see Fig. 7).

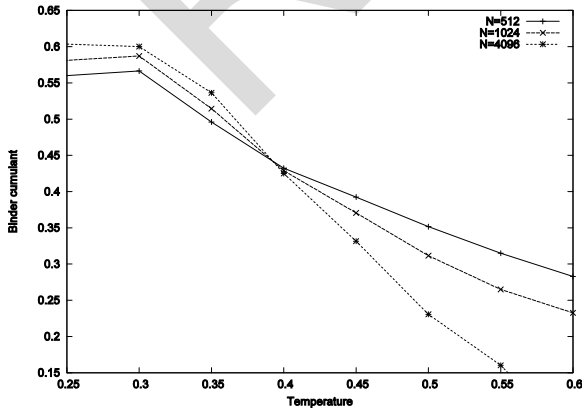


Fig. 6. Variation of the Binder cumulant U versus the temperature for $p = 0.5$

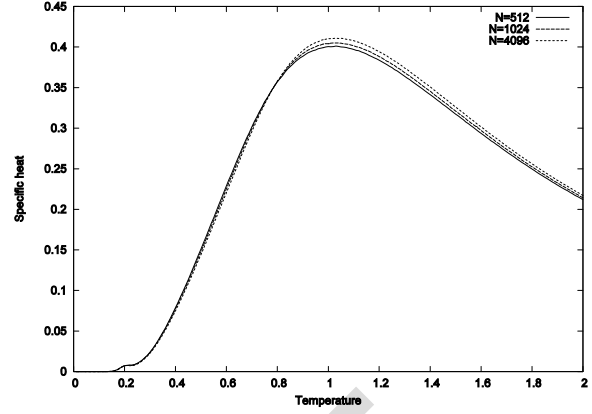


Fig. 7. Variation of the specific heat C_v versus the temperature for $p = 0.5$ for different lattice sizes

It appears that the Binder cumulant method of determining critical temperatures breaks down as the bond concentration p approaches the bond percolation threshold ($p = 0.5$).

The difference between the two methods in the determination of the value of T_c exceeds 1% for $p > 0.35$. Table I shows values of T_c obtained by the two methods for various p .

For $p \leq 0.30$, T_c (from U) is slightly larger than the T_c (from C_v) which can be explained from finite scaling law. But for $p \geq 0.35$, T_c (from U) is quite smaller than T_c (from C_v) which cannot be resolved by scaling laws.

TABLE I
THE VALUES OF T_c DETERMINED FROM THE TWO METHODS FOR DIFFERENT BOND CONCENTRATION P

p	T_c (From U)	T_c (From C_v max)
0.0	2.2670	2.2306
0.05	2.1145	2.0813
0.10	1.9605	1.9325
0.15	1.8024	1.7804
0.20	1.6430	1.6360
0.25	1.4817	1.4914
0.30	1.3163	1.2930
0.35	1.1342	1.2515
0.40	0.9252	1.1438
0.45	0.6733	1.1029
0.50	0.3924	1.0365

IV. Conclusion

The critical Binder cumulant U^* for two dimensional bond diluted Ising model on square lattice with free boundary conditions has been studied. The simulation findings show that the critical binder cumulant depends on the concentration of dilution p . The value of U^* for $p = 0$ was equal to 0.4022 ± 0.0007 with respect to [5] that was 0.396 ± 0.002 .

The determination of the critical temperature T_c using the Binder cumulant must be use carefully for disordered systems. T_c obtained from $C_v(\max)$ is more likely reliable for strongly disordered systems. Further investigations are being done with larger system sizes and larger samples to get more precisely in order to settle this issue.

Acknowledgements

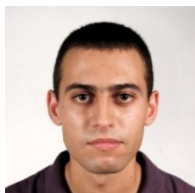
We would like to thank Matteo Marsili at the ICTP for very helpful discussions.

References

- [1] Binder K, 1981 Z.Phys. B43 119.
- [2] Nicolaides D and Bruce A D, 1988 J. Phys. A: Math. Gen. **21** 233.
- [3] Kamieniarz G and Blöte H W J, 1993 J. Phys. A: Math. Gen. **26** 201.
- [4] Privman V, Hohenberg P C and Aharony A, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol 14, ed C Domb and J L Lebowitz (London: Academic, 1991).
- [5] Selke W, 2006 Eur. J. Phys. B **51** 223.
- [6] Zobin D, 1978 Phys. Rev. B **18** 2387.
- [7] Onsager L, 1944 Phys. Rev. **65** 117.
- [8] Landau D P and Binder K, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics* (Cambridge: University Press 2000).
- [9] T.W. Burkhardt and B. Derrida, 1985 Phys. Rev. B **32** 7273.
- [10] A. Drzewinski and J. Wojtkiewicz, 2000 Phys. Rev. E **62** 4397.
- [11] R. Hilfer, B. Biswal, H.G. Mattutis, and W. Janke, 2003 Phys. Rev. E **68** 046123.
- [12] Chen X S and Dohm V, 2004 Phys. Rev. E **70** 056136.
- [13] Selke W and Shchur L N, 2005 J. Phys. A: Math. Gen. **38** L739.
- [14] Dohm V, 2006 J. Phys. A: Math. Gen. **39** L259.
- [15] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller, and E. Teller, 1953 J. Chem. Phys. **21** 1087.
- [16] M. Ghaemi, M. Ghannadi and B. Mirza, 2003 J. Phys. Chem. B **107** 829.

