MODÈLE D'ISING EN DIMENSION 1 ET 2

1. Description du modèle

Dans un matériau ferromagnétique (fer, nickel, cobalt, *etc.*), chaque électron possède un moment magnétique dipolaire, qu'on peut représenter par un vecteur de la sphère unité, le *spin* $\vec{S}$ de l'électron. Les règles de la mécanique quantique impliquent que :

(i) Étant donnée une direction de l'espace $\vec{u}$, on ne peut mesurer le produit scalaire $\langle \vec{S} | \vec{u} \rangle$ que dans deux états $+1$ et -1. Le spin mesuré d'un électron $\sigma(e)$ sera donc une variable aléatoire à valeurs dans $\{+1, -1\}$.

(ii) À courte distance, pour réduire l'énergie électrostatique qui repoussent les électrons les uns par rapport aux autres, les spins des électrons ont tendance à s'aligner. Ainsi, étant donnés deux électrons "voisins" e et e', on aura toujours
$$\mathbb{P}[\sigma(e)\,\sigma(e') = 1] > \mathbb{P}[\sigma(e)\,\sigma(e') = -1].$$

(iii) Enfin, un champ magnétique extérieur $\vec{B}$ pourra influencer la direction des spins : ainsi, si $\vec{u}$ est la direction suivant laquelle on mesure les spins, et si $\langle \vec{B} | \vec{u} \rangle > 0$, alors on aura aussi
$$\mathbb{P}[\sigma(e) = 1] > \mathbb{P}[\sigma(e) = -1]$$
pour tout électron e.

On modélise ces hypothèses de la façon suivante. Pour simplifier, on supposera que les électrons e occupent les points d'une partie finie E du réseau $\mathbb{Z}^d$, et on appellera *configuration de spins* la donnée d'une fonction $\sigma : E \to \{\pm 1\}$. Deux électrons e et e' seront dit voisins s'ils le sont dans le réseau $\mathbb{Z}^d$, c'est-à-dire si les coordonnées $(e_1, \ldots, e_d)$ et $(e'_1, \ldots, e'_d)$ des électrons vérifient
$$|e_1 - e'_1| + \cdots + |e_d - e'_d| = 1;$$
on notera dans ce cas $e \sim e'$. La répartition des spins dans le matériau E sera alors modélisée par la configuration aléatoire σ suivant la mesure de probabilité
$$\mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\sigma] = \frac{1}{Z_E(\alpha,\beta)} \exp\left(\alpha \sum_{e \in E} \sigma(e) + \beta \sum_{e \sim e' \in E} \sigma(e)\,\sigma(e')\right) \tag{1}$$
où $\alpha \in \mathbb{R}$ et $\beta \in \mathbb{R}_+$ sont des paramètres fixés ; et $Z_E(\alpha, \beta)$ est la constante positive qui fait de $\mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\cdot]$ une mesure de probabilité sur $\{\pm 1\}^E$. On dit que $Z_E(\alpha, \beta)$ est la *fonction de partition* du modèle, et on appellera *loi d'Ising* la mesure de probabilité donnée par l'équation (1), et *modèle d'Ising* une configuration de spins aléatoire suivant la loi d'Ising. Dans ce texte, on s'intéresse à la construction explicite de configurations de spins suivant la loi d'Ising ; au calcul de $Z_E(\alpha, \beta)$; et au comportement de la *magnétisation*
$$M(\sigma) = \sum_{e \in E} \sigma(e),$$
qui sous la loi d'Ising $\mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\cdot]$ est une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{Z}$.

2. Fonction de partition et matrice de transfert

Dans toute cette section, $d = 1$ et on suppose que E est un segment dans $\mathbb{Z}$: $E = [\![1, n]\!] = \{1, 2, 3, \ldots, n\}$. La probabilité (1) s'écrit alors sous la forme

$$\mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\sigma] = \frac{1}{Z_n(\alpha, \beta)} \exp\left(\alpha \sum_{i=1}^{n} \sigma(i) + \beta \sum_{i=1}^{n-1} \sigma(i)\,\sigma(i+1)\right). \tag{2}$$

