Méthodes numériques pour l'étude de la dynamique des phénomènes critiques : application aux verres de spins

Jean Christian Angles d'Auriac

▶ **To cite this version:**

Jean Christian Angles d'Auriac. Méthodes numériques pour l'étude de la dynamique des phénomènes critiques : application aux verres de spins. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1981. Français. NNT : . tel-00294241

HAL Id: tel-00294241

https://theses.hal.science/tel-00294241

Submitted on 9 Jul 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

présentée à

l' Université Scientifique et Médicale de Grenoble

pour obtenir le grade de
DOCTEUR INGENIEUR

Mathématiques appliquées

par

Jean-Christian ANGLES d'AURIAC

METHODES NUMERIQUES POUR L'ETUDE DE LA DYNAMIQUE DES PHENOMENES CRITIQUES. APPLICATION AUX VERRES DE SPINS.

These soutenue le 17 Février 1981 devant la commission d'examen

N. GASTINEL	Président
A. EBERHARD	Examinateurs
R. MAYNARD	
R. RAMMAL	
F. ROBERT	
R. TOURNIER	

UNIVERSITE SCIENTIFIQUE ET MEDICALE DE GRENOBLE

Monsieur Gabriel CAU : Président
Monsieur Joseph KLEIN : Vice-Président

MEMBRES DU CORPS ENSEIGNANT DE L'U.S.M.G.

PROFESSEURS TITULAIRES

MM.	AMBLARD Pierre	Clinique de dermatologie
	ARNAUD Paul	Chimie
	ARVIEU Robert	I.S.N.
	AUBERT Guy	Physique
	AYANT Yves	Physique approfondie
Mme	BARBIER Marie-Jeanne	Electrochimie
MM.	BARBIER Jean-Claude	Physique expérimentale
	BARBIER Reynold	Géologie appliquée
	BARJON Robert	Physique nucléaire
	BARNOUD Fernand	Biosynthèse de la cellulose
	BARRA Jean-René	Statistiques
	BARRIE Joseph	Clinique chirurgicale A
	BEAUDOING André	Clinique de pédiatrie et puériculture
	BELORIZKY Elie	Physique
	BARNARD Alain	Mathématiques pures
Mme	BERTRANDIAS Françoise	Mathématiques pures
MM.	BERTRANDIAS Jean-Paul	Mathématiques pures
	BEZES Henri	Clinique chirurgicale et traumatologie
	BLAMBERT Maurice	Mathématiques pures
	BOLLIET Louis	Informatique (I.U.T. B)
	BONNET Jean-Louis	Clinique ophtalmologie
	BONNET-EYMARD Joseph	Clinique hépato-gastro-entérologie
Mme	BONNIER Marie-Jeanne	Chimie générale
MM.	BOUCHERLE André	Chimie et toxicologie
	BOUCHEZ Robert	Physique nucléaire
	BOUSSARD Jean-Claude	Mathématiques appliquées
	BOUTET DE MONVEL Louis	Mathématiques pures
	BRAVARD Yves	Géographie
	CABANEL Guy	Clinique rhumatologique et hydrologique
	CALAS François	Anatomie
	CARLIER Georges	Biologie végétale
	CARRAZ Gilbert	Biologie animale et pharmacodynamie

.../...

MM.	CAU Gabriel	Médecine légale et toxicologie
	CAUQUIS Georges	Chimie organique
	CHABAUTY Claude	Mathématiques pures
	CHARACHON Robert	Clinique ot-rhino-laryngologique
	CHATEAU Robert	Clinique de neurologie
	CHIBON Pierre	Biologie animale
	COEUR André	Pharmacie chimique et chimie analytique
	COUDERC Pierre	Anatomie pathologique
	DEBELMAS Jacques	Géologie générale
	DEGRANGE Charles	Zoologie
	DELORMAS Pierre	Pneumophtisiologie
	DEPORTES Charles	Chimie minérale
	DESRE Pierre	Métallurgie
	DODU Jacques	Mécanique appliquée (I.U.T. I)
	DOLIQUE Jean-Michel	Physique des plasmas
	DREYFUS Bernard	Thermodynamique
	DUCROS Pierre	Cristallographie
	FONTAINE Jean-Marc	Mathématiques pures
	GAGNAIRE Didier	Chimie physique
	GALVANI Octave	Mathématiques pures
	GASTINEL Noël	Analyse numérique
	GAVEND Michel	Pharmacologie
	GEINDRE Michel	Electroradiologie
	GERBER Robert	Mathématiques pures
	GERMAIN Jean-Pierre	Mécanique
	GIRAUD Pierre	Géologie
	JANIN Bernard	Géographie
	KAHANE André	Physique générale
	KLEIN Joseph	Mathématiques pures
	KOSZUL Jean-Louis	Mathématiques pures
	KRAVTCHENKO Julien	Mécanique
	LACAZE Albert	Thermodynamique
	LACHARME Jean	Biologie végétale
Mme	LAJZEROWICZ Janine	Physique
MM.	LAJZEROWICZ Joseph	Physique
	LATREILLE René	Chirurgie générale
	LATURAZE Jean	Biochimie pharmaceutique
	LAURENT Pierre	Mathématiques appliquées
	LEDRU Jean	Clinique médicale B
	LE ROY Philippe	Mécanique (I.U.T. I)

.../...

MM.	LLIBOUTRY Louis	Géophysique
	LOISEAUX Jean-Marie	Sciences nucléaires
	LONGEQUEUE Jean-Pierre	Physique nucléaire
	LOUP Jean	Géographie
Mlle	LUTZ Elisabeth	Mathématiques pures
MM.	MALINAS Yves	Clinique obstétricale
	MARTIN-NOEL Pierre	Clinique cardiologique
	MAYNARD Roger	Physique du solide
	MAZARE Yves	Clinique Médicale A
	MICHEL Robert	Minéralogie et pétrographie
	MICOUD Max	Clinique maladies infectieuses
	MOURIQUAND Claude	Histologie
	MOUSSA André	Chimie nucléaire
	NEGRE Robert	Mécanique
	NOZIERES Philippe	Spectrométrie physique
	OZENDA Paul	Botanique
	PAYAN Jean-Jacques	Mathématiques pures
	PEBAY-PEYROULA Jean-Claude	Physique
	PERRET Jean	Séméiologie médicale (neurologie)
	RASSAT André	Chimie systématique
	RENARD Michel	Thermodynamique
	REVOL Michel	Urologie
	RINALDI Renaud	Physique
	DE ROUGEMONT Jacques	Neuro-Chirurgie
	SARRAZIN Roger	Clinique chirurgicale B
	SEIGNEURIN Raymond	Microbiologie et hygiène
	SENGEL Philippe	Zoologie
	SIBILLE Robert	Construction mécanique (I.U.T. I)
	SOUTIF Michel	Physique générale
	TANCHE Maurice	Physiologie
	VAILLANT François	Zoologie
	VALENTIN Jacques	Physique nucléaire
Mme	VERAIN Alice	Pharmacie galénique
MM.	VERAIN André	Physique biophysique
	VEYRET Paul	Géographie
	VIGNAIS Pierre	Biochimie médicale

.../...

PROFESSEURS ASSOCIES

MM.	CRABBE Pierre	CERMO
	SUNIER Jules	Physique

PROFESSEURS SANS CHAIRE

Mlle	AGNIUS-DELORS Claudine	Physique pharmaceutique
	ALARY Josette	Chimie analytique
MM.	AMBROISE-THOMAS Pierre	Parasitologie
	ARMAND Gilbert	Géographie
	BENZAKEN Claude	Mathématiques appliquées
	BIAREZ Jean-Pierre	Mécanique
	BILLET Jean	Géographie
	BOUCHET Yves	Anatomie
	BRUGEL Lucien	Energétique (I.U.T. I)
	BUISSON René	Physique (I.U.T. I)
	BUTEL Jean	Orthopédie
	COHEN-ADDAD Jean-Pierre	Spectrométrie physique
	COLOMB Maurice	Biochimie médicale
	CONTE René	Physique (I.U.T. I)
	DELOBEL Claude	M.I.A.G.
	DEPASSEL Roger	Mécanique des fluides
	GAUTRON René	Chimie
	GIDON Paul	Géologie et minéralogie
	GLENAT René	Chimie organique
	GROULADE Joseph	Biochimie médicale
	HACQUES Gérard	Calcul numérique
	HOLLARD Daniel	Hématologie
	HUGONOT Robert	Hygiène et médecine préventive
	IDELMAN Simon	Physiologie animale
	JOLY Jean-René	Mathématiques pures
	JULLIEN Pierre	Mathématiques appliquées
Mme	KAHANE Josette	Physique
MM.	KRAKOWIACK Sacha	Mathématiques appliquées
	KUHN Gérard	Physique (I.U.T. I)
	LUU DUC Cuong	Chimie organique - pharmacie
	MICHOULIER Jean	Physique (I.U.T. I)
Mme	MINIER Colette	Physique (I.U.T. I)

.../...

MM.	PELMONT Jean	Biochimie
	PERRIAUX Jean-Jacques	Géologie et minéralogie
	PFISTER Jean-Claude	Physique du solide
Mlle	PIERY Yvette	Physiologie animale
MM.	RAYNAUD Hervé	M.I.A.G.
	REBECQ Jacques	Biologie (CUS)
	REYMOND Jean-Charles	Chirurgie générale
	RICHARD Lucien	Biologie végétale
Mme	RINAUDO Marguerite	Chimie macromoléculaire
MM.	SARROT-REYNAULD Jean	Géologie
	SIROT Louis	Chirurgie générale
Mme	SOUTIF Jeanne	Physique générale
MM.	STIEGLITZ Paul	Anesthésiologie
	VIALON Pierre	Géologie
	VAN CUTSEM Bernard	Mathématiques appliquées

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

MM.	ARMAND Yves	Chimie (I.U.T. I)
	BACHELOT Yvan	Endocrinologie
	BARGE Michel	Neuro-chirurgie
	BEGUIN Claude	Chimie organique
Mme	BERIEL Hélène	Pharmacodynamie
MM.	BOST Michel	Pédiatrie
	BOUCHARLAT Jacques	Psychiatrie adultes
Mme	BOUCHE Liane	Mathématiques (CUS)
MM.	BRODEAU François	Mathématiques (I.U.T. B) (Personne étrangère habilitée à être directeur de thèse)
	BERNARD Pierre	Gynécologie
	CHAMBAZ Edmond	Biochimie médicale
	CHAMPETIER Jean	Anatomie et organogénèse
	CHARDON Michel	Géographie
	CHERADAME Hervé	Chimie papetière
	CHIAVERINA Jean	Biologie appliquée (EFP)
	COLIN DE VERDIERE Yves	Mathématiques pures
	CONTAMIN Charles	Chirurgie thoracique et cardio-vasculaire
	CORDONNER Daniel	Néphrologie
	COULOMB Max	Radiologie
	CROUZET Guy	Radiologie

.../...

MM.	CYROT Michel	Physique du solide
	DENIS Bernard	Cardiologie
	DOUCE Roland	Physiologie végétale
	DUSSAUD René	Mathématiques (CUS)
Mme	ETERRADOSSI Jacqueline	Physiologie
MM.	FAURE Jacques	Médecine légale
	FAURE Gilbert	Urologie
	GAUTIER Robert	Chirurgie générale
	GIDON Maurice	Géologie
	GROS Yves	Physique (I.U.T. I)
	GUIGNIER Michel	Thérapeutique
	GUITTON Jacques	Chimie
	HICTER Pierre	Chimie
	JALBERT Pierre	Histologie
	JUNIEN-LAVILLAVROY Claude	O.R.L.
	KOLODIE Lucien	Hématologie
	LE NOC Pierre	Bactériologie-virologie
	MACHE Régis	Physiologie végétale
	MAGNIN Robert	Hygiène et médecine préventive
	MALLION Jean-Michel	Médecine du travail
	MARECHAL Jean	Mécanique (I.U.T. I)
	MARTIN-BOUYER Michel	Chimie (CUS)
	MASSOT Christian	Médecine interne
	NEMOZ Alain	Thermodynamique
	NOUGARET Marcel	Automatique (I.U.T. I)
	PARAMELLE Bernard	Pneumologie
	PECCOUD François	Analyse (I.U.T. B) (Personnalité étrangère habilitée à être directeur de thèse)
	PEFFEN René	Métallurgie (I.U.T. I)
	PERRIER Guy	Géophysique-glaciologie
	PHELIP Xavier	Rhumatologie
	RACHALL Michel	Médecine interne
	RACINET Claude	Gynécologie et obstétrique
	RAMBAUD Pierre	Pédiatrie
	RAPHAEL Bernard	Stomatologie
Mme	RENAUDET Jacqueline	Bactériologie (pharmacie)
MM.	ROBERT Jean-Bernard	Chimie-physique
	ROMIER Guy	Mathématiques (I.U.T. B) (Personnalité étrangère habilitée à être directeur de thèse)
	SAKAROVITCH Michel	Mathématiques appliquées

.../...

MM.	SCHAERER René	Cancérologie
Mme	SEIGLE-MURANDI Françoise	Crytogamie
MM.	STOEBNER Pierre	Anatomie pathologie
	STUTZ Pierre	Mécanique
	VROUSOS Constantin	Radiologie

MAITRES DE CONFERENCES ASSOCIES

MM.	DEVINE Roderick	Spectro Physique
	KANEKO Akira	Mathématiques pures
	JOHNSON Thomas	Mathématiques appliquées
	RAY Tuhina	Physique

MAITRE DE CONFERENCES DELEGUE

M.	ROCHAT Jacques	Hygiène et hydrologie (pharmacie)

Fait à Saint Martin d'Hères, novembre 1977

Je remercie,

Monsieur GASTINEL de présider mon jury,

Monsieur TOURNIER et Monsieur ROBERT d'y participer,

Monsieur EBERHARD des conseils qu'il m'a donnés et des programmes qu'il m'a fournis,

Monsieur MAYNARD et Monsieur RAMMAL de m'avoir beaucoup aidé dans ce travail et intéressé à la physique,

Madame HOTTELLIER et le service de reprographie pour la frappe et le tirage de cette thèse.

SOMMAIRE

INTRODUCTION

CHAPITRE I : LE PROBLEME PHYSIQUE ; LES MODELES ; LES METHODES.

. Les différents modèles
. les problèmes
. les méthodes.

CHAPITRE II : LA METHODE DE MONTE-CARLO

I) Présentation du cadre
II) Simulation
III) Chaîne de Markov
IV) Méthode de Monte-Carlo
V) Utilisation de l'algorithme de Monte-Carlo pour la recherche du fondamental
VI) Résultat et interprétation.

Conclusion

CHAPITRE III : LA METHODE B.K.L.

I) La relaxation d'un verre de spins : un problème de file d'attente
II) L'algorithme B.K.L.
III) Comparaison entre la méthode B.K.L. et la méthode de Monte-Carlo

Conclusion

CHAPITRE IV : ETUDE DU BRUIT

I) La fonction d'autocorrélation
II) Calcul de la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation
III) Générateurs de bruit
IV) Résultats numériques des générateurs de bruit

CHAPITRE V : PRESENTATION DES RESULTATS

I) Modèle d'Ising
II) Verre de spin

Conclusion

CHAPITRE VI : CALCUL DE FONCTION DE PARTITION

I) Aspect théorique
II) Calcul pratique

ANNEXE : LES LOIS D'ECHELLES.

INTRODUCTION

Un des problèmes dans l'étude des verres de spins réside dans les très grandes difficultés pour réaliser les expériences physiques. Les très basses températures, les mesures très fines, etc. sont autant d'obstacles. C'est pourquoi, la simulation numérique peut être un précieux recours.

Ce travail consiste en l'écriture d'un code de simulation numérique d'une expérience de relaxation d'un verre de spins et d'analyse des résultats (notamment spectre de puissance du bruit de différentes fonctions de réponse du système : aimantation ou énergie).

Les programmes ont été écrit sous forme très conversationnelle, de manière à rapprocher le plus possible l'utilisateur physicien des conditions habituelles d'expérience.

Une méthode est employée ici pour la première fois dans ce type de problème, qui améliore très sensiblement les performances de l'algorithme traditionnel, accélérant les processus de relaxation par un facteur variant de 10 à 10^4 suivant la température. On peut alors envisager des relaxations asymptotiques c'est-à-dire aux temps longs, et s'interroger sur l'existence d'un ralentissement critique, d'un gel de basses températures, d'une transition de phase.

En particulier, l'exposant critique μ du pouvoir spectral et l'exposant z de l'évolution en taille sont calculés.

CHAPITRE I

LE PROBLEME PHYSIQUE ; LES MODELES ; LES METHODES

Le nom de "Verre de Spins" a été donné, il y a quelques années aux alliages dilués d'impuretés magnétiques dans une matrice métallique, typiquement Au Fe, Cu Mn, ..., etc. Les impuretés sont réparties au hasard dans le cristal, et leurs moments magnétiques (spins) sont couplés par des intéractions du type Rudermann-Ktnel (R.K.). Cette intéraction varie en fonction de la distance et peut être de deux sortes, c'est-à-dire que deux spins auront tendance à pointer dans la même direction (configuration parallèle) lorsque l'intéraction est positive (ferromagnétique), ou bien à se disposer antiparallèlement lorsque l'intéraction est négative (antiferromagnétique). C'est cette alternance de signe qui fait que l'intéraction entre les spins présente un aspect aléatoire et conflictuel, incompatible avec une mise en ordre conventionnelle ferromagnétique ou antiferromagnétique. Plus précisément, on peut considérer différents modèles, représentant plus ou moins fidèlement, mais aussi moins ou plus simplement, différents Verres de Spins.