Authors' information

LEPM, USTO-MB, BP 1505 Oran El M'Naouer 31000 Algeria.



Ismail Zergoug is a PhD student at the physics department, University of Sciences and Technology of Oran (USTO-MB Oran, Algeria). His research interests: phase transition of disordered magnetic systems and Ising models.



Bouamrane Rachid is a permanent Professor of physics at the University of Sciences and technology of Oran (USTO-MB, Algeria). He received his PhD in Physics (1989) at the University of Michigan. Back then he worked on particle physics theory. Nowadays, his research interest revolves around very large discrete electrical, magnetic and mechanical disordered systems

International Review of Physics (IREPHY)

Aims and scope

The *International Review of Physics (IREPHY)* (www.praiseworthyprize.com/irephy.htm) is a peer-reviewed journal that publishes original theoretical and applied papers on all aspects of physics. The topics to be covered include, but are not limited to:

electrostatics and its applications, quantum physics, atomic and molecular physics, nanoscale science, photonics and device physics, plasmas, high energy particle physics, magnetism and magnetic materials, electromagnetic waves and applications, condensed matter, soft matter and polymer physics, semiconductor devices, superconductivity, chemical physics, theoretical physics, bifurcation and chaos, optics, astronomy and astrophysics, biological physics, statistical physics, geophysics, mathematical methods in physics, new and important applications and trends.

Instructions for submitting a paper

Contributions may consist of invited tutorials or critical reviews; original scientific research papers (regular paper); letters to the Editor and research notes which should also be original presenting proposals for a new research, reporting on research in progress or discussing the latest scientific results in advanced fields.

All papers will be subjected to a fast editorial process.

Any paper will be published within two months from the submitted date, if it has been accepted.

Papers must be correctly formatted, in order to be published.

Formatting instructions can be found in the last pages of the Review.

An *Author guidelines* template file can be found at the following web address:

www.praiseworthyprize.com/Template of IREPHY.doc

Manuscripts should be sent via e-mail as attachment in .doc and .pdf formats to:

editorialstaff@praiseworthyprize.com

The regular paper page length limit is defined at **15** formatted Review pages, including illustrations, references and author(s) biographies.

Pages 16 and above are charged 10 euros per page and payment is a prerequisite for publication.

Subscription rates:

on Cd-Rom, per year:

Institutional: 350* (euros/year)

Individual: 350* (euros/year)

Individual article: 50 (euros)

* To be downloaded

** Shipment costs to be charged

Print copy, per year:

350** (euros/year)

350** (euros/year)

65** (euros)

Abstracting and Indexing Information:

Cambridge Scientific Abstracts (CSA/CIG)

Academic Search Complete (EBSCO Information Services)

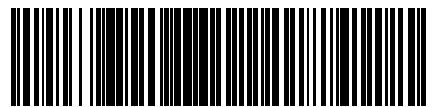
Index Copernicus (Journal Master List): Impact Factor 6.39

Autorizzazione del Tribunale di Napoli n. 26 del 27/03/2007

REPRINT



Praise Worthy Prize



1971-680X(201402)8:1;1-D

Bibliographie

- [1] W. Lenz, Phys.Zeitschr, 21, (1920) 613.
- [2] E. Ising, Z. Physik 31, (1925) 253.
- [3] W.Heisenberg, Z.Phys, 49, (1928) 619.
- [4] R. Peierls, Proc. Camb. Phil. Soc, 32, (1936).
- [5] H.A. Kramers, G.H. Wannier, Phys Rev, 60, (1941) 252.
- [6] L. Onsager, Phys Rev, 65, (1944) 117.
- [7] R.B.Potts, Mathematical proceedings of the cambridge philosophical society, 48, (1952) 106.
- [8] C.N.Yang, Phys Rev, 85, (1952) 808.
- [9] R.B.Potts, Physical Rev, 88, (1952) 352.
- [10] Metropolis et al, The Journal of Chemical Physics. 21, (1953) 1087.
- [11] G F. Newell and E W. Montroll, *On the Theory of the Ising Model of Ferromagnetism*, Reviews of Modern Physics 25, (1953) 353.
- [12] Broadbent S R and Hammenley *Percolation processes I : Crystals and mazes*. Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society 53, 629, 1957.