Si $\alpha = 0$, alors on peut représenter une configuration σ par les états d'une chaîne de Markov. Pour $x \in \mathbb{C}$, on note $\cosh x = \frac{\mathrm{e}^x + \mathrm{e}^{-x}}{2}$ et $\sinh x = \frac{\mathrm{e}^x - \mathrm{e}^{-x}}{2}$. Soit

$$P = \frac{1}{2\,\cosh\beta} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\beta} & \mathrm{e}^{-\beta} \\ \mathrm{e}^{-\beta} & \mathrm{e}^{\beta} \end{pmatrix},$$

et $(\sigma(n))_{n \geq 1}$ la chaîne de Markov d'espace d'états $\{\pm 1\}$, de mesure initiale $\mathbb{P}[\sigma(1) = 1] = \mathbb{P}[\sigma(1) = -1] = \frac{1}{2}$, et de matrice de transition P, les lignes et colonnes de P correspondant aux états $+1$ et -1 suivant la matrice

$$\begin{pmatrix} (+1, +1) & (+1, -1) \\ (-1, +1) & (-1, -1) \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Proposition 1. *Si $\alpha = 0$, alors pour tout $n \geq 1$, le vecteur $(\sigma(1), \ldots, \sigma(n))$ constitué des premiers états de la chaîne de Markov est une configuration de spins sur E qui suit la loi donnée par l'équation* (2)*. En particulier, $Z_n(0, \beta) = 2^n (\cosh\beta)^{n-1}$.*

Si $\alpha \neq 0$, on peut tout de même calculer la fonction de partition $Z_n(\alpha, \beta)$ en utilisant la technique dite de la *matrice de transfert*. Soit

$$T = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\alpha+\beta} & \mathrm{e}^{-\alpha-\beta} \\ \mathrm{e}^{\alpha-\beta} & \mathrm{e}^{-\alpha+\beta} \end{pmatrix}$$

la matrice de transfert du système, dont les lignes et les colonnes correspondent aux états ± 1 toujours suivant la matrice (3). On note également V le vecteur ligne $(\mathrm{e}^{\alpha}, \mathrm{e}^{-\alpha})$, et W le vecteur colonne $\left(\begin{smallmatrix} 1 \\ 1 \end{smallmatrix}\right)$.

Pour toute configuration de spins σ, $\mathbb{P}[\sigma]$ est proportionnel à $V_{\sigma(1)} T_{\sigma(1)\sigma(2)} \cdots T_{\sigma(n-1)\sigma(n)}$. Par conséquent,

$$Z_n(\alpha, \beta) = \sum_{\sigma(1), \ldots, \sigma(n) \in \{\pm 1\}} V_{\sigma(1)} T_{\sigma(1)\sigma(2)} T_{\sigma(2)\sigma(3)} \cdots T_{\sigma(n-1)\sigma(n)} = V T^{n-1} W. \tag{4}$$

En diagonalisant la matrice T, on peut alors calculer exactement $VT^{n-1}W$, ce qui donne :

Théorème 2. *Pour α et β arbitraires, on a*

$$Z_n(\alpha, \beta) = a_+ (\lambda_+)^{n-1} + a_- (\lambda_-)^{n-1} \tag{5}$$

avec $+$

Cette formule se spécialise bien en $Z_n(0, \beta) = 2^n (\cosh\beta)^{n-1}$ lorsque $\alpha = 0$.

3. Fluctuations de la magnétisation en dimension 1

Le calcul de la fonction de partition $Z_n(\alpha, \beta)$ ne fournit pas d'algorithme efficace pour construire une configuration de spins de loi (2) ; en revanche, il conduit à de nombreux résultats théoriques. Dans cette section, α et β sont fixés, et on considère de nouveau le modèle d'Ising en dimension 1 sur l'ensemble $E = [\![1, n]\!]$; on note $M_n = \sum_{i=1}^{n} \sigma(i)$ la magnétisation. Si

$$F_n(t, \alpha, \beta) = \mathbb{E}_{\alpha,\beta}[\mathrm{e}^{tM_n}]$$

est la transformée de Laplace de la magnétisation sous la loi (2), alors

$$F_n(t, \alpha, \beta) = \frac{Z_n(\alpha + t, \beta)}{Z_n(\alpha, \beta)}, \tag{6}$$

et en particulier :

Proposition 3. *L'espérance de la magnétisation est donnée par :*

$$\mathbb{E}_{\alpha,\beta}[M_n] = \left.\frac{\partial \mathbb{E}_{\alpha,\beta}[\mathrm{e}^{tM_n}]}{\partial t}\right|_{t=0} = \frac{\partial(\log Z_n)}{\partial \alpha}(\alpha, \beta). \tag{7}$$