LES DIFFERENTS MODELES

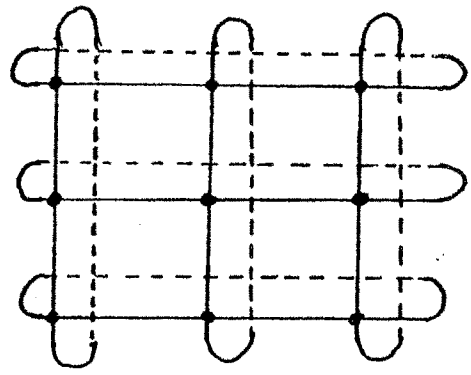
Tous ces modèles sont constitués d'un maillage comportant des liaisons et des noeuds. Les liaisons sont affectées de valeur numérique, et les noeuds portent un spin qui peut être un vecteur de IR^3, de IR^2 ou un élément de {-1, +1}, indiquant que le spin est "up" (1) ou "down" (-1).

- Tous les modèles étudiés ici sont à spins binaires.
- Les points importants sur la géométrie du modèle sont les suivants :

. Dimensionalité : le maillage est en général plan ou dans IR^3.

. Forme de la grille : en général, le réseau est carré à 4 voisins ou "en tomettes" à 3 voisins.

. Condition de bord : le maillage peut être à bord libre, ou sur un tore, ou antisymétrique.



Maillage carré 3 x 3 torique.

- Il faut enfin connaître, pour préciser un modèle le type des liaisons :

ex 1 : toutes les liaisons à +1 ;
ex 2 : toutes les liaisons à -1 ;
ex 3 : chaque liaison à +1 avec probabilité p ou à -1 avec probabilité 1-p ;
ex 4 : chaque liaison est affectée à un réel choisi uniformément entre -1 et +1.
ex 5 : chaque liaison est affectée à un réel choisi suivant une loi $\mathcal{N}(0,1)$.

Un modèle sera donc précisé par la connaissance de quatre facteurs.

$\mathcal{M}$: (Dimensionalité, forme du maillage, condition de bord, type des liaisons).

Un modèle qui a été entièrement étudié est le "Modèle d'Ising" ainsi défini :

(2, mailage carré, torique, liaisons a +1).

Deux autres modèles seront souvent cités ici :

Modèle "$\pm$ J" = (2, maillage carré, torique, $J_{ij} = \begin{cases} +1 \text{ avec proba } 1/2 \\ -1 \text{ avec proba } 1/2 \end{cases}$)

Modèle "J uniforme" = (2, maillage carré, torique, J_{ij} uniforme dans $[-1, +1]$).

LES PROBLEMES

Soit une liaison J_{ij} qui joint le spin σ_i au spin σ_j, on définit l'énergie de cette liaison par $E(J_{ij}) = - J_{ij}\ \sigma_i\ \sigma_j$.

L'énergie $E(\sigma)$ du verre de spin dans l'état de configuration de spin σ est la somme des énergies de ses liaisons ; l'aimantation est alors la somme des spins.

Soit S l'ensemble des configurations de spin σ sur une grille donnée (une grille à N spins donne 2^N configurations) la fonction de partition est :

$$Z(J, \beta) = \sum_{\sigma \in S} e^{-\beta E(\sigma)}$$

où J représente la configuration des liaisons J_{ij} et $\beta = \frac{1}{kT}$

k : constante de Boltzmann ;

T : température.

Un état fondamental est une configuration de spin d'énergie minimum. Un état non fondamental est un état excité. Un verre de spin à toujours au moins deux fondamentaux. (Deux configurations dont les spins sont opposés 2 à 2 sont de même énergie), s'il en a plus de deux, il est dit dégénéré.

Les problèmes posés sont de deux types :

- Problèmes statiques : Recherche des fondamentaux ; effet de la géométrie du modèle, de taille ; problème de percolation.

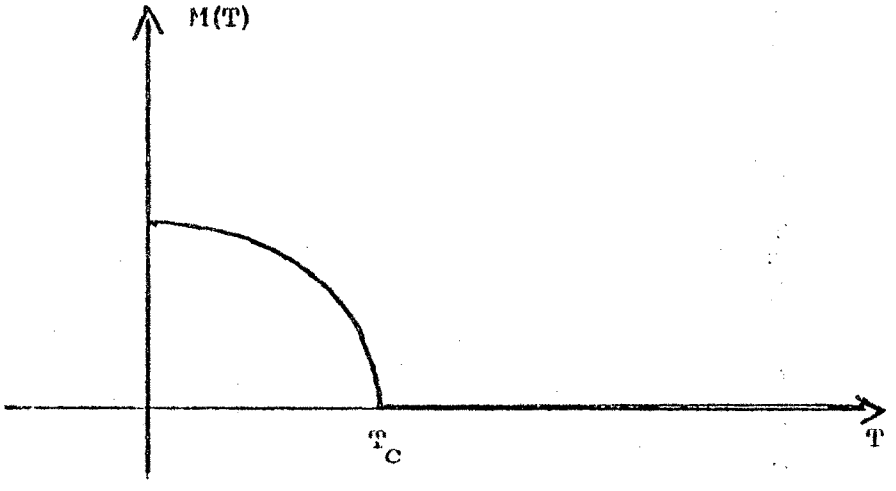
- Problèmes dynamiques : évolution du système dans le temps depuis un état vers un autre.

Le système évolue en effet dans l'espace des configurations en retournant un spin à la fois. Ainsi, si l'on a N spins (valant 0 ou 1), chacun peut être associé de manière évidente à un sommet de l'hypercube de IR^N ; le système évaluera d'une configuration à une autre (c'est-à-dire d'un sommet à un autre) par les arêtes de l'hypercube. Cette évolution se fera suivant "l'équation maîtresse" (Master equation) comme étudié aux chapitres suivants. (Modèle de GLAUBER 1963).

L'existence de transition de phase magnétique (transition ordre-désordre) lors de ces évolutions est un point particulièrement discuté depus longtemps. En effet, le modèle d'Ising (défini plus haut) étudié par Onsager en 1944 [I] fait apparaître une transition de phase Ordre-désordre :

Un système d'Ising est un système ferromagnétique, c'est-à-dire qu'à la température 0 °K il se trouve dans une phase magnétique ferromagnétique, où tous les spins sont parallèles (qui est bien sûr un fondamental). L'aimantation par spins, pour un tel système, est donc égale à 1

à la température nulle. Or on constate que la courbe représentant l'aimantation par spins M(T) en fonction de la température (T) a l'allure suivante :



Ce qui signifie qu'à T = 0 il existe une corrélation à longue portée des spins (paramètre d'ordre), que celle-ci diminue quand T augmente, jusqu'à s'annuler définitivement à T_c, marquant la transition entre une phase ordonnée ferromagnétique à $T < T_c$ et une phase désordonnée parasymétrique à $T > T_c$.

De plus, une telle transition de phase s'accompagne de singularités sur d'autres fonctions de réponse du système telle que la susceptibilité, la chaleur spécifique, etc.

Quittons maintenant le modèle d'Ising. On a observé des pics de susceptibilité à une température Tg sur des verres de spins se rapprochant des modèles $\pm$ J et J uniforme, qui sembleraient indiquer l'existence d'une phase magnétique à basse température en opposition à une phase paramagnétique à haute température. C'est l'étude de tels phénomènes qui est l'objet des chapitres suivants.

LES METHODES

Pour résoudre ces problèmes, différentes méthodes sont proposées, avec chacune leurs points forts et leurs faiblesses.

Les méthodes de simulation proposent de simuler sur un calculateur le comportement d'un verre de spin représenté par un modèle judicieux du type de ceux décrits précédemment. Il s'agit en somme de faire faire à l'ordinateur l'expérience que l'on ne peut réaliser physiquement. On pourra donc se rapprocher aussi près que désiré de conditions physiquement inaccessibles (par exemple T = 0) et aussi connaître n'importe quelle fonction de réponse du système. Les limitations apparaissent cependant avec les questions de taille, et de durée de simulation. A l'origine, ces méthdoes étaient employées pour des problèmes de types statiques ([II]) mais elles s'avèrent inefficaces (voir chapitre II). Cependant, elles trouvent un intérêt pour les problèmes du type dynamique (chapitre III, IV).

On peut se représenter l'évolution d'un verre de spin comme une file d'attente : les "clients" sont les spins, qui attendent d'être retournés (c'est-à-dire servis !). Cette remarque fait apparaître tout de suite que l'on pourra traiter le problème de 2 manières :

- de manière discrète (ou période par période) c'est la méthode de Monte-Carlo ;
- de manière continue (ou évènement par évènement), c'est la méthode B.K.L. (Bortz, Kalos et Leibowitz).

Cette dernière est extrêmement avantageuse (pour des raisons exposées dans les chapitres suivants). Quelques unes des très nombreuses études déjà faites par la méthdoe de Monte-Carlo sont refaites ici de manière beaucoup plus poussée par la méthode de Kalos.

Les méthodes analytiques se proposent de déterminer la fonction de partition, pour en déduire les fondamentaux ainsi que l'existence ou l'inexistence de transition de phase.
Une méthode de calcul de Z par résolution d'un déterminant est proposée au chapitre VI.

Les méthodes issues de la recherche opérationnelle, de plus, sont très efficaces pour les problèmes de type statique (recherche du fondamental ...).

CHAPITRE II

LA METHODE DE MONTE-CARLO

I - PRESENTATION DU CADRE

La méthode de M.C. a beaucoup été employée jusqu'ici, pour simuler des expériences sur des verres de spins. Les principaux intérêts sont sa souplesse et sa simplicité.

On peut l'employer sur des modèles quelconques avec des algorithmes relativement simples. Cependant, pour des facilités de notation, on présente ici le cas des modèles du type :

(2, maillage carré, quelconque, quelconque).

Le cas d'une dimensionalité plus grande et d'un maillage quelconque n'apporte aucune difficulté de plus pour la justification de la méthode, sinon un alourdissement des notations.

Référence pour la présentation de la méthode de Monte-Carlo [1].

II - SIMULATION

Partant d'une configuration initiale μ, nous allons simuler son évolution au cours du temps vers un état d'équilibre.

Remarque fondamentale : Etant donnée une répartition de liaisons à x fixé, il existe 2^{N^2} configurations μ possibles qui correspondent aux deux orientations possibles pour les N^2 spins. Donc, l'ensemble des états par lesquels le système peut évoluer est fini !

1. Equation maîtresse :

Considérons notre système de spins et un processus aléatoire décrivant son évolution au cours du temps. Soit $(X_t)_{t>0}$ la famille de variables aléatoires associées : X_t = "état du système à l'instant t" et soit W_{ij} la fonction de transition de l'état i à l'état j. Entre un instant t et un instant t + dt, on a la relation :

$$P(X_{t+dt} = i) - P(X_t = i) = \sum_{j \neq i} [W_{ij} P(X_t = j) - W_{ij} P(X_t = i) \, dt$$

qui n'est pas autre chose que la loi de conservation au noeud i du graphe des états.

On en déduit par passage à la limite l'équation maîtresse :

$$\frac{\partial P}{\partial t} (X_t = i) = \sum_{j \neq i} (W_{ij} P(X_t = j) - W_{ij} P(X_t = i)).$$

2. Principe du bilan détaillé

Supposons qu'au bout d'un temps suffisamment long un régime stationnaire se soit établi. Alors l'équation maîtresse devient, puisque $P(X_t = i) = \text{cste}$ (*).

$$\sum_{j \neq i} (W_{ij} P(X = j) - W_{ij} P(X = i)) = 0$$

Ecrivons cela autrement, considérant le fait que $\sum_j W_{ij} \neq 0$ (sinon on resterait toujours en place car $W_{ij} \geq 0$) en posant $P_{ij} = \frac{W_{ij}}{\sum_j W_{ij}}$, il vient :

$$P(X = i) = \sum_j P_{ij} P(X = j) \qquad (1)$$

On reconnaît là une propriété des chaînes de Markov. Nous allons donc chercher un jeu de probabilités de transition P_{ij}.

Celles-ci forment une matrice de transition P d'une chaîne de Markov homogène qui vérifie alors l'équation maîtresse d'évolution de notre système de particules.

Remarque :

En fait, nous allons construire une chaîne de Markov vérifiant une condition plus forte que (1) qui est :

$$(2) \quad \forall i,j \qquad P(x=i)\ P_{ij} = P(X=j)\ P_{ji}$$

qui est appelée principe du bilan détaillé (detailed balance). On a, bien sûr (2) => (1) comme il est démontré dans III, c).

3. Application de la distribution limite de Boltzmann :

En mécanique statistique, un résultat très important est que $P(X = i)$ est proportionnel à exp (- Energie (i)/$k_B T$) où k_B est la constante de Boltzmann c'est-à-dire que notre distribution limite doit vérifier :

$$P(X = i) \ / \ P(X = j) = \exp\left((+ E(i) - E(j)) \ / \ k_B T\right)$$

4. Conclusion :

Ces considérations physiques nous ramènent au problème suivant :

> Trouver une chaîne de Markov homogène, "suffisamment régulière" dont la distribution limite est celle de Boltzmann.

Remarque :

(en "suffisamment régulière" nous entendons la chose suivante :

partant d'une configuration (d'un état) initial quelconque, on doit aboutir au bout d'un temps plus ou moins long (mais fini) à une configuration d'énergie minimale (quitte à cycler ensuite entre plusieurs états de ce type).

Les conditions nécessaires à ceci sont précisées dans III) : inéductibilité et apériodicité et tous les états positifs.

III - CHAINE DE MARKOV :

Ici, le temps est discrétisé en intervalles réguliers et l'on parlera de l'instant n pour $n \in \mathbb{N}$. Rappelons d'abord quelques définitions et le théorème de base sur les chaînes de Markov que nous invoquerons plus tard.

1. Rappels sur les chaînes de Markov :

Soit un système S évoluant au cours du temps entre un nombre fini d'états 1,..., m. Soit $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ la suite de variables aléatoires X_n = "état de système à l'instant n". Soit q_n le vecteur de composantes $q_n^i = P(X_n = i)$.

Définition :

On dit qu'on a une chaîne de Markov homogène si il existe une matrice $P = (P_{ij})_{i,j\leq n}$ telle que $\forall\, n \geq 1$, $q_n = P\, q_{n-1}$.

→ P doit de plus vérifier : $\forall i$, $\Sigma\, p_{ij} = 1$ et $P_{ij} \geq 0, \forall$ c'est-à-dire P doit être stochastique. On appelle P la matrice de transition et les P_{ij} les probabilités de transition.

Propriété 1 :

Considérons le graphe associé à la matrice P ($i \to j \iff P_{ij} > 0$). Si celui-ci est fortement connexe on dit que la chaîne associée est irréductible.

Propriété 2 :

Notons $P_{ij}^{(n)}$ le terme à la i^e ligne et à la j^e colonne de P^n. Si $P_{ii}^{(n)} \neq 0$ seulement pour n multiple de d, alors l'état i est dit périodique de période d. (dans le graphe associé, il existe des cycles de longueur d passant par i et ce sont les plus courts). Dans le cas d = 1, i est dit apériodique. La chaîne de Markov est dite apériodique si tous ses états sont apériodiques.

Propriété 3 :

Posons $f_{ij}^{(n)} = P(X_t = j \quad X_{t-1} \mid j, \ldots, X_{t-n+1} \neq j, X_{t-n} = f_{ii}^{(n)}$ est la probabilité de retrouver l'état i après n instants où il n'est pas apparu. Si $\sum_n f_{ii}^{(n)} = 1$ alors l'état i est dit récurrent. Dans ce cas, l'état i est dit récurrent positif (ou tout simplement positif si $\mathbb{E}(f_{ii}) = \sum_n n f_{ii}^{(n)}$ existe.