- [13] T. D. Schultz, D. C. Mattis, and E. H. Lieb, *Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions*. Reviews of Modern Physics 36, 856, 1964.
- [14] C.M. Fortuin and P.W. Kasteleyn, Physica 57, (1972) 536.
- [15] A. B. Harris, J. Phys. C7, (1974) 1671.
- [16] D. Zobin, Phys Rev B 18, (1978) 2387.
- [17] E. Domany, J. Phys. C 11, (1978) L337.
- [18] C. Jayaprakash, E. K. Riedel, M. Wortis, Phys.Rev B 18, (1978) 2244.
- [19] A. Coniglio and W.Klein, J.Phys. A13, (1980) 2775.
- [20] K. Binder, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter 43, (1981) 119.
- [21] F.Y.Wu, Rev.Mod.Phys, 54, (1982) 235.
- [22] D. Stauffer, *Introduction to percolation theory*. Taylor and Francis, London and Philadelphia, 1985.
- [23] Swendsen, R. H, and Wang, J, Phys. Rev. Lett 58(2), (1987) 86.
- [24] Kerson Huang, *Statistical Mechanics*. 2nd Edition , Wiley, 1987.
- [25] Robert G Edwards & Alan D.Sokal, Phys. Rev D 38, (1988) 2009.
- [26] U. Wolff, Nucl.Phys. B 300, (1988) 501.
- [27] D.J.Frank & C.J.Lobb, Physical Review B 37, (1988) 302.
- [28] A.Coniglio, F. di Liberto, G.Monroy and F. Peruggi, J.Phys.A 22, (1989) L837.
- [29] Privman, *Finite Size Scaling and Numerical Simulation of Statistical Systems* World Scientific Publishing Company, Incorporated, 1990.
- [30] H.Berestycki and G.I.Shivasinsky, SIAM, J. Appl.Math 51, (1991) 344.
- [31] Jesús Salas & Alan Sokal, J.Statist.Phys, 86, (1997) 551.

- [32] Atsuyuki Okabe, Barry Boots, Kokichi Sugihara & Sung Nok Chiu, *Spatial Tessellations - Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. (2nd ed.), Wiley, 2000.
- [33] K. Sznajd-Weron, J. Sznajd, *Int. Mod. Phys. C*, 11, (2001) 1157.
- [34] M. E. J. Newman & G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. CLARENDON PRESS - OXFORD First published 1999, Reprinted (with corrections) 2001.
- [35] Herbert Edelsbrunner, *Geometry and Topology for Mesh Generation*. Cambridge University Press 2001.
- [36] Gudrun Schliecker, *Advances in Physics*, 51, (2002) 1319.
- [37] Igor Vilfan, *Lecture Notes in Statistical Mechanics*. The Abdus Salam ICTP, Trieste, Italy and The J. Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia Trieste, Autumn 2002
- [38] Marc Hayoun, *LA MÉTHODE DE MONTE CARLO METROPOLIS*. École "Simulation Numérique en Matière Condensée". Jussieu, Paris, 29 au 31 Mai 2002.
- [39] J. Merikoski, J. Mannuksela, M. Myllys and J. Timonen, *Phys. Rev. Lett* 90, (2003) 0245001.
- [40] M. Hjorth-Jensen, *Computational Physics*. Department of Physics, University of Oslo, 2003.
- [41] Daniel C. Mattis, *Statistical Mechanics made simple*. 1st ed. Singapore : World Scientific, 2003.
- [42] Pierre-Emmanuel Berche et al, *European Physical Journal B*, 38, (2004) 463.
- [43] D.P.Landau, *Braz J.Phys* (2006) 551.
- [44] Selke W, *Eur. J. Phys. B* 51, (2006) 223.

- [45] Y.L.Loh & M.Y.J Tan, Phys Rev B 76, (2007) 014404.
- [46] Roman Koecký, Jesús Salas & Alan Sokal, Phys Rev Letters, 101, (2008) 030601.
- [47] David P. Landau & Kurt Binder, *A guide to Monte Carlo simulation in statistical physics*. Cambridge University Press 2009.
- [48] F.Y.Wu, Phys Rev E 81, (2010) 061110.
- [49] S. Torquato, Phys.Biol, 8, (2011) 015017.
- [50] Peiwei Qin, *A polynomial-time algorithm for image segmentation using Ising models* Natural Computation (ICNC), 2011 Seventh International Conference on , vol.2, no., pp.932-935, 26-28 July 2011.
- [51] Sitangshu Bikas Santra, Purusattam Ray, *Computational statistical physics*, Hindustan Book Agency, India, 2011.