En remarquant que $\lambda_+ > \lambda_-$, on obtient un développement asymptotique de $\mathbb{E}_{\alpha,\beta}[M_n]$:

$$\frac{\mathbb{E}_{\alpha,\beta}[M_n]}{n} = \text{magnétisation moyenne par spin} = \frac{\mathrm{e}^{\beta} \sinh \alpha}{\sqrt{\mathrm{e}^{2\beta} \sinh^2 \alpha + \mathrm{e}^{-2\beta}}} + O\left(\frac{1}{n}\right).$$

Plus précisément, on peut établir un théorème central limite pour $\frac{M_n - n\overline{m}}{\sqrt{n}}$, où $\overline{m}$ est la magnétisation moyenne asymptotique, c'est-à-dire

$$\overline{m} = \frac{\mathrm{e}^{\beta} \sinh \alpha}{\sqrt{\mathrm{e}^{2\beta} \sinh^2 \alpha + \mathrm{e}^{-2\beta}}}.$$

Théorème 4. *Sous la mesure de probabilité (2), la magnétisation renormalisée $X_n = \frac{M_n - n\overline{m}}{\sqrt{n}}$ converge lorsque n tend vers l'infini vers une loi gaussienne centrée de variance*

$$V = \frac{\mathrm{e}^{-\beta} \cosh \alpha}{(\mathrm{e}^{2\beta} \sinh^2 \alpha + \mathrm{e}^{-2\beta})^{3/2}}.$$

Esquisse de preuve. On peut faire les approximations suivantes :

$$\begin{aligned}
\log \mathbb{E}_{\alpha,\beta}\left[\mathrm{e}^{t\frac{M_n - n\overline{m}}{\sqrt{n}}}\right] &= \log F_n\left(\frac{t}{\sqrt{n}}, \alpha, \beta\right) - \sqrt{n}(t\overline{m}) \\
&= \log Z_n\left(\alpha + \frac{t}{\sqrt{n}}, \beta\right) - \log Z_n(\alpha, \beta) - \sqrt{n}(t\overline{m}) \\
&\simeq n \log \lambda_+\left(\alpha + \frac{t}{\sqrt{n}}, \beta\right) - n \log \lambda_+(\alpha, \beta) - \sqrt{n}(t\overline{m}) \\
&\simeq \frac{\mathrm{e}^{-\beta} \cosh \alpha}{(\mathrm{e}^{2\beta} \sinh^2 \alpha + \mathrm{e}^{-2\beta})^{3/2}} \frac{t^2}{2},
\end{aligned}$$

les restes de ces approximations étant des $o(1)$ (à t, α et β fixés). Ce calcul reste valable pour t variable complexe et n assez grand ; en particulier, la transformée de Fourier de X_n vérifie donc

$$\forall t,\ \ \mathbb{E}_{\alpha,\beta}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}tX_n}] \to \exp\left(-\frac{\mathrm{e}^{-\beta} \cosh \alpha}{(\mathrm{e}^{2\beta} \sinh^2 \alpha + \mathrm{e}^{-2\beta})^{3/2}} \frac{t^2}{2}\right).$$

Par le critère de Lévy, ceci implique la convergence en loi de $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ vers une variable gaussienne de variance V. $\square$

4. Construction générale et observations en dimension 2

Dans cette section, $d = 1$ ou $d = 2$, et on propose un algorithme qui construit une configuration de spins de loi proche de la loi d'Ising (1). On fixe une partie finie E de $\mathbb{Z}^d$, et si $e \in E$ et σ est une configuration dans $\{\pm 1\}^E$, on note

$$P(e,\sigma) = \mathrm{card}\{\text{voisins } e' \in E \text{ de } e \text{ avec } \sigma(e') = 1\};$$
$$N(e,\sigma) = \mathrm{card}\{\text{voisins } e' \in E \text{ de } e \text{ avec } \sigma(e') = -1\}.$$

Soit $e \in E$ une position, et u un réel dans $[0,1]$. Si σ est une configuration de spins, on note $\sigma' = F_{e,u}(\sigma)$ la nouvelle configuration de spins définie comme suit :

(1) $\sigma'(e)$ vaut 1 si
$$u < \frac{\mathrm{e}^{\alpha+\beta(P(e,\sigma)-N(e,\sigma))}}{2\cosh(\alpha+\beta(P(e,\sigma)-N(e,\sigma)))},$$
et -1 sinon.

(2) on laisse tous les autres électrons e' avec le spin de σ : $\sigma'(e' \neq e) = \sigma(e')$.