Théorème de base sur le comportement asymptotique d'une chaîne de Markov homogène : Si P est la matrice de transition d'une chaîne de Markov irréductible homogène apériodique, alors :

S'il existe un vecteur ligne π tel que $\pi > 0$, $\sum_j \pi_j = 1$ et $\pi P = \pi$ alors

I) π est unique

II) tous les états sont positifs

III) $(\lim_{n\to\infty} P_{ij}^{(n)} = \pi_j, \forall i)$ (c'est-à-dire $\lim_{n\to\infty} P^n = \begin{vmatrix} \pi_1 & \pi_2 & \cdots & \pi_m \\ \pi_1 & \pi_2 & \cdots & \pi_m \end{vmatrix}$

2. Construction d'une chaîne de Markov homogène apériodique irréductible ayant pour distribution limite un vecteur π donné tel que $\pi > 0$, $\sum_j \pi_j = 1$ par la méthode de Métropolis :

Soit P^* une matrice stochastique symétrique ; construisons P de la façon suivante :

$$P_{ij} = \begin{cases} P^*_{ij} \cdot \frac{\pi_j}{\pi_i} \text{ si } \pi_j / \pi_i < 1 \\ P^*_{ij} \quad \text{si } \pi_j / \pi_i \geq 1 \end{cases} \qquad \text{si } i \neq j$$

et $\quad P_{ii} = P^*_{ii} + \sum_{j \text{ tq } \pi_j/\pi_i<1} P^*_{ij} \ (1 - \pi_j/\pi_i)$

a) P est une matrice stochastique :

. Si $i \neq j$; $P_{ij} \geq 0$ et si $i = j$, $P_{ii} = p^*_{ii} + \sum P^*_{ij} \ (1 - \pi_j/\pi_i)$ ≥ 0

donc $P_{ij} \geq 0$

. Si $i \in \{1,\ldots,m\}$: $\sum_j P^*_{ij} = P_{ii} + \sum_{j \text{ tq} < \pi_j < \pi_i} P^*_{ij}(1-\pi_j/\pi_i)$

$$+ \sum_{j \text{ tq} \pi_j < \pi_i} P^*_{ij} \ \frac{\pi_j}{\pi_i} + \sum_{j \text{ tq } \pi_j \geq \pi_i} P^*_{ij} = \sum_j P^*_{ij} = 1$$

b) On a, de plus, la propriété :

$\forall i,j \ \pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$ car :

. si $\pi_i = \pi_j$, $\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ij} \underset{\uparrow}{=} \pi_j P_{ji} = \pi_j P_{ji}$
P symétrique

. si $\pi_j \quad \pi_i$, $P_{ij} = P_{ij} \frac{\pi_j}{\pi_i} \underset{\uparrow}{=} P_{ji} \frac{\pi_j}{\pi_i} = P_{ji} \frac{\pi_j}{\pi_i}$
P symétrique

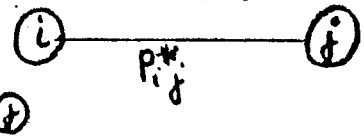
c) On en déduit :

$\pi P = \pi$ car, $\forall j$:

$$\sum_i P_{ij} \pi_i = \sum_i P_{ji} \pi_j = \pi_j \sum_i P_{ji} = \pi_j$$

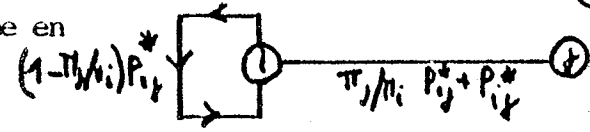
d) La chaîne de Markov homogène engendrée par P est irréductible et apériodique :

On considère P^* comme la matrice de transition d'une chaîne de Markov homogène sur les états $i = 1, \ldots, n$. Supposons que l'on soit à l'instant courant dans l'état i. On utilise P^* pour choisir un état j avec la probabilité de transition P^*_{ij}. On calcule π_j/π_i. Si $\pi_j/\pi_i \geq 1$ alors on passe à l'état j sinon, on passe à l'état i avec la probabilité π_j/π_i et on reste dans l'état i avec la probabilité $(1 - \pi_j/\pi_i$ → Si $\pi_j > 0$, Vj alors P sera irréductible apériodique si P^* l'est : car le graphe de P ne diffère du graphe de P^* que par le rajout de boucles du type :



se transforme en

donc



le passage de P^* à P conserve les caractères d'irréductibilité et d'apériodicité si $\pi > 0$.

c) Par application du théorème de base rappelé dans III-1. on en déduit que :

π est l'unique distribution limite de la chaîne de Markov homogène irréductible apériodique engendrée par P et tous les états sont positifs.

(c.q.f.d.)

IV - METHODE DE MONTE-CARLO

Appliquons les résultats du II et du III à notre problème de simulation :

1. Si l'on considère la convergence : il nous faut comme distribution limite la distribution de Boltzmann afin de converger vers un état d'équilibre. On doit donc avoir π_j = p (configuration j) = $k\, e^{-E(j)/T}$ d'après II) (en prenant E,T en unité tq $k_B = 1$, et k tel que $\sum_j \pi_j = 1$ c'est-à-dire $k = \frac{1}{\sum_j e^{-E(j)/T}}$).

Nous n'avons pas besoin de connaître k, il suffit d'avoir $\frac{\pi_i}{\pi_j} = e^{-(E(i)-E(j))/T}$. Il nous faut d'autre part vérifier le principe du bilan détaillé c'est-à-dire entre deux configurations i et j : $P_{ij}\, \pi_i = P_{ji}\, \pi_j$.
Tout ceci nous sera donné dès l'instant où nous aurons trouvé une matrice P^* stochastique, symétrique et telle que la matrice P associée à P^* par la méthode de Métropolis engendre une chaîne de Markov irréductible apériodique.

2. C'est dans le choix de P^* que l'on applique une méthode de Monte Carlo dans la mesure où l'on effectue un tirage au hasard : soit i une configuration et J(i) l'ensemble des configurations j qui ne diffèrent de i que par la valeur d'un seul spin i. On voit que Card $(J(i)) = N^2$. Posons alors :

$$P^*_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{N^2} \text{ si } j \in J(i) \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

c'est-à-dire que l'on tire de façon uniforme dans J(i) (Monte Carlo).

Montrons que P^* est I) stochastique, II) symétrique et III) irréductible.

I) $\forall i,j,\ P_{ij} \geq 0$

$$\forall i,\ \sum_j P^*_{ij} = \sum_{j \in J(i)} \frac{1}{N^2} = 1$$

II) Soient i, j acquis :

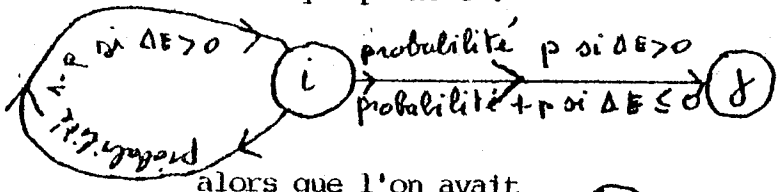
. si $j \in J(i)$ alors $i \in J(j)$ et $P^*_{ij} = \frac{1}{N^2} = P^*_{ji}$

. si $j \notin J(i)$ alors $i \notin J(j)$ et $P^*_{ij} = 0 = P^*_{ji}$

III) Soit G^* le graphe associé à P^* ; montrons que G^* est irréductible (fortement connexe). Si i et j sont deux configurations quelconques différant l'une de l'autre par la valeur de m spins. Partant de i en tirant successivement chacun de ces m spins on aboutit à j. Il existe donc bien un chemin (de longueur m) dans G^* joignant i à j.

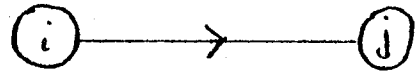
3. Prenons maintenant la matrice P associée à P^* comme dans III avec les π_j de Boltzmann. On sait que c'est la matrice de transition d'une chaîne de Markov homogène, irréductible dont la distribution limite est π (car $\pi > 0$). De plus d'après III-b) le principe du bilan détaillé est vérifié. Il nous reste seulement à vérifier que P est apériodique.

Il nous suffit de montrer qu'il existe des cycles de longueur 1 passant par n'importe quelle configuration i. Ceci résulte du fait que l'on passe du graphe G^* au graphe G de P par l'adjonction de boucles autour de chaque point i :



dans G

alors que l'on avait simplement, dans G^* :



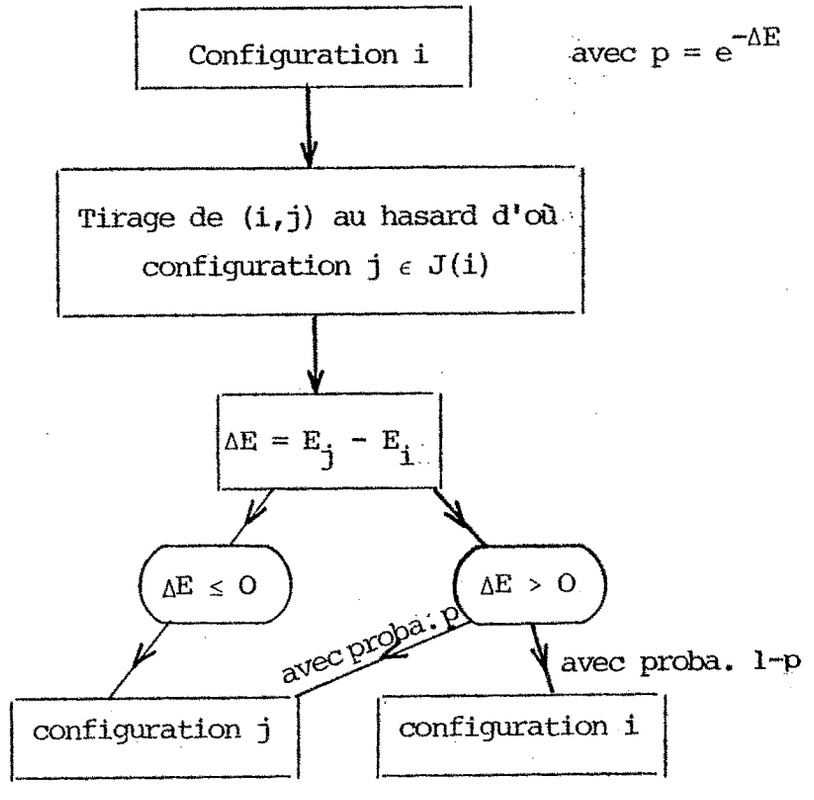
donc 1 est le diviseur commun à tous les cycles passant par i, donc G est apériodique.

CONCLUSION

Par ce procédé, nous avons engendré une chaîne de Markov homogène irréductible apériodique dont tous les états sont positifs. La distribution limite est celle de Boltzmann.
Partant d'une configuration quelconque, nous devons aboutir à une configuration d'équilibre.

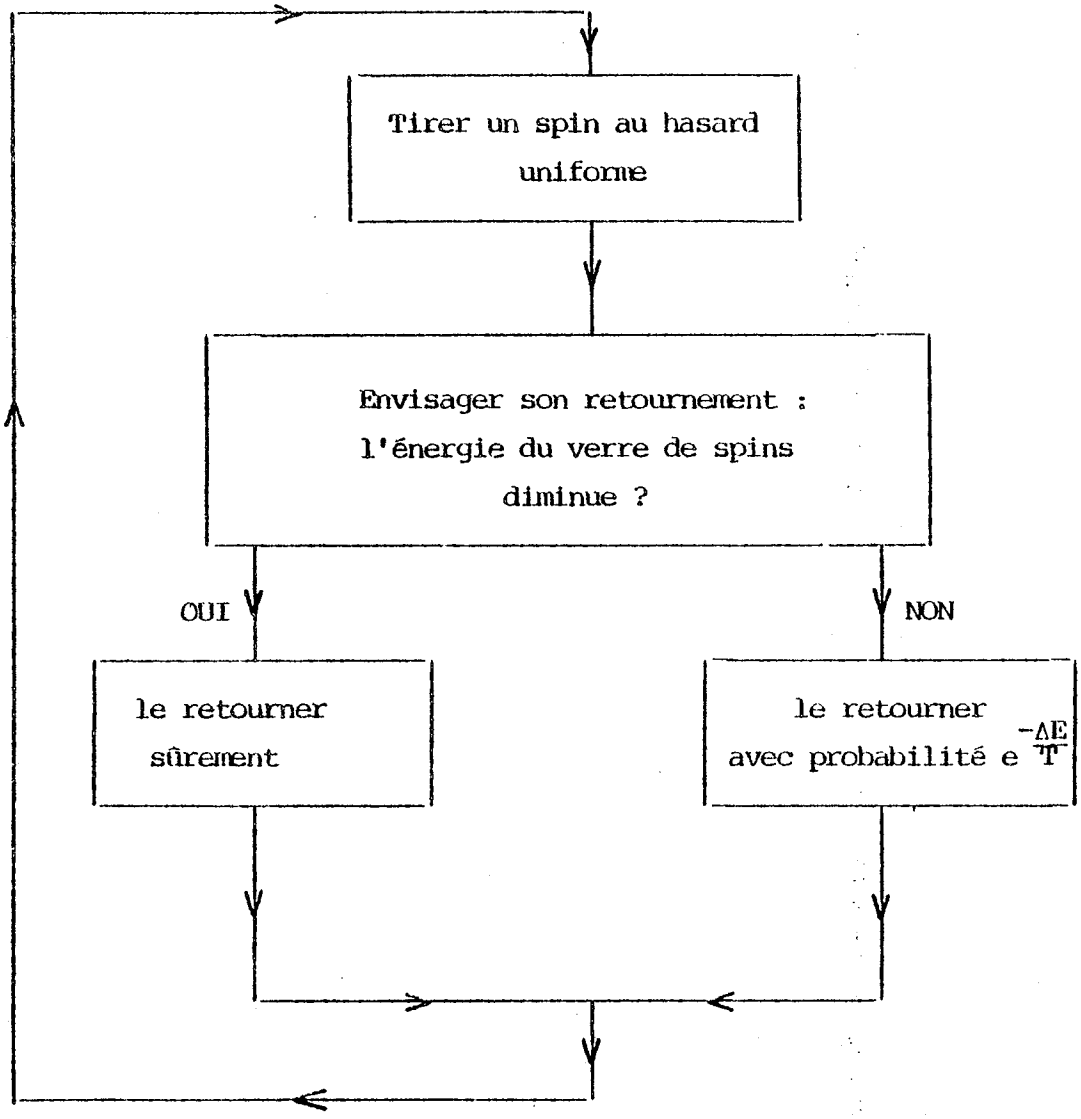
Explicitons la transition :

Nous sommes à l'état i ; tirer au hasard i configuration $j \in J(i)$, c'est tirer au hasard un spin de la configuration i. Soit j la configuration obtenue à partir de i par retournement de ce spin.
Si $\frac{\pi_j}{\pi_i} = e^{-(E_j-E_i)/k_BT} \geq 1$ autrement dit si $\Delta E = E_j - E_i \leq 0$, on passe à l'état j. Si $\frac{\pi_j}{\pi_i} < 1$ c'est-à-dire si $\Delta E = E_j - E_i > 0$ on passe à l'état j avec la probabilité $p = e^{-\Delta E/k_BT}$ et on reste dans l'état i avec la probabilité 1-p. Supposons T exprimé en unité telle que $k_B = 1$, on a finalement :



Soit encore, et cette fois dans un cas quelconque.

Algorithme de Monte-Carlo pour un modèle du type (quelconque, quelconque, quelconque, quelconque).



V - UTILISATION DE L'ALGORITHME DE MONTE-CARLO POUR LA RECHERCHE DU FONDAMENTAL

La nature entraînant les verres de spins vers un état stable : (un fondamental) à température nulle, la méthode de Monte-Carlo devrait entraîner le modèle vers un fondamental. Mais le calcul de exp $(-\frac{\Delta E}{T})$ en machine, et la génération des nombres aléatoires, n'étant qu'approximatifs, on ne converge pas en général vers un fondamental. Plus précisément :

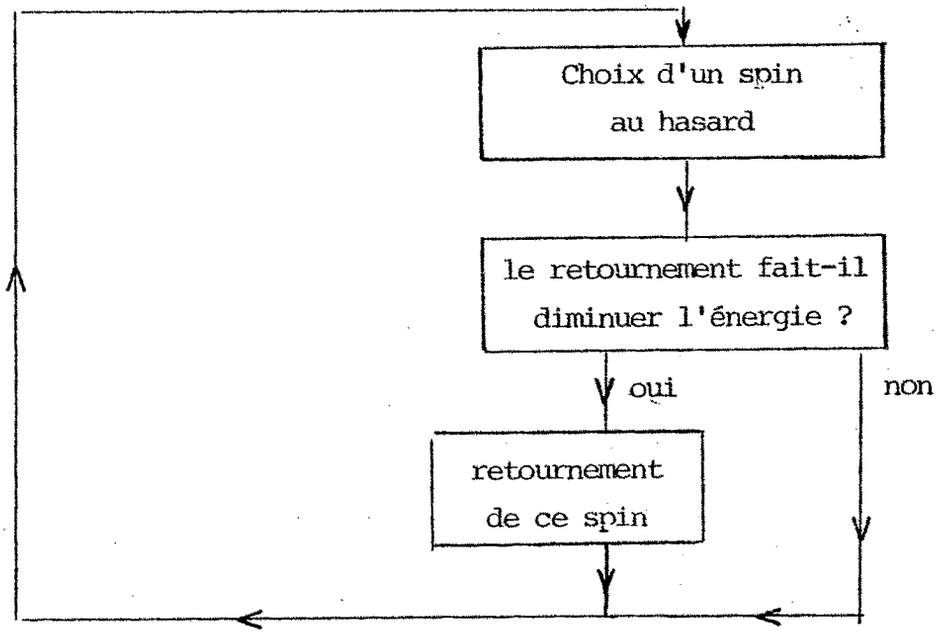
1°. L'algorithme de majorité

Pour les modèles tels que $\forall i,j \quad |J_{ij}| < 1$, ce sont les plus courants, on a max $\{|\Delta E|\} < 8$ et, dès que T est tel que exp-8/T = 0 en machine, c'est-à-dire :

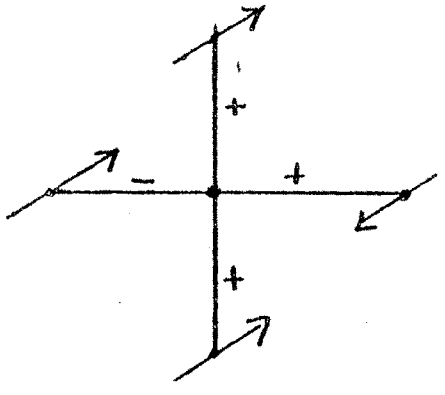
$$\exp(-8/T) < 1{,}510^{-38} \iff T < 9.18510^{-2} \simeq 0{,}1.$$

l'algorithme change : on ne retournera un spin que si l'on fait, ainsi, diminuer l'énergie. On ne pourra donc programmer l'algorithme de Monte-Carlo, mais un "algorithme de Monte-Carlo approché" qui, lui, est sensiblement différent à température faible, c'est-à-dire inférieure à 0,1.

Algorithme de Monte-Carlo réel à basse température : algorithme de majorité :



Il s'agit d'un automate cellulaire qui a été étudié en tant que tel [II], [III]. Remarquons tout d'abord que sur un maillage à quatre voisins, il peut se produire un conflit : 2 des 4 voisins entraînent le spin interrogé à "up", tandis que les 2 autres le sollicitent à "down" :



Exemple de situation conflictuelle

Différentes solutions peuvent être envisagées pour résourdre ce conflit :

- le site interrogé ne sera pas, en cas de conflit retourné, c'est-à-dire que l'on a en fait :

$$(x_i)_{n+1} = \underset{\substack{j \text{ voisins} \\ \text{de } i}}{\text{maj}} \; (\ell_{ij}\,(x_{ij})_n,\ (x_i)_n) \qquad \text{(I)}$$

où ℓ_{ij} désigne la liaison du spin i au spin j et où j désigne les spins x_{ij} qui sont voisins de i.

- le site interrogé sera, en cas de conflit, retourné : (avec les notations précédentes).

$$(x_i)_{n+1} = \underset{\substack{j \text{ voisins} \\ \text{de } i}}{\text{maj}} \; (\ell_{ij}\,(x_{ij})_n\ ,\ (\overline{x_i})_n) \qquad \text{(II)}$$

- le site sera forcé à 0 en cas de conflit :

$$(x_i)_{n+1} = \underset{\substack{j \text{ voisin} \\ \text{de } i}}{\text{maj}} \; (\ell_{ij} \; (x_{ij})_n, \; 0)$$

- on peut encore forcer le site à 1 ou tirer son retournement avec probabilité p etc...

Tous ces cas conduisent au même type de comportement.

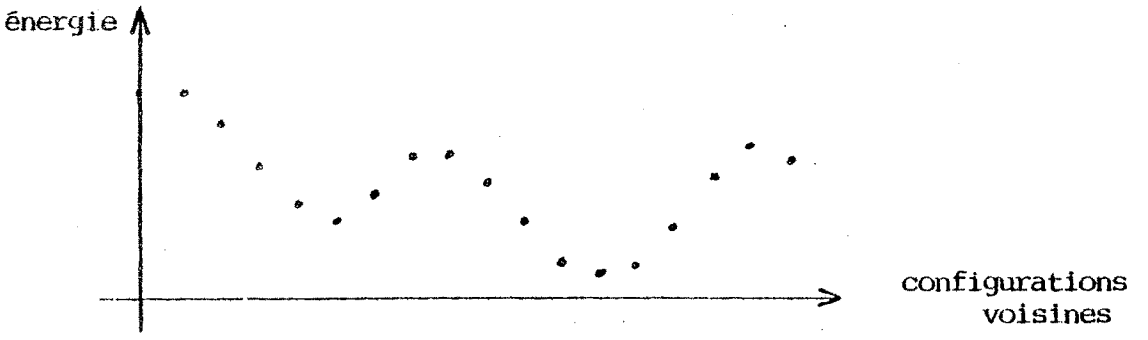
2°. Comportement de l'algorithme de majorité :

Soit N le nombre de spins (cellules). A chaque configurations de spins, associons un N-uplets $x_p = ((x_1)_p, \ldots, (x_N)_p)$

où $(x_i)_p = \begin{cases} 0 \text{ si le spin i est down} \\ 1 \text{ si le spin i est up} \end{cases}$

A chaque configuration, nous avons ainsi associé un sommet de l'hypercube de $\mathbb{R}^N$. L'algorithme consiste donc à se déplacer de sommets en sommets le long des arêtes, en diminuant l'énergie à chaque changement de sommet. Cet algorithme sera donc convergent vers un point fixe pour l'algorithme correspondant à (I), ou vers une classe de configurations de même énergie pour les algorithmes correspondant à (II) ou les algorithmes où le conflit n'est pas résolu de manière déterministe ; dans ce cas on itèrera de manière erratique dans la classe de ces états de même énergie (états de même niveaux). Les spins dont le retournement n'affecte pas l'énergie sont dits "spins fous".

Cependant, l'algorithme ne convergera pas, en général vers un minimum global de l'énergie, mais vers un minimum local, au sens des voisins de l'hypercube de $\mathbb{R}^n$. L'automate est piégé dans des poches d'énergie, pour sortir desquelles il devrait augmenter son énergie.



Exemple de configuration d'énergie localement minimum sur un modèle du type : (2, carré, tore, $J_{ij} = -1$).

★ ★ ∘ ∘	★ ∘ ★ ∘
∘ ∘ ★ ★	∘ ★ ∘ ★
★ ★ ∘ ∘	★ ∘ ★ ∘
∘ ∘ ★ ★	∘ ★ ∘ ★
minimum local E = -16	minimum global E = -32

où ★ signifie "spin up" et ∘ "spin down".

Remarque :

On peut choisir aussi, pour éviter les situations conflictuelles, imaginer des modèles où chaque spin a un nombre impair de voisins : maillage en tomettes à 3 voisins. On aura alors toujours convergence vers un point fixe (et non vers une classe). Les expériences numériques montrent alors une convergence plus rapide et "meilleure", c'est-à-dire que le minimum local obtenu est plus proche, en valeur relative, au minimum global (quand on peut déterminer ce dernier !).

VI - RESULTATS ET INTERPRETATION

1°. Résultat et interprétation à basse température

On a donc vu que la limite pour les températures inférieures à 0,1 de l'algorithme de Monte-Carlo donnait l'algorithme de majorité que l'on pouvait assortir de différentes variantes. On a toujours convergence, vers une configuration, ou vers une classe de configurations. Cependant, ces configurations ne sont pas en général des fondamentaux, c'est-à-dire des états stables, mais des états métastables.

L'utilisation de la méthode de Monte-Carlo pour la recherche des fondamentaux est donc un échec.

Cependant, l'impossibilité que l'on a, numériquement d'appliquer le véritable de Monte-Carlo, qui est lui capable, au bout de temps très long, de sortir d'un état métastable (minimum local), pour tomber dans un état de moindre énergie (minimum local "meilleur"), traduit une tendance qui a la nature, de geler les verres de spins dans un état excité, et pour un temps très long.

2°. Résultat et interprétations aux moyennes températures

Moyennes températures, c'est-à-dire $1 \times J < T < 3 \times J$ (en particulier pour le modèle d'ising $\frac{T_c}{J} = 2,269$).

Les expérimentations effectuées à l'aide de cet algorithme ont surtout été qualitatives, et relatives à l'apparition du gel : évolution de la forme des amas de spins gelés (spins jamais retournés pendant un temps de simulation donné), évolution de la proportion de spins gelés.

Il n'apparaît nettement pas de température de blocage, à partir de laquelle, les amas de spins gelés (Cluster) "explosent".

Cependant, on peut constater que sur le modèle d'Ising, les amas de spins gelés se déplacent sur le tore en se déformant, alors que sur les modèles "J uniforme", les amas restent accrochés à des noeuds i tels que ($\sum_{j \text{ voisin de } i} J_{ij}$ grand) la somme des 4 liaisons adjacentes à ce noeud soit grande en valeur absolue (c'est le "pinning").

Dès que l'on désire faire une étude plus quantitative, on est confronté pour des températures moyennes au problème du coût de l'algorithme qui devient prohibitif comme il est expliqué au chapitre suivant.

3°. A haute température

Pour les hautes températures, on a préféré, par soucis d'homogénéité, utiliser la même méthode, qu'aux moyennes et basses températures, qui est exposée plus loin. Notons toutefois que dans ce cas, Monte-Carlo n'est pas moins efficace.

CONCLUSION

L'utilisation que l'on peut faire de la méthode de Monte-Carlo pour étudier, par simulation, un verre de spins se présente ainsi :

- à haute température, la méthode est satisfaisante, mais les problèmes physiques peu intéressants ;
- moyenne température, la méthode ne permet pas une étude quantitatives assez profondes, car son coût est trop important ;
- à très basse température, l'échec de la méthode traduit un phénomène physique : le gel du verre dans des états non exactement fondamentaux, mais légèrement excités.

CHAPITRE III

LA METHODE B.K.L.

La faiblesse de la méthode de Monte-Carlo à basse température résidant, en fait, dans toutes les tentatives échouées de retournement, on peut employer une méthode, jamais employée jusqu'ici dans ce type de problèmes, qui itèrera non pas sur les tentatives, mais sur les tentatives réussies.

I - LA RELAXATION D'UN VERRE DE SPINS : UN PROBLEME DE FILE D'ATTENTE

On peut se représenter la relaxation d'un verre de spins de la manière suivante :

Les spins sont des "clients", qui attendent d'être "servis" ; le service consistant en un retournement. Une telle interprétation conduit à prendre pour modèle un processus aléatoire à temps continu : c'est la méthode B.K.L. (Bortz, Kalos et Leibowitz) [I], en opposition au modèle du processus aléatoire à temps discret qui est la méthode M.C. (Monte-Carlo) [II].

Le processus engendre une famille $\{X_t\}_{t\in\mathbb{R}^+}$ où $X_t \in \{0,1\}^N$, N nombre de spin. X_t représente la configuration de spin à l'instant réel t ; on a numéroté les spins ; la $i^{ème}$ composante de X_t représente le spin i (0 = down, 1 = up).

On aura :

$$(I)\quad P\left(X_t = j \mid X_{tn} = i_n,\ X_{t_{n-1}} = i_{n-1},\ldots,\ X_{t_1} = i_1\right) = P\left(X_t = j \,\middle|\, X_{t_n} = i_n\right.$$

pour toute séquence $t_1 < t_2 < \ldots < t_n < t$
où $j \in \{0,1\}^N \qquad i_k \in \{0,1\}^N \qquad k \in [0,1]$
et aussi :

$$(II)\quad P(X_{s+t} = j \mid X_s = i) = P(X_t = j \mid X_0 = i) \quad \forall (s,t) \in \mathbb{R}^+$$

Le processus est un processus continu markovien homogène

Une file d'attente se caractérise par une séquence de six symboles (conférence internationale sur la standardisation des notations dans la théorie des files d'attente 1971) qui désignent respectivement :

- le processus d'arrivée ;
- le processus de service ;
- le nombre de serveurs ;
- la borne supérieure du nombre de clients dans le système ;
- l'intéraction entre nombre de clients dans le système et processus d'arrivée ;
- la discipline.

- Processus d'arrivée

Notons θ_i le temps pendant lequel le système va rester dans l'état i. $\theta_i \in \mathbb{R}$. On a :

$$(III)\quad P(\theta_i > t+x \mid \theta_i > t) = P\left(X_\tau = i\ ;\ t \le \tau \le t+x \,\middle|\, X_s = i,\ 0 \le s \le t\right)$$

or d'après (I), il vient :

$$P(X_\tau = i\ ;\ t\leq\tau\leq t+x \,|\, X_s = i\ \ 0\leq s\leq t) = P(X_\tau = i\ ;\ t\leq\tau\leq x+t\ \,|\, X_t = i)$$

puis, d'après (II), il vient :

$$P(X_\tau = i\ ;\ t\leq\tau\leq t+x \,|\, X_t = i) = P(X_\tau = i\ ;\ 0\leq\tau\leq x \,|\, X_0 = i).$$

Donc, en reportant dans (III), il vient :

(IV) $P(\theta_i > t+x \,|\, \theta_i > t) = P(\theta_i > x)$.

On reconnaît ici une loi exponentielle (la démonstration détaillée du théorème qui affirme que (IV) est une caractérisation des lois exponentielles est dans [III]).

On en déduit $P(\theta_i \leq t) = 1 - e^{-\lambda t}$

d'où $P(\theta_i > t) = e^{-\lambda t}$ (V)

Or $P(\theta_i > t)$ = P (aucun spin ne soit retourné avant t)

$$= \prod_{\text{spin } j} P \text{ (le spin j ne soit pas retourné avant t)}$$

$$= \prod_{\text{spin } j} e^{-P_j t}$$

où $P_j = \inf\left(e^{\frac{-(\Delta E)_j}{T}}, 1\right)$ en accord avec la distribution de Boltzmann.

$$P(\theta_i > t) = e^{-\left(\sum_{\text{spin } j} P_j\right) t}$$

Posons $j = \prod_{\text{spin } j} P_j$ S_i est la <u>vitesse</u> d'évolution du système dans l'état

Il vient : $P(\theta_i > t) = e^{-S_i t}$

Donc le paramètre de la loi exponentielle est S_i vitesse d'évolution du système dans l'état i.
Il est clair que ce paramètre change de valeur à chaque évènement !

La loi d'arrivée est une loi exponentielle de paramètre S_i : $M(S_i)$

- Le processus de service est trivial : on admet que le retournement est instantané :

  C'est donc une loi déterministe de durée nulle : D(O).

- Le nombre de serveurs est 1

  On n'aura donc jamais le retournement simultané de 2 spins. Cependant la durée entre 2 retournements consécutifs pourra être aussi courte que l'on voudra.

- Le nombre de clients dans le système est fixe et vaut N.

- Il n'y a pas d'intéraction entre le nombre arrivée des clients et le processus d'arrivée.

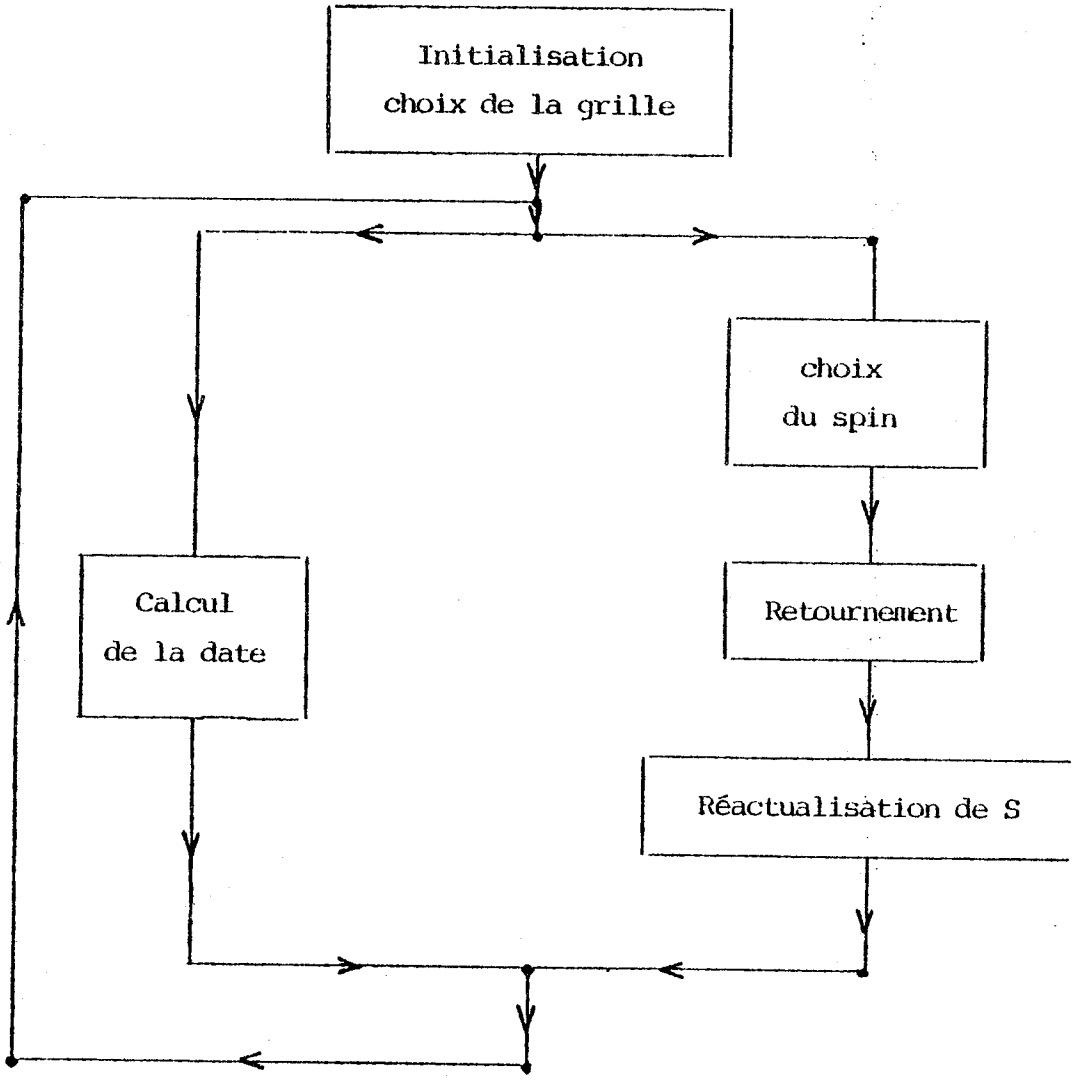
- Comme le traitement est instané, il n'y a pas de problème de discipline :

  En résumé, la file d'attente est :

  $(M(S_i), D(O), 1, N, \infty,$ indifférent).

II - L'ALGORITHME B.K.L.

Simultanément, (en pratique, ce sera consécutivement) on calcule la date du prochain évènement, et le spin qui "fera l'évènement", c'est-à-dire qui sera retourné. La durée de l'évènement est tirée suivant la loi exponentielle de paramètre S_i, on en déduit aisément la date ; le spin à retourner est choisi conformément à sa propre probabilité de retournement par rapport à celle des autres.