Dans ce qui suit, $(e_k)_{k\in\mathbb{N}}$ est une suite de variables aléatoires indépendantes uniformes sur l'ensemble fini E, et $(u_k)_{k\in\mathbb{N}}$ est une suite de variables aléatoires indépendantes uniformes sur $[0,1]$, et indépendantes des $(e_k)_{k\in\mathbb{N}}$. On fixe une configuration initiale $\sigma^{(0)} \in \{\pm 1\}^E$, et on définit récursivement une suite de configurations $(\sigma^{(k)})_{k\in\mathbb{N}}$ par

$$\sigma^{(k+1)} = F_{e_k,u_k}(\sigma^{(k)}). \tag{8}$$

Théorème 5. *L'équation* (8) *définit une chaîne de Markov irréductible récurrente apériodique sur l'espace des configurations de spins $\{\pm 1\}^E$. L'unique mesure de probabilité invariante de cette chaîne est la loi d'Ising donnée par la formule* (1).

Esquisse de preuve. La propriété de Markov est une conséquence immédiate de l'indépendance des variables $(e_n)_{n\in\mathbb{N}}$ et $(u_n)_{n\in\mathbb{N}}$; les propriétés d'irréducibilité et d'apériodicité sont évidentes. Pour montrer l'invariance de la loi d'Ising $\mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\cdot]$, il suffit d'établir l'équation de réversibilité

$$\forall \sigma,\sigma',\;\; \mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\sigma]\, P(\sigma,\sigma') = \mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\sigma']\, P(\sigma',\sigma).$$

Elle se vérifie facilement pour deux configurations σ et σ' qui ne diffèrent qu'en un électron e, avec disons $\sigma(e) = +1$ et $\sigma'(e) = -1$. En effet, dans ce cas, les termes dépendant de l'électron e dans $\mathbb{P}[\sigma]$ sont

$$\mathrm{e}^{\alpha+\beta(P(e,\sigma)-N(e,\sigma))},$$

et $P(\sigma,\sigma')$ est proportionnel à

$$\frac{\mathrm{e}^{-\alpha-\beta(P(e,\sigma)-N(e,\sigma))}}{2\,\cosh(\alpha+\beta(P(e,\sigma)-N(e,\sigma)))}.$$

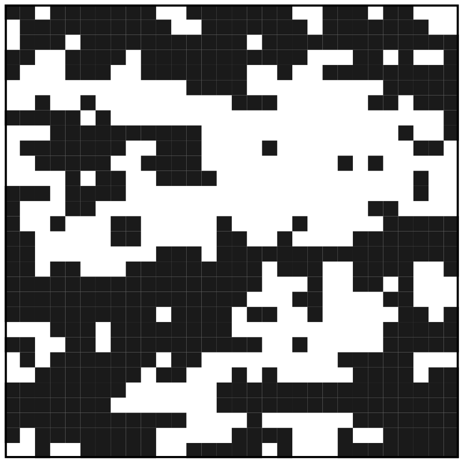
Le produit des deux est donc proportionnel à

$$\frac{1}{2\,\cosh(\alpha+\beta(P(e,\sigma)-N(e,\sigma)))} = \frac{1}{2\,\cosh(\alpha+\beta(P(e,\sigma')-N(e,\sigma')))},$$

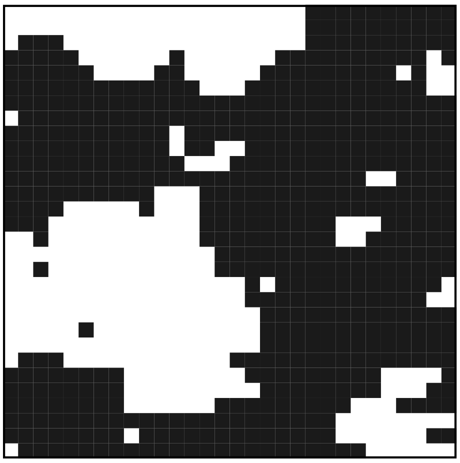
et on obtient le même résultat en étudiant le terme de droite dans l'équation de réversibilité. $\square$

Par le théorème ergodique pour les chaînes de Markov finies récurrentes apériodiques, pour k grand, la loi de $\sigma^{(k)}$ est donc proche de la loi d'Ising (1), ce qui permet de simuler des configurations de spins en programmant ces chaînes de Markov. On a représenté ci-après les résultats de ces simulations en dimension 2.