Examinons chacun de ces points un à un.

Initialisation, choix de la grille

Sur le principe, cette méthode peut s'appliquer à des modèles du type :

(quelconque, régulier, quelconque, quelconque).

En pratique, on a choisi le modèle d'Ising, le modèle $\pm J$ et le modèle J uniforme, c'est-à-dire :

$$\text{(2, maillage carré, torique, } \left\{ \begin{array}{c} 1 \\ \pm 1 \\ [1+1] \end{array} \right. \text{)}$$

Calcul de la date

On utilise une procédure standard du CII-HB qui génère un nombre suivant une loi exponentielle de paramètre 1, soit T. $t = T/S$ suit une loi exponentielle de paramètres. En effet :

$$P(T \leq x) = 1 - e^{-x} \Rightarrow P(T/S \leq x) = P(T \leq xS) = 1 - e^{-Sx} \text{ cqfd}$$

Il y a de plus nécessité d'accorder les échelles de temps entre B.K.L. et M.C. :

Comparaison entre temps B.K.L. et temps M.C.

soit une relaxation de M.C. :

on appelle pas M.C. l'action : | choix d'un spin
| retournement éventuel

On appelle step M.C. N pas où N = nombre de spins.

Plaçons-nous dans un état fixé, c'est-à-dire les liaisons, le maillage, les spins. Envisageons en moyenne dans combien de temps τ aura lieu le prochain évènement effectif (c'est-à-dire retournement effectif d'un spin) d'une part en unité M.C. (nombre de pas), d'autre part en unité B.K.L. Il n'y aura qu'à égaler ces 2 quantités pour avoir la correspondance entre 1 unité M.C. et 1 unité B.K.L.

1°. en B.K.L.

Soit S la vitesse d'évolution du système $\tau = \int_0^\infty uS\, e^{-Su}\, du = -\int_0^\infty ude^{-Su}$
d'où $\tau = \frac{1}{S}$ unités B.K.L. (VI)

2°. en M.C.

Soit P_i la probabilité que l'évènement arrive au pas i.

$$P_1 = \sum_{\substack{\text{tous les} \\ \text{spins i}}} P \text{ (tirer le spin i) x P (flipper ce spin)}$$

or P (tirer le spin i) $= \frac{1}{n^2}$ $\quad n^2 = N$ = nombre de spins

P (flipper ce spin) $= p_i$

il est clair que $p_i = (1 - \frac{S}{n^2})^{i-1} \times \frac{S}{n^2}$ (indépendance,

donc :

$$\mathbb{E} = \tau = \sum_{i=1}^{\infty} i\, (1 - \frac{S}{n^2})^{i-1} \times \frac{S}{n^2} = \frac{S}{n^2} \sum_{i=1}^{\infty} i(1 - \frac{S}{n^2})^{i-1}$$

On reconnaît une série dérivée :

$$\sigma = \sum_{1}^{\infty} i\, k^{i-1} = \frac{d}{dk} (\sum_{1}^{\infty} k^i) = \frac{d}{dk} (\frac{1}{1-k}) = \frac{1}{(1-k)^2}$$

donc $\tau = \frac{S}{n^2} \times \frac{1}{(1-1+\frac{S}{n^2})^2} = \frac{n^2}{S}$ unité M.C.

$$\tau = \frac{n^2}{S} \text{ unité M.C.} \qquad \text{(VII)}$$

3°. Rapprochons (VI) et (VII) il vient :

$$\frac{1}{S} \text{ u. B.K.L.} = \frac{N}{s} \text{ pas M.C.}$$

d'où 1 u. B.K.L. = N pas M.C. = 1 step M.C.

finalement | 1 u. B.K.L. = 1 step M.C. = 1 pas M.C./spin |

Remarque :

En pas M.C. $\tau = \frac{N}{S} \simeq$ constante en N puisque S croît en N ! Donc le temps moyen de retournement exprimé en pas M.C. est indépendant de la taille. La vérification numérique est très satisfaisante.

En conclusion pour calculer la durée de l'évènement, on tire $D \rightarrow \exp(1)$; la durée jusqu'au prochain évènement sera $D * N/S$.

* tirage du spin

Chaque spin i se voit attribuer un intervalle de [0,1] d'amplitude proportionnelle à sa probabilité d'être retourné par rapport à la somme des probabilité de tous les spins. Un nombre est tiré au hasard uniforme entre 0 et 1 (on utilise encore une procédure standard C11-HB), il tombe dans un des segments de la partition : le spin correspondant sera retourné !

* le retournement

C'est l'opération la plus triviale : il suffit d'inverser sa valeur.

* réactualiser $S = \Sigma p_i$

Seule la contribution du spin i et de ses 4 voisins aura changé, il n'y a donc pas lieu de recalculer toute la somme. De plus, chaque exponentielle n'est pas calculée par la procédure standard qui serait trop coûteuse et d'une précision superflue :

Une fois pour toutes les valeurs suivantes :

$e^{-10}, e^{-20}, e^{-30}, \ldots, e^{-90}$; $e^{-1}, e^{-2}, \ldots, e^{-9}$; $e^{-0,1}, \ldots, e^{-0,4}$; $e^{-0,01}, \ldots, e^{-1}$ sont calculées. Puis le nombre (bien sûr négatif) dont on veut calculer l'exponentielle est décomposé de la manière suivante :

$X = -ab, cd \ldots = (-10\ a) + (-b) + (0,1\ c) + (-0,01\ d)$ d'où :

$$e^{X} = e^{-10a} * e^{-b} * e^{-0,1c} * e^{-0,01d} ;$$

bien sûr si X est de valeur absolue trop grande e^{X} sera dit nul.

Le calcul de l'exponentielle coûtera donc 4 adressages à un tableau et trois multiplications. L'erreur commise sera alors, (sachant qu'au pire X - ab, cd = 0,009) inférieure à :

$$|e^{-ab,cd9} - e^{-ab,cd}| = |e^{-ab,cd} \times e^{-0,009} - e^{-ab,cd}|$$

d'où $e_{abs} = e^{-ab,cd}\ (1 - e^{-0,009})$

donc $e_{rela} = 1 - e^{-0,009} = 0,9\ \%$

III - COMPARAISON ENTRE LA METHODE B.K.L. ET LA METHODE M.C.

La correction d'échelle de temps entre B.K.L. et M.C. ayant été faite (voir plus haut), on va pouvoir comparer ces deux méthodes : la méthode B.K.L. qui est une simulation évènement par évènement et la méthode M.C. qui est une simulation période par période.

L'enchaînement des configurations sera le même dans les deux méthodes ; c'est-à-dire que l'on ne pourra pas plus avec B.K.L. espérer un fondamental qu'avec M.C. En effet, la limite à température nulle de ces deux algorithmes donne le même algorithme de majorité, qui ne donnera qu'un minimum local de l'énergie : un état métastable.

Cependant le coût c de ces 2 algorithmes c'est-à-dire le rapport du temps simulé T au temps de simulation t sera très différent $c = t/T$.

1° en M.C.

Une tentative pour retourner un spin coûtera le même temps d'ordinateur t, que la tentative soit réussie ou ratée : en effet, le temps d'inversement du signe d'un entier est parfaitement négligeable devant tout le travail préalable : choix du spin, évaluation de l'influence de son retournement sur l'énergie. Donc, dans le rapport $c = t/T$, c est indépendant de la température (en particulier, sur un IBM 360, l'algorithme écrit donnait $t = 1300 \times N \times T$ µS).

2°. en B.K.L.

On a vu que le temps moyen de retournement (simulé bien sûr !) par la méthode B.K.L. valait $\tau = \frac{1}{S}$.

S variant en fonction de la température (rappelons que $S = \sum_{i=1}^{N} \min(e^{\frac{-(\Delta F)i}{\theta}}, 1)$ où θ est la température) alors que bien sûr le temps d'ordinateur de retournement d'un spin (temps de simulation) est indépendant de la température, il est clair que le coût c va dépendre aussi de la température plus précisément :

- à très haute température :

$$S = \sum_{i=1}^{N} (P_i) \qquad \text{où} \quad \forall i \quad P_i \simeq 1 \text{ donc } S = N$$

d'où $\tau = \frac{1}{N}$ unités B.K.L.

c'est-à-dire que pendant le même temps de simulation M.C. fera autant de pas que B.K.L. d'évènements : les algorithmes sont équivalents, ce que l'expérience confirme.

Remarquons que ce résultat n'est pas du tout étonnant car avec M.C., à très haute température, chaque interrogation correspond à un retournement.

- à basse température

Plus la température diminue, plus pour une même configuration S augmente, donc T augmente et le rapport c diminue : la méthode sera de plus en plus avantageuse. Ainsi, pour une étude asymptotique à basse température, on pourra, pendant un faible temps d'ordinateur, simuler des temps gigantesques.

CONCLUSION

La méthode B.K.L. qui consiste finalement à aller directement aux tentatives de retournement réussie, en sautant les tentatives ratées, est d'autant plus efficace par rapport à M.C. que la température est faible. A très haute température, elles sont de même efficacité, à $\frac{T}{J} \in [1, 3]$ B.K.L. est de 6 à 10 fois plus efficace, et à $T/J \simeq 0,1$ de 100 à 1000 fois plus rapide.

Le code a été écrit de la manière la plus conversationnelle possible. L'utilisateur est constamment tenu au courant de l'évolution des différents paramètres (aimantation, énergie, et des nombreuses données statistiques), et peut en conséquence orienter différemment le cours du calcul. On a essayé de rendre l'utilisation de ce programme aussi proche que possible d'une véritable expérience.

CHAPITRE IV

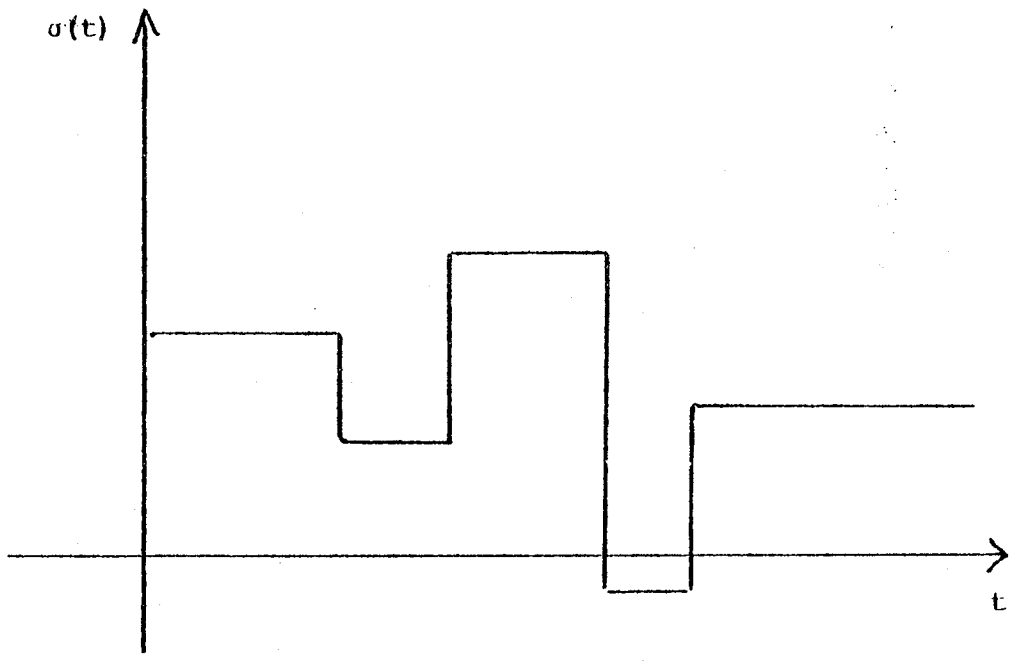
ETUDE DU BRUIT

En résultat de l'algorithme B.K.L., on obtient deux enregistrements : les fluctuations d'énergie en fonction du temps et les fluctuations d'aimantation en fonction du temps, qui sont deux fonctions en escalier. Ce chapitre présente l'outil qui va servir à l'analyse de ces résultats. On ne fera pas de différence entre l'énergie et l'aimantation : ce sera "l'observation".

I - LA FONCTION D'AUTOCORRELATION

1°. Présentation

Appelons σ l'observation, σ est une fonction en escalier du temps :



On ne connaît, bien sûr, σ que sur un intervalle fini [O, T]. Rappelons qu'à haute température, les marches sont toutes sensiblement de même longueur 1 ; et qu'à basse température, elles peuvent être très courtes ou très longues. Une présentation des différents motifs de ses fonctions est faite au chapitre V.

La fonction d'autocorrélation pour l'observation σ est définie par :

(I) $a(\tau) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sigma(t)\,\sigma(t+\tau)dt$ pour les fonctions suffisamment non croissantes

et par :

(II) $a(\tau) = \frac{1}{T} \int_0^T \sigma_T(t)\,\sigma_T(t+\tau)\,dt$ pour les fonctions de période T.

$a(\tau)$ est la valeur moyenne de $\sigma(t)\,\sigma(t+\tau)$ sur $\mathbb{R}^+$ ou sur une période.

Rappelons quelques propriétés de la fonction a :

On montre [(I)] page 54, 55 :

- $\underline{\forall\, \tau \in \mathbb{R} \quad a(\tau) \leq a(0)}$ (III)
- $a(0) = \overline{\sigma^2}$ valeur moyenne du carré de l'observation
- $\lim_{\tau\to\infty} a(\tau) = \overline{\sigma}^{\,2}$ valeur moyenne de l'observation au carré
- a est continue. En effet $\lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sigma^2(t)\,dt \leq M^2$ existe.
  On sait alors que a sera continue partout si elle continue à l'origine [I] page 56. Montrons donc que a est continue à l'origine :
  soit $e(\tau) = |a(\tau) - a(0)| = a(0) - a(\tau)$ cf. (III)
  $e(\tau) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sigma^2(t)\,dt - \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sigma(t)\,\sigma(t+\tau)\,dt$
  $e(\tau) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \int_0^T \sigma(t)\,(\sigma(t) - \sigma(t+\tau))\,dt$
  soit $a_0, \ldots, a_n, \ldots$ les points où σ présente une discontinuité (infinité supposée dénombrable).

$\sigma(t) \times \sigma(t+\tau)$, comme fonction de t, sera nulle en dehors des segments de la forme $[a_i - \tau, a_i]$.

$$e(\tau) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{a_n} \sum_{i=1}^{n} \int_{a_{i-1}}^{a_i} \sigma(t)\ (a(t) - \sigma(t+\tau))\ dt$$

soit M / $\forall t\ |\sigma(t)| \leq M$

$$e(\tau) \leq \lim_{n\to\infty} \frac{1}{a_n} \sum_{i=1}^{n} 2M^2 \int_{a_{i-2}}^{a_i} dt = \lim_{n\to\infty} \frac{2M^2 2n}{a_n} \qquad \text{(IV)}$$

soit $\delta_n = a_{n+1} - a_n$, c'est la persistance de l'évènement n. On sait (chapitre IV § II) que $P(\delta_n \leq X) = e^{-S_n X}$. S_n est à choisir dans un ensemble fini de paramètre :

$$P(\delta_n > X) = 1 - e^{-S_n X}$$

soit $\alpha_n = \min_{i=1,n} \{\delta_i\}$

$$P(\alpha_n > X) = P(\forall i \in [1,n]\ \delta_i > X)$$

$$P(\alpha_n > X) = \prod_{i=1}^{n} P(\delta_i > X)$$

$$P(\alpha_n > X) = \prod_{i=1}^{n} (1 - e^{-S_i X})$$

donc $P(\alpha_n > X) \geq (1 - e^{-SX})^n$ où $S = \min_{j=1,p} \{S_j\}$

finalement $P(\alpha_n \leq X) \leq 1 - (1 - e^{-SX})^n$

en particulier $P(\alpha_n \leq 0) = 1$

d'où $P(\alpha_n = 0) = 0$

soit $\alpha = \min_{\mathbb{N}} (\alpha_n)$ $\quad P(\alpha = 0) = 0$

(V) donne aussi $P(\alpha_n > X) \leq (1 - e^{-S'X})^n$ où $S' = \max_{j=1,p} \{S_j\}$

d'où $P(\alpha_n \leq X) \geq 1 - (1 - e^{-S'X})^n$

donc $\forall X \in \mathbb{R}^{+*} \quad P(\alpha \leq X) \geq 1$

c'est-à-dire $P(\alpha \leq X) = 1$

Nous savons donc presque sûrement que :

$\min_{i \in \mathbb{N}} \{\alpha_i\} = \alpha \neq 0$ on a alors :

$a_{n+1} - a_n \geq \alpha$

$a_n - a_{n-1} \geq \alpha$

. .

. .

. .

$a_1 - a \geq \alpha$

donc par addition de ces inégalités :

$a_{n+1} \geq (n+1)\alpha$ que l'on reporte dans (IV)

il vient $e(\tau) \leq \lim_{n\to\infty} \frac{2M^2 2n}{n\alpha} = \frac{2M^2}{\alpha}$ Z

d'où l'on déduit que a est continue à l'origine donc a est continue sur $\mathbb{R}$

2°. Calcul pratique de la fonction d'autocorrélation

a) les bornes de l'intégration

On ne connaît la fonction σ que sur l'intervalle fini [O,T], et pour calculer l'intégrale $\int_0^T \sigma(t)\ \sigma(t+\tau)\ dt$ il faut connaître σ jusqu'à $T + \tau$, on est donc amené à poser :

$$c_{\alpha,T}(\tau) = \frac{1}{(1-\alpha)T} \int^{(1-\alpha)T} \sigma(t)\ \sigma(t+2)\ dt \qquad \text{(VI)}$$

$\alpha \in [O,1]$

il faut alors répondre à la question : dans quelles conditions $c_{\alpha,T}$ est une "bonne approximation" de a ?

$c_{\alpha,T}$ ne pourra être calculé pour des valeurs de $\tau \geq \alpha T$ posons alors $\tau_m = \alpha T$. Deux politiques sont alors possibles :

Politique 1 :

Déterminer à priori τ_m, pousser le calcul de l'observation jusqu'à une valeur T la plus grande possible, en tout cas supérieure à 10 τ_m puis, pour toutes valeurs de τ on intègrera sur $[0, T - \tau_m]$, c'est-à-dire que l'on calculera :

$$c_T(\tau) = \frac{1}{T-\tau_m} \int_0^{T-\tau_m} \sigma(t)\ \sigma(t+\tau)\ dt$$

Ainsi, pour toutes valeurs de τ on moyennera sur le même intervalle $[0, T - \tau_m]$, mais pour $\tau < \tau_m$ on perdra la moyenne sur $[T-\tau_m, T-\tau]$ c'est-à-dire que l'on perdra un peu d'information.

Politique 2

Pour chaque valeur de on intègrera sur le segment le plus grand possible c'est-à-dire $[0, T-\tau]$:

$$c(\tau) = \frac{1}{T-\tau} \int_0^{T-\tau} \sigma(t)\ \sigma(t+\tau)\ dt$$

remarquons cependant que chaque valeur de τ sera calculée par une moyenne sur un intervalle différent.

En pratique, la proximité des résultats de la politique 1 et des résultats de la politique 2 sera le critère de validité ; c'est-à-dire la confirmation que l'on a choisie T assez grand et τ_m assez petit.

b) l'intégration

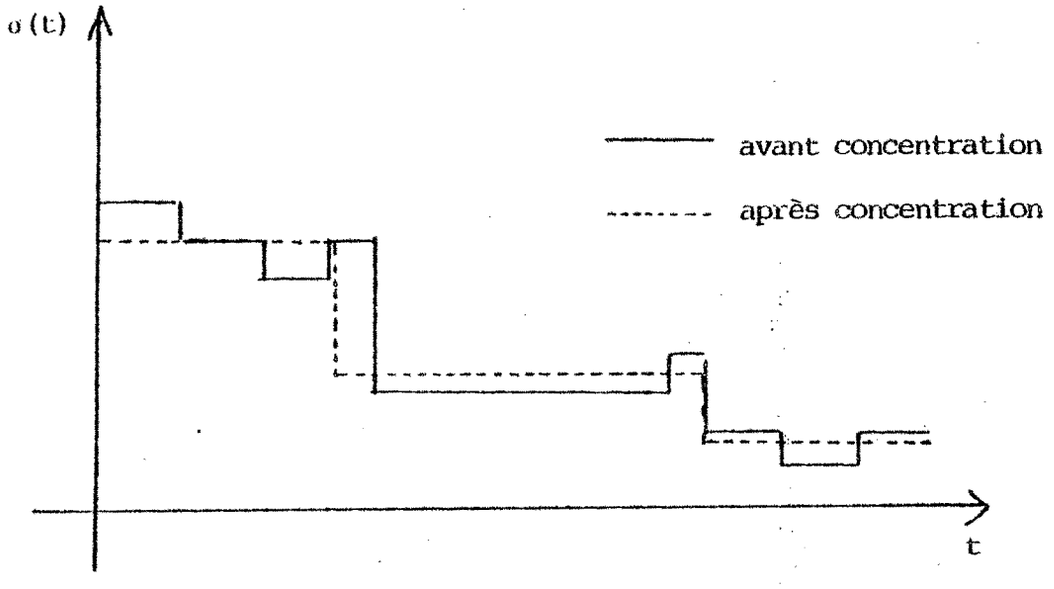
La fonction de t $\sigma(t)$ est une fonction en escalier. Soit m son nombre de marches. La fonction de t $\sigma(t+\tau)$ est aussi une fonction en escalier. Soit p son nombre de marches. La fonction de t $\sigma(t)\ \sigma(t+\tau)$ sera une fonction de t en escalier à au plus m+p marches. Son intégration se fera de manière exacte, comme somme d'aires de rectangles. Donc, pour chaque valeur de τ, on calcule la fonction de t $\sigma(\sigma)\ \sigma(t+\tau)$, puis on l'intègre facilement.

c) un calcul préliminaire : la concentration

Cependant, il peut se présenter que l'on ait jusqu'à N = 500 000 évènements, c'est-à-dire que pour chaque valeur de τ, la fonction de t $\sigma(t)\ \sigma(t+\tau)$ peut avoir jusqu'à 1 million de marches. Les calculs seraient alors trop onéreux et d'une précision superflue. C'est pourquoi on effectue une "concentration" des données par moyenne, c'est-à-dire que l'on remplace les p évènements suivants "entre la date t_a et la date t_{a+1}, l'observation vaut σ_a", ..., " entre la date t_{a+p-1} et la date t_{a+p}, l'observation vaut σ_{a+p-1}" par le seul évènement "entre la date t_a et la date t_{a+p}, l'observation vaut $\frac{1}{t_{a+p}-t_a} \sum_{i=0}^{p-1} (t_{a+i+1} - t_{a+i})\ \sigma_{a+i}$" ; et ceci de a = 0 à a = $E(\frac{N}{p})$.

Cette opération ne doit pas, évidemment, modifier la moyenne, ce que numériquement l'on vérifie très bien. Typiquement, pour une variable centrée, la moyenne de l'observation pour 40 000 évènements vaut $-\ 1.72577010^{-6}$ avant la concentration et $-\ 1.72576680^{-6}$ après une concentration par 25.

Remarquons que l'on moyenne sur des intervalles de longueur différente en unités de temps, mais égaux en unités d'évènements.



Les calculs sont alors p fois moindres, mais on ne pourra plus avoir une définition plus fine de la fonction a(τ) que $\Delta\tau_m = \max \{t_{a+p} - t_a\}$. Dans la pratique, on a souvent pris $p = n^2$, c'est-à-dire que l'on ramenait "aux évènements par spins".

II - CALCUL DE LA TRANSFORMEE DE FOURIER DE LA FONCTION D'AUTOCORRELATION

La dernière étape de l'analyse des résultats, en particulier du bruit dans l'observation, consiste en une analyse de Fourier de la fonction d'autocorrélation pour examen du spectre de puissance. Pour cela, l'algorithme F.F.T. (fast Fourier transform) écrit par M.A. EBERHARD ([II]) a été utilisé ; il s'agit de l'algorithme de Cooley et Turkey avec interpolation linéaire. L'autocorrélation étant une fonction réelle, on a utilisé la possibilité, qui était offerte, de calculer la transformée de 2 échantillonnages avec un seul appel à l'algorithme, comme il est précisé au chapitre V, 1 de ([II]).

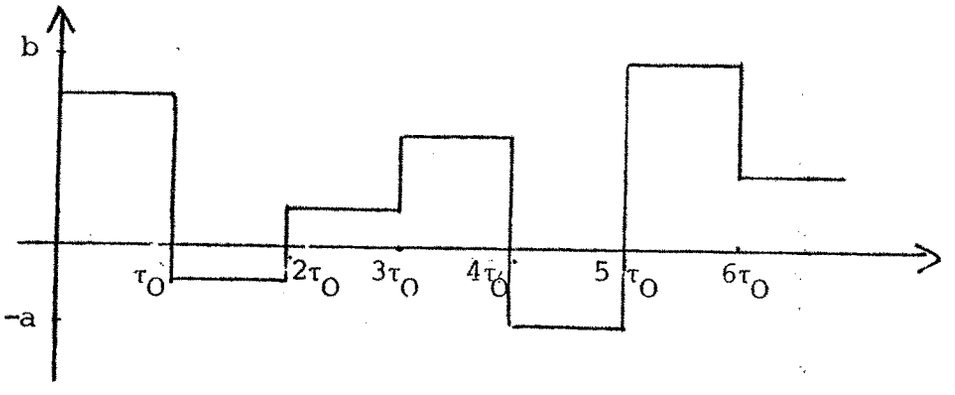
III - GENERATEURS DE BRUIT

Afin de tester ces programmes, on utilise un "générateur de bruit", capable, à l'aide d'un générateur de nombre aléatoire, de produire numériquement un bruit "presque blanc", un bruit "presque brownien", un bruit "presque en 1/f".

1°. Le modèle

Il s'agit du modèle choisi pour générer le bruit. On verra qu'un modèle simplifié pour l'étude de l'aimantation à haute température, rentrè dans ce cadre.

Le bruit est constitué d'une suite de notes. Chaque note persiste le même temps τ_0. Une note est en nombre entier dans un intervalle choisi [-a, b] :



$$\sigma : \mathbb{R} \to [-a, b]$$
$$t \to \sigma(t) = \sigma(E(t)\ t_0) = \sigma_{E(t)}$$

où E(t) tel que $E(t) \in \mathbb{N}$

$$E(t) \leq t < E(t) + 1$$

et où l'on désigne par σ_i les valeurs de σ à l'instant $i\ \tau_0$.

2°. Calcul de la fonction d'autocorrélation

Soit $a(\tau)$ la fonction réelle de la variable réelle, qui est la fonction d'autocorrélation de la fonction σ .

$$a(\tau) = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{+T} \sigma(t)\ \sigma(t+\tau)\ dt$$

$$a(\tau) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2n\tau_0} \int_{-n\tau_0}^{+n\tau_0} \sigma(t)\ \sigma(t+\tau)\ dt$$

$$a(\tau) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2n\tau_0} \sum_{i=-n}^{n-1} \int_{i\tau_0}^{(i+1)\tau_0} \sigma(t)\ \sigma(\sigma+\tau)\ dt$$

d'où $a(\tau) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2n\tau_0} \sum_{i=-n}^{n-1} a_i \int_{i\tau_0}^{(\tau+1)\tau_0} \sigma(t+\tau)\ (dt$

posons $\alpha_i(\tau) = \int_{i\tau_0}^{(i+1)\tau_0} \sigma(t+\tau)\ dt$ et $\tau = p\tau_0 + \theta \qquad \theta \in [0, \tau_0]$

$$\alpha_i(\tau) = \int_{i\tau_0}^{(i+1)\tau_0} \sigma(t+p\ \tau_0+\theta)\ dt = \int_{(i+p)\tau_0}^{(i+p+1)\tau_0} \sigma(t+\theta)\ dt$$

$$\alpha_i(\tau) = \int_{(i+p)\tau_0+\theta}^{(i+p+1)\tau_0+\theta} \sigma(t)dt = \int_{(i+p)\tau_0+\theta}^{(i+p+1)\tau_0} \sigma(t)dt + \int_{(i+p+1)\tau_0}^{(i+p+1)\tau_0+\theta} (t)d$$

d'où $\alpha_i(\tau) = a_{i+p}\ (\tau_0-\theta) + a_{i+p+1}(\theta)$

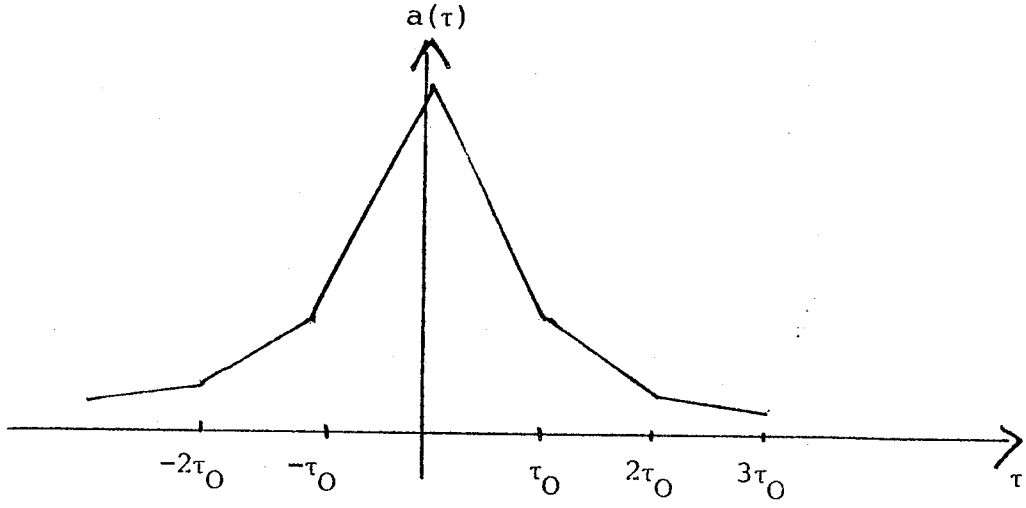
$$a(\tau) = \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2n\tau_0} \sum_{i=-n}^{+n} a_i\ (a_{i+p}(\tau_0-\theta) + a_{i+p+1}\ \theta)$$

$$a(\tau) = \left(\lim_{n\to\infty} \frac{1}{2n\tau_0} \sum_{i=-n}^{+n} a_i\ a_{i+p}) \ (\tau_0-\theta) + \lim_{n\to\infty} \frac{1}{2n\tau_0} \sum_{i=-n}^{+n} a_i a_{i+p+1} \right) \theta$$

$$a(\tau) = (\tau_0-\theta) < a_i\ a_{i+p} > + \theta < a_i,\ a_{i+p+1} >$$

$$\boxed{\begin{array}{l} \tau = p\ \tau_0 + \theta \qquad \theta \in [0,\tau_0] \\ a(\tau) = \theta(< a_i,\ a_{i+p+1} > - < a_i,\ a_{i+p} >) + \tau_0 < a_i,\ a_{i+p} > \end{array}} \quad (I)$$

La fonction d'autocorrélation est donc de la forme :



3°. Spectre de puissance

Soit b_p la fonction ainsi définie :

$$b_p(\tau) = \begin{cases} a(\tau) \\ 0 \quad \text{sinon} \end{cases} \qquad \rho\ \tau_1 \leq |\tau| < (p+1)_0$$

et soit $c_p(\tau) = b_p\ (\tau - p\tau_0)$

$$a(\tau) = \sum_{p=0}^{\infty} b_p(\tau)$$

$$\mathcal{F}(\omega) = \sum_{p=0}^{\infty} \mathcal{F}_{b_p}(\omega)$$

or $\mathcal{F}_{bp}(\omega) = \cos\ (\omega\pi\rho\tau_0)\ \mathcal{F}_{cp}(\omega)$

d'où $\mathcal{F}_a(\omega) = \sum_{p=0}^{\infty} (\omega\pi\rho\tau_0)\ \mathcal{F}_{cp}(\omega)$

$$\text{or} \quad c_p(\tau) = \frac{\langle \sigma_i \, \sigma_{i+p+1} \rangle - \langle \sigma_i \times \sigma_{i+p} \rangle}{\tau_0} \tau + \langle \sigma_i \times \sigma_{i+p} \rangle$$

$$\text{d'où} \quad \mathcal{F}_{c_p}(\omega) = \frac{\langle \sigma_i \times \sigma_{i+p+1} \rangle}{\tau} \tau_0 \frac{\sin \omega\tau_0}{\omega\tau_0}$$

$$+ \frac{\langle \sigma_i \times \sigma_{i+p} \rangle - \langle \sigma_i \times \sigma_{i+p+1} \rangle}{2\pi} \tau_0 \frac{\sin \omega \frac{\tau_0}{2}}{\frac{\omega\tau_0}{2}}$$

d'où finalement :

$$\mathcal{F}_a(\omega) = \frac{\tau_0}{\pi} \frac{\sin \omega\tau_0}{\omega\tau_0} \left[\sum_{p=0}^{\infty} \langle \sigma_i \times \sigma_{i+p+1} \rangle \cos \omega p \pi \tau_0 \right]$$

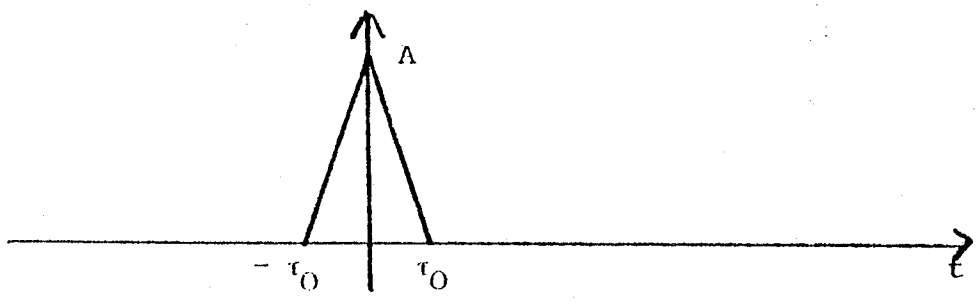
$$+ \frac{\tau_0}{2\pi} \left(\frac{\sin \frac{\omega\tau_0}{2}}{\frac{\omega\tau_0}{2}} \right)^2 \left[\sum_{p=0} (\langle \sigma_i \times \sigma_{i+p} \rangle - \langle \sigma_i \times \sigma_{i+p+1} \rangle) \cos \omega p \pi \tau_0 \right] \qquad \text{(II)}$$

4°. Générateur de bruit "presque blanc"

Le bruit blanc est défini par son spectre blanc. Soit $a_b(\tau)$ la fonction d'autocorrélation d'une observation de bruit blanc :

$$\mathcal{F}_{a_b}(\omega) = k = a_b(\tau) = \delta_0(\tau)$$

approchons cette fonction par la fonction suivante :



$$a(\tau) = \begin{cases} A(-\tau+\tau_0) & \text{si } 0 < \tau < \tau_0 \\ A(\tau+\tau_0) & \text{si } -\tau_0 < \tau < 0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \qquad \text{(III)}$$

La transformée de Fourier deviendra (grâce à (II)) :

$$\mathcal{F}_d(\omega) = \frac{\tau_0}{2\pi} A \left(\frac{\sin \frac{\omega\tau_0}{2}}{\frac{\omega\tau_0}{2}} \right)^2$$

qui, pour des petites valeurs de $\frac{\omega\tau_0}{2}$, donne bien un spectre plat. (absence de terme en ω dans le D.L.).