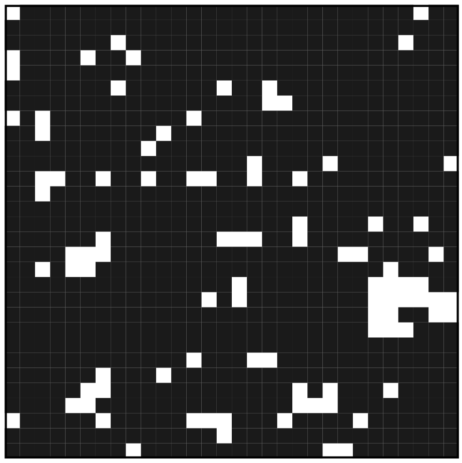
$\alpha = 0,\ \beta = 0.3$



$\alpha = 0,\ \beta = 0.4$



$\alpha = 0,\ \beta = 0.55$



$\alpha = 0.3,\ \beta = 0.3$

Figure 1. Des configurations de spins de taille 30×30 pour différentes valeurs des paramètres α, β. Les électrons avec spin positif $+1$ sont représentés en noir, et les électrons avec spin négatif -1 sont représentés en blanc.

Questions

Pour la rédaction des programmes, on pourra soit écrire le code en un langage de programmation (n'importe lequel), soit donner une description détaillée de l'algorithme (pseudo-code).

1. Expliquer pourquoi l'équation (1) modélise de façon pertinente les propriétés (i), (ii) et (iii) listées dans la section 1. Si $\langle \vec{B} | \vec{u} \rangle > 0$, quel doit être le signe de α ? Qu'attend-on du modèle d'Ising si l'on fait tendre α vers l'infini ? si l'on fait tendre β vers l'infini ? si $\alpha = \beta = 0$?

2. Calculer les probabilités de chacune des 4 configurations de spins sur l'ensemble $E = [\![1, 2]\!] \subset \mathbb{Z}$; respectivement, de chacune des 16 configurations de spins sur l'ensemble $E = [\![1, 2]\!]^2 \subset \mathbb{Z}^2$.

3. Démontrer la proposition 1. Écrire un programme qui produit une configuration aléatoire en dimension 1, de taille n arbitraire, et avec des paramètres $\alpha = 0$ et $\beta \in \mathbb{R}$.

4. Démontrer les formules (4) et (5) — pour la seconde formule, on calculera les valeurs propres de T, pour écrire la forme *a priori* de $VT^{n-1}W$; puis on identifiera les coefficients à l'aide des premières valeurs de $Z_n(\alpha, \beta)$. Pourquoi cette formule ne fournit-elle pas d'algorithme efficace pour construire une configuration aléatoire σ de dimension 1 et de paramètres arbitraires α, β ?

5. Justifier les formules (6) et (7) — on expliquera en particulier pourquoi les fonctions considérées sont bien définies et dérivables. Donner une formule explicite pour la magnétisation moyenne $\mathbb{E}_{\alpha,\beta}[M_n]$ en fonction de n, α et β. Quel est le terme dominant de cette expression lorsque n tend vers l'infini ? Retrouvez l'expression asymptotique de la magnétisation moyenne. Commenter cette formule.

6. On suppose donné un algorithme `Configuration`(n, α, β) qui construit une configuration de spins aléatoires sous la loi (2). Proposer un ou plusieurs algorithmes qui mettent en valeur le théorème 4. Donner les détails de la preuve de ce théorème.

7. Expliquer pourquoi l'équation (8) définit bien une chaîne de Markov sur l'espace des configurations (on pourra expliciter la matrice de transition). Dessiner le graphe des transitions de cette chaîne lorsque $E = [\![1, 2]\!] \subset \mathbb{Z}$. Montrer que la loi d'Ising $\mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\cdot]$ donnée par la formule (1) est réversible pour cette chaîne de Markov :
$$\forall \sigma, \sigma', \;\; \mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\sigma]\, P(\sigma, \sigma') = \mathbb{P}_{\alpha,\beta}[\sigma']\, P(\sigma', \sigma).$$
   Rappeler pourquoi ceci implique l'invariance de la mesure. Énoncer précisément dans le contexte du théoréme 5 le théorème ergodique satisfait par les lois des configurations $\sigma^{(k)}$, $k \to \infty$.

8. Rédiger un programme qui permet d'obtenir les configurations de la figure 1. Commenter ces simulations.