Le procédé qui engenvra un processus ayant pour fonction d'autocorrélation (III) est le suivant : chaque a_i est tiré au hasard uniforme dans $[-a, +a]$.

On a alors $A = \frac{1}{2a+1} \; 2 \sum_{i=1}^{a} i^2 = \frac{1}{2a+1} \; 2 \; a \; \frac{(a+1)\;(2a+1)}{6}$

d'où $A = \frac{a(a+1)}{6}$

(Remarquons que ces résultats correspondent bien à l'intuition : pour des valeurs de $\tau < \tau_0$, donc des fréquences $f > \frac{1}{\tau_0}$, le bruit ne sera certainement pas du bruit blanc, puisque la corrélation est totale).

En effet, soit P la matrice de transition du processus :

Il est clair que $P = \frac{1}{2a+1} \; E$

où $E = \begin{pmatrix} 1 \ldots . 1 \\ \vdots \quad \vdots \\ \vdots \quad \vdots \\ 1 \ldots . 1 \end{pmatrix}$ puisqu'il y a 2a+1 états possibles correspondant à $a_i = -a$, $a_i = -a+1$, ... $a_i = a$.

* l'état stationnaire Π vérifie $\Pi P = \Pi$
il est clair que $\Pi = \frac{1}{2a+1} (1, \ldots, 1)$

$$\star\ P^{(P)} = \left(\frac{1}{2a+1}\,E\right)^P = \frac{1}{(2a+1)^P}\,E^P = \frac{1}{(2a+1)^P}\,(2a+1)^{P-1}\,E = \frac{1}{2a+1}\,E$$

d'où $P^{(P)} = P$

$$\star \text{ soit } \phi_{kP}^{(P)} = \Pi_k\, P_{k\ell}^{(P)}$$

$$\phi_{k\ell}^{(P)} = \frac{1}{(2a+1)^2}$$

pour $p \neq 0$ $\qquad \langle a_i, a_{i+p} \rangle = \sum_{k=-a}^{+a} \sum_{k=-a}^{a} k\ell\ \phi_{k\ell}^{p}$

d'où $\qquad \langle a_i, a_{i+p} \rangle = \frac{1}{(2a+1)^2} \sum_{k=-a}^{a} \sum_{\ell=-a}^{+a} k\ell$

$$\langle a_i, a_{i+p} \rangle = \frac{1}{(2a+1)^2} \sum_{k=-a}^{+a} k^2 = 0 \qquad \underline{\langle a_i, a_{i+p} \rangle = 0}$$

pour $p = 0$ $\qquad \langle a_i\ a_i \rangle = \sum_{k=-a}^{+a} \sum_{=-a}^{+a} k\ell\ \Pi_k\, J_k$

$$\text{donc} \quad \langle a_i^2 \rangle = \frac{1}{2a+1} \sum_{k=-a}^{+a} k^2 = \frac{2}{2a+1}\,\frac{a(a+1)\,(2a+1)}{6}$$

$$\text{d'où} \quad \langle a_i^2 \rangle = \frac{a(a+1)}{3}$$

5°. Générateur de bruit "presque brownien"

Nous voulons trouver un processus engendrant un spectre de puissance "de la forme" :

$$\mathcal{F}(\omega) = \frac{E^2}{\Pi}\ \frac{2k}{(2k)^2 + \omega^2}$$

donc nous voulons un processus générant une fonction d'autocorrélation de la forme :

$$a(\tau) = E_m^2 \; e^{-\tau k|\tau|}$$

voir [I] (page 38).

Le processus suivant :

- σ_0 tiré au hasard uniforme sur [-a, +a]

$$- \sigma_{i+1} = \begin{cases} -a + 1 & \text{si } \sigma_i = -a \\ a - 1 & \text{si } \sigma_i = a \\ \sigma_i + \varepsilon_i & \text{sinon} \end{cases}$$

où ε_i vaut -1 avec probabilité 1/2 et +1 avec probabilité 1/2.

c'est-à-dire l'on engendre une promenade aléatoire avec paroi réfléchissante sur [-a, +a], qui génère, avec certaines restrictions, une fonction d'autocorrélation du type cherché.

La probabilité d'atteindre une barrière en partant de l'état z vaut $z(2a+1-z)$ $\quad z \in [0, 2a+1]$ [III] page 318.
donc, soit P_0 le nombre moyen de pas avant d'atteindre une barrière :

$$P_0 = \sum_{z=0}^{2a+1} \Pi_z \; z^2 \; (2a+1-z)$$

on vérifie facilement que $\Pi = \frac{1}{4a+2} \; (1, 2, \ldots, 2, 1)$

Les états 0 et 2a+1 donnent 0 pour $z^2 \; (2a+1-z)$

On peut écrire :

$$P_O = \frac{1}{2a+1} \sum_{z=O}^{2a+1} z^2(2a+1-z)$$

$$P_O = \sum_{z=O}^{2a+1} z^2 - \frac{1}{2a+1} \sum_{z=O}^{2a+1} z^3 = \frac{A(A+1)\ (2A+1)}{6} - \frac{1}{A} \left(\frac{A(A+1)}{2}\right)^2$$

avec $A = 2a+1$

$$P_O = \frac{A(A+1)\ (2A+1)}{6} - \frac{A(A+1)^2}{4} = \frac{A(A+1)\ (A-1)}{12}$$

d'où $P_O = \frac{(2a+1)\ (a+1)a}{3}$

ainsi, dans la limite $p < p_O$, on aura exactement du bruit brownien.

Le calcul exact des $\langle a_i\ a_{i+p} \rangle$, à reporter dans les formules (I) et (II) ne peut se conduire, de manière simple jusqu'au bout. Citons seulement que : soit $p_{nm}^{(\Omega)}$ la probabilité de passer de l'état n à l'état m en n coups :

$$p_{nm}^{(\Omega)} = \frac{1}{N} \sum_{k=O}^{2N-1} \cos^2 \frac{k\Pi}{N} \cos n \frac{k\Pi}{N} \cos \frac{mk\Pi}{N}$$

où $n,m = O, \ldots, N$ il y a N+1 états [IV]

donc nous aurons :

$$\langle a_i,\ a_{i+p} \rangle = \sum_{i=O}^{A} \sum_{j=O}^{A} \frac{1}{A(A+1)} (i-a)(j-a)\ \Pi_j \sum_{k=O}^{2A-1} \cos \frac{Pk\Pi}{N} \cos \frac{ik\Pi}{A} \cos \frac{jk\Pi}{A}$$

avec $\Pi_j = \frac{1}{2a+1}$ si $j \in [1,A]$ et $M_O = M_A = \frac{1}{4a+2}$

6°. Bruit "presque en 1/f"

En accord avec [V], nous admettons que le processus suivant génère du bruit "presque en 1/f" :

$$\begin{aligned} x_{4i} &= a_i + b_i + c_i - 10 \\ x_{4i+1} &= a_i + b_i + c'_i - 10 \\ x_{4i+2} &= a_i + b'_i + c''_i - 10 \\ x_{4i+3} &= a_i + b'_i + c'_i{}'' - 10 \end{aligned}$$

où a_i, b_i, c_i, c'_i, c''_i, $c'_i{}''$ sont tirés au hasard uniforme entre 0 et 6. Le facteur de translation -10 sert uniquement à centrer l'observation, de manière à ce que $\lim_{\tau\to\infty} a(\tau) = \langle a_i \rangle^2 = 0$. Le fait de ne pas centrer introduit un terme constant dans l'autocorrélation, qui induit un pic de Dirac à l'origine sur la transformée de Fourier.

7°. Cas du verre de spin à haute température

A haute température, tous les états ont pratiquement la même énergie, donc la même vitesse d'évolution donc chaque évènement voit sa persistance suivre la loi exponentielle de paramètre S (égal pour chaque configuration). Donc en moyenne et avec une dispersion $\frac{1}{S}$, chaque état durera 1/S unité de temps.

Admettons que chaque évènement dure, de manière déterministe 1/S unité de temps. On est alors dans le cas du modèle proposé, avec $\tau_0 = 1/S$.

Supposons pour simplifier les notations que nous ayons un nombre N pair de spins N = 2n. L'aimantation peut valoir -N, N+2,..., 0, 2,..., +N

Soit E_i l'état défini par une aimantation de 2i, i de $-\frac{N}{2}$ à $\frac{N}{2}$, donc i de -n à +n.

Plaçons dans un état E_i, soit alors n_+ le nombre de spin valant +1 et n_- le nombre de spin valant -1 on a :

$$\begin{cases} n_+ + n_- = N \\ n_+ - n_- = 2i \end{cases} \qquad \text{d'où} \qquad \begin{cases} n_+ = \frac{N+2i}{2} \\ n_- = \frac{N-2i}{2} \end{cases}$$

La probabilité de passer à l'état E_{i-1} est la probabilité de tirer un spin valant -1 d'où :

$$P(E_i \to E_{i-1}) = \frac{N-2i}{2N} = \frac{1}{2} - \frac{i}{N}$$

donc

$$\begin{cases} P(E_i \to E_{i-1}) = \frac{1}{2} - \frac{i}{N} \\ P(E_i \to E_{i+1}) = \frac{1}{2} + \frac{i}{N} \end{cases} \qquad i \text{ de } -n \text{ à } n$$

On reconnaît ici "le modèle d'Ehrenfest" ([IV])

c'est-à-dire une promenade aléatoire du type du §.5 où la particule est rappelée à l'origine avec une "force" proportionnelle à la distance dont elle est éloignée de O.
On peut alors calculer les $\langle \sigma_i \, \sigma_{i+p} \rangle$

1°. L'expression de $P_{k\ell}^{(p)}$, c'est-à-dire probabilité de passer en p coup de l'état k à l'état ℓ est donné par [VI] qui avec nos notations devient :

$$P_{k\ell}^{p} = \frac{(-1)^{n+\ell}}{2^N} \sum_{j=-n}^{+n} D_{n+k}^{(j)} \, D_{n+j}^{(-k)} \, \lambda_j^p$$

où $-n \le k \le n$ $\qquad$ $N = 2n$ = nombre de spins

$-n \le \ell \le n$

où D_k^j = coefficient de z^k dans le développement de $(1+z)^{R+j}\ (1-z)^{R+j}$

donc :

$$D_k^j = \sum_{\alpha=0}^{k} (-1)^\alpha\ C_{n+j}^{\alpha}\ C_{n-j}^{k-\alpha}$$

et où $\lambda_j = \frac{j}{N} \qquad -n \le j \le n$

d'où :

$$P_{k\ell}^{p} = \frac{(-1)^{n+\ell}}{2^N N^p} \sum_{j=-n}^{+n} \sum_{\alpha=0}^{n+\ell} \sum_{\beta=0}^{n+j} (-1)^{\alpha+\beta}\ C_{n+j}^{\alpha}\ C_{n-j}^{m+\ell-\alpha}\ C_{n-k}^{\beta}\ C_{n+k}^{n+j-\beta}\ j^{(p)}$$

$$-n \le k \le +n$$

$$-n \le \ell \le +n$$

remarquons que $P_{k\ell}^{p} \neq 0 \Rightarrow P_{k\ell}^{p+1} = P_{k+1\ell}^{p} = P_{k\ell+1}^{p} = 0$

2°. On peut aussi expliciter l'état stationnaire Π [III] page 359

$$\Pi_j = \frac{1}{2^N} C_N^{n+j} \qquad -n \le j \le n$$

3°. On en déduit $\langle \sigma_i\ \sigma_{i+p} \rangle = \sum_{k=-n}^{+n} \sum_{\ell=-n}^{+n} \frac{k\ell}{2^N}\ C_N^{n+k}\ P_{k\ell}^{(p)}$

$$\sigma_i\ \sigma_{i+p} = \frac{1}{2^N} \sum_{k=-n}^{n} \sum_{\ell=-n}^{+n} k\ell\ C_N^{n+k}\ P_{k\ell}^{(p)} \qquad \text{(III)}$$

On peut alors calculer numériquement (III), puis le reporter dans la formule (II) pour obtenir le spectre de puissance du bruit d'aimantation à haute température.

IV - RESULTATS NUMERIQUES DES GENERATEURS DE BRUIT

Les tableaux et les courbes suivants montrent les résultats obtenus numériquement.

On peut faire les remarques suivantes :

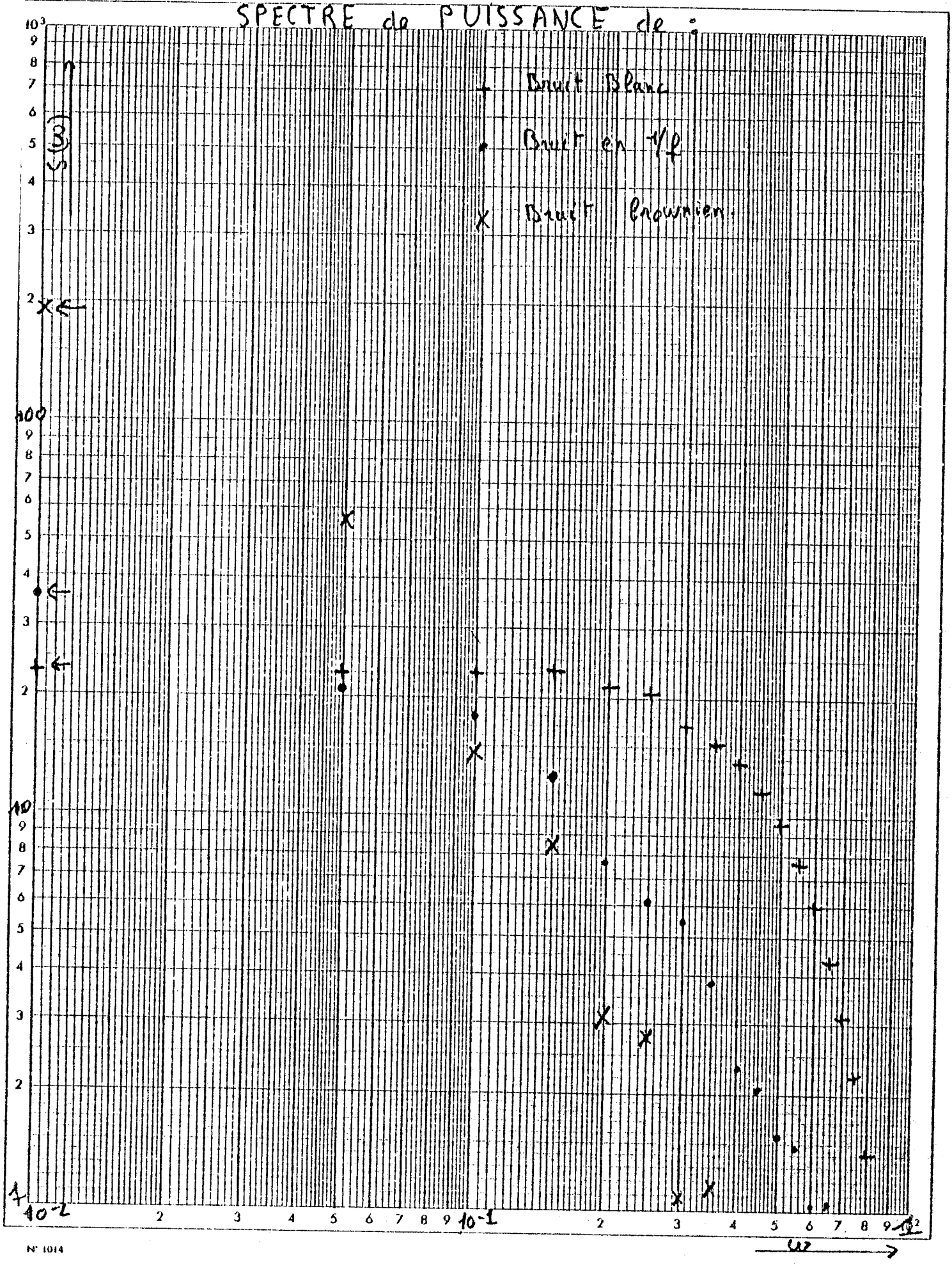
1°. On obtient bien les décroissances attendues, dans les zones attendues ;

2°. Le bruit blanc apparaît "moins correlé" que le bruit en 1/f, qui est lui-même "moins correlé" que le bruit brownien. Ce qui est aussi traduit par la double inégalité :

$$(\tau_c)_{blanc} = \frac{\mathcal{G}_{\ddot{a}}(0)}{a(0)} = \frac{22,44}{24,00} = 0,935 < (\tau_c)_{1/f} = \frac{35,83}{11,12} = 3,22$$

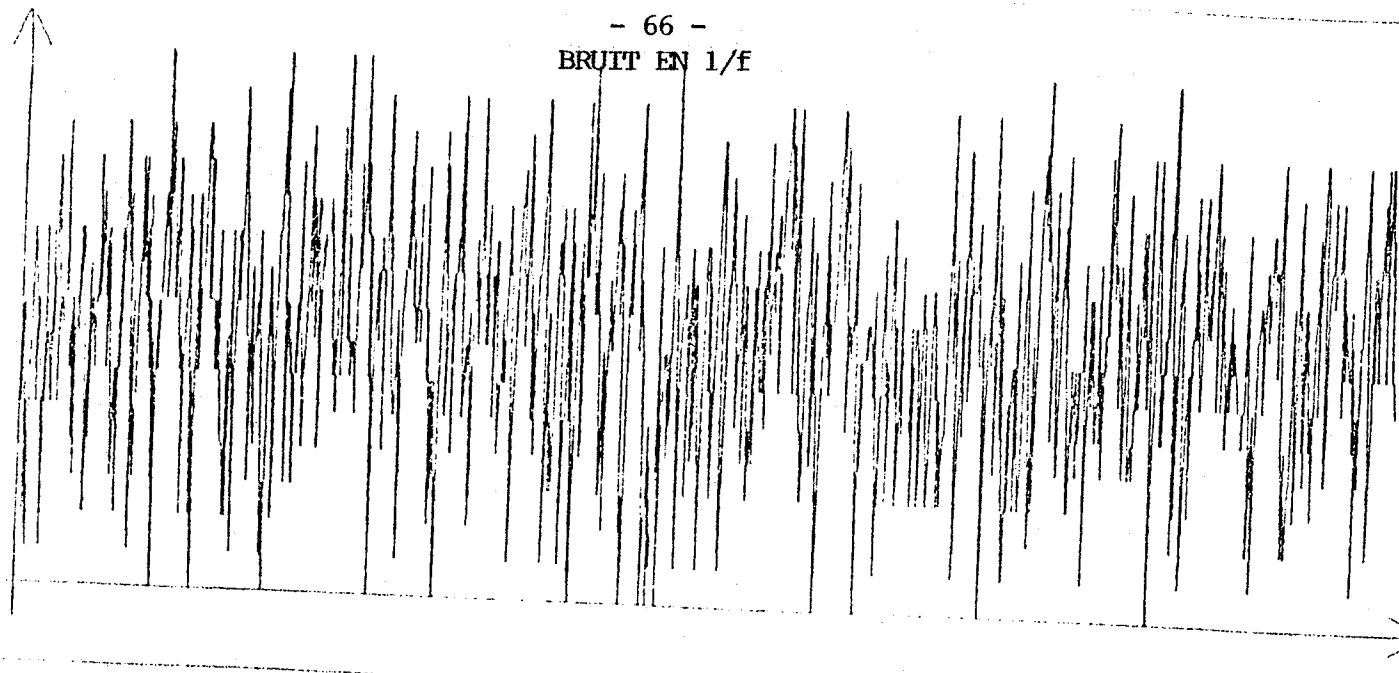
$$< (\tau_c)_{brow} = \frac{193,6}{18,8} = 10,0$$

3°. La fonction d'autocorrélation du bruit en 1/f ne tend pas exactement vers 0, mais oscille autour d'une valeur de l'ordre de 0,6. Ceci prouve du fait que le générateur produit des "notes" entre -7 et +8, dont la moyenne n'est donc pas nulle, or $\lim_{\tau \to \infty} a(\tau) = \langle \sigma_i \rangle^2$

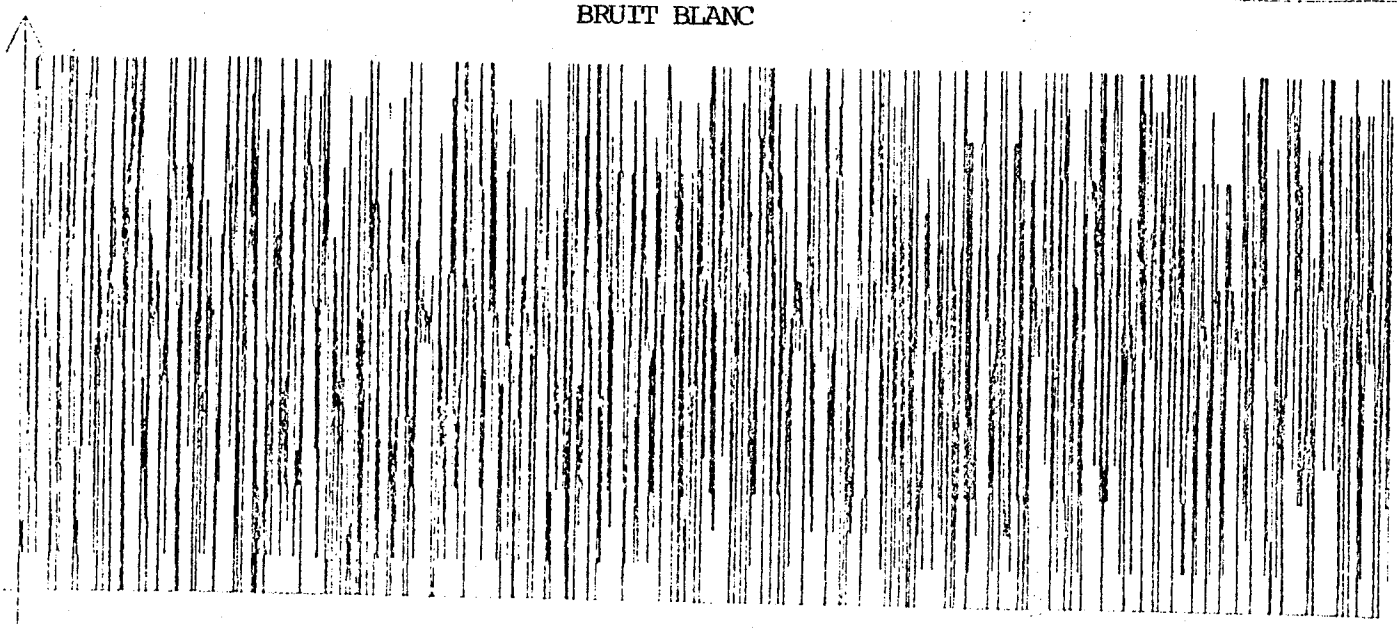

SPECTRE de PUISSANCE de :
+ Bruit Blanc
• Bruit en 1/f
× Bruit Brownien.
S(ω)
ω
10³
100
10
1
10⁻²
10⁻¹
10²

N° 1014

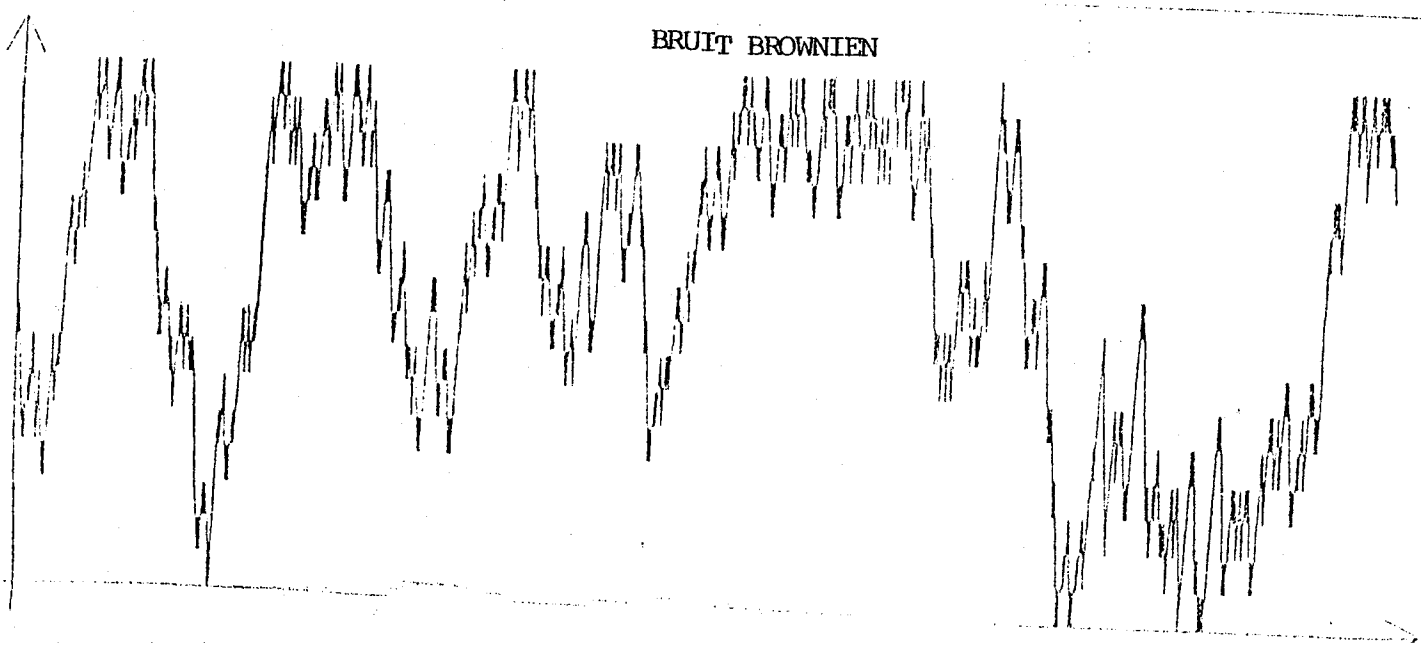
BRUIT EN 1/f



BRUIT BLANC



BRUIT BROWNIEN



CHAPITRE V

PRESENTATION DES RESULTATS

I - MODELE D'ISING

Tous les résultats de ce paragraphe sont relatifs à un modèle du type (2, maillage carré, tore, $J_{ij} = +J$).

Pour ce modèle (voir introduction) la température critique $T_c(\infty)$ est bien définie et calculée $T_c(\infty) = 2,269\ J$, pour une grille infinie.

Or, des hypothèses de scaling, (voir annexe), on peut déduire, entre autres résultats : pour l'aimantation : $\tau_c(L) = AL^z$ et $S(\omega) \propto \omega^{-\mu}$ et pour l'énergie : $\tau_c(L) = BL^z$ et $S(\omega) \propto \omega^{-\mu'}$.

Les résultats numériques présentés ici confirment ces hypothèses et proposent des valeurs pour A, B, z, μ et μ'.

a) l'aimantation

* calcul de A et z

L	T_c	Temps total d'enregistrement en MCS/spin	S en MCS	C(0) en MCS/spins	$C(0)/L^{3,75}$	τ_c en MCS/spin
2	2,68	19 739	6,58	12,056	0,896	31,02
4		22 984	4,597	94,51	0,522	56,56
5		23 387	4,677	269,46	0,6446	101,77
6	2,405	23 216	4,643	589,54	0,712	182,68
7	2,386	22 934	4,587	1090	0,74	224,17
8	2,371	13 868	4,623	1932	0,793	306,16
9	2,365	13 622	4,541	3787	0,716	232,5
10	2,36	22 944	4,57	4913	0,87	425
15	2,35	8 858	4,53	21571	0,838	652

où - $T_c(L) = T_c(\infty)\ (1 + \frac{0,36}{L})$ (voir annexe sur les hypothèses de scaling) ;

- S est la persistance moyenne d'un évènement, dont on vérifie qu'elle est indépendante de L ;

- C(0) est la valeur de la fonction d'autocorrélation à l'origine $C(0) = \overline{M^2} - \overline{M}^2 \simeq \overline{M^2}$

voir aussi la courbe τ_c en fonction de L est présenté ci-après : courbe (I
Les points déjà connus [II] ont été portés sur le diagramme.
Le point $\tau_c(15)$ est hors-courbe, ceci est dû à un temps d'enregistrement trop court.
Le point $\tau_c(2)$ est aussi "hors scaling".
Toutes ces valeurs numériques conduisent à :

$$\boxed{\tau_c(L) = 4,25\ L^2}$$

* spectre de puissance

La présentation de toutes les valeurs numériques $S(\omega)$ étant trop volumineuses, seules quelques tailles sont présentées :

L = 1

ω	S(ω)
.00000000E+00	.22888741E+10
.24523167E-05	.21123404E+10
.49046334E-05	.35668328E+07
.73569502E-05	.31209730E+09
.98092669E-05	.48933114E+06
.12261584E-04	.56859865E+08
.14713900E-04	.41549500E+08
.17166217E-04	.41600860E+08
.19618534E-04	.17425580E+08
.22070850E-04	.26432492E+08
.24523167E-04	.27408355E+07
.26975484E-04	.21817563E+08
.29427801E-04	.11542545E+08
.31880117E-04	.19719340E+08
.34332434E-04	.41184894E+07
.36784751E-04	.79489550E+07
.39237068E-04	.42690269E+07
.41689384E-04	.11264287E+08
.44141701E-04	.71601070E+07
.46594017E-04	.14424086E+08
.49046334E-04	.42658330E+07
.51498651E-04	.57720901E+07
.53950968E-04	.28122104E+07
.56403284E-04	.71122998E+07
.58855601E-04	.17272040E+07
.61307918E-04	.46794729E+07
.63760234E-04	.21766803E+07
.66212551E-04	.73277559E+07
.68664868E-04	.42367979E+07
.71117184E-04	.39533063E+07
.73569501E-04	.27153021E+07
.76021818E-04	.27404448E+07

L = 9

ω	S(ω)
.00000000E+00	.51058557E+08
.16480101E-04	.31583701E+08
.32960203E-04	.80633830E+07
.49440304E-04	.35864587E+07
.65920405E-04	.35145527E+07
.82400507E-04	.17816439E+07
.98880609E-04	.10762496E+07
.11536071E-03	.10919854E+07
.13184081E-03	.48175979E+06
.14832091E-03	.62002149E+06
.16480101E-03	.52728362E+06
.18128112E-03	.40423543E+06
.19776122E-03	.36520907E+06
.21424132E-03	.38305133E+06
.23072142E-03	.21536346E+06
.24720152E-03	.25854255E+06
.26368162E-03	.12296156E+06
.28016172E-03	.18456442E+06
.29664183E-03	.11551160E+06
.31312193E-03	.15084048E+06
.32960203E-03	.82848981E+05
.34608213E-03	.12499915E+06
.36256223E-03	.76892238E+05
.37904233E-03	.78532419E+05
.39552243E-03	.71520526E+05
.41200254E-03	.76776624E+05
.42848264E-03	.50221717E+05
.44496274E-03	.52063322E+05
.46144284E-03	.45524860E+05
.47792294E-03	.72491769E+05
.49440304E-03	.35358493E+05
.51088315E-03	.52325815E+05

L = 5

ω	S(ω)
.00000000E+00	.38770358E+07
.29923229E-04	.28946479E+07
.59846458E-04	.15760018E+07
.89769687E-04	.83263902E+06
.11969292E-03	.53626410E+06
.14961615E-03	.41817935E+06
.17953937E-03	.16603594E+06
.20946261E-03	.22395476E+06
.23938583E-03	.11437972E+06
.26930906E-03	.13965939E+06
.29923229E-03	.10399526E+06
.32915552E-03	.92847699E+05
.35907875E-03	.55507344E+05
.38900198E-03	.52638640E+05
.41892521E-03	.19076646E+05
.44884844E-03	.49394192E+05
.47877167E-03	.37548839E+05
.50869489E-03	.50345127E+05
.53861813E-03	.24903205E+05
.56854136E-03	.38443897E+05
.59846458E-03	.22283327E+05
.62838782E-03	.29458681E+05
.65831104E-03 ←	.14763165E+05
.68823427E-03	.21388085E+05
.71815750E-03	.17439542E+05
.74808073E-03	.17162839E+05
.77800396E-03 ←	.12660052E+05
.80792719E-03	.15947946E+05
.83785042E-03	.10374481E+05
.86777365E-03	.11649178E+05
.89769687E-03	.74172236E+04

L = 4

ω	S(ω)
.00000000E+00	.10031605E+06
.13597787E-04	.78461790E+05
.27195575E-04	.13805340E+06
.40793363E-04	.17225509E+06
.54391150E-04	.90652140E+05
.67988937E-04	.16186120E+06
.81586725E-04	.66506542E+05
.95184512E-04	.11401139E+06
.10878230E-03	.17157822E+05
.12238009E-03	.22969904E+06
.13597787E-03	.16227660E+06
.14957566E-03	.12352643E+06
.16317345E-03	.11038762E+06
.17677124E-03	.10410432E+06
.19036902E-03	.14743142E+06
.20396681E-03	.62267104E+05
.21756460E-03	.80835082E+05
.23116239E-03	.56862069E+05
.24476017E-03	.79713072E+05
.25835796E-03	.94433324E+05
.27195575E-03	.71776258E+05
.28555353E-03	.54114942E+05
.29915132E-03	.60604052E+05
.31274911E-03	.63881953E+05
.32634690E-03	.73247472E+05
.33994469E-03	.55669230E+05
.35354247E-03	.45089543E+05
.36714026E-03	.38209677E+05
.38073805E-03	.43203513E+05
.39433584E-03	.28630761E+05
.40793362E-03	.51123784E+05

puis les résultats sont reportés dans le diagramme (II) qui représente $S(\omega)/L^{5,75}$ en fonction de ωL^2 dans le domaine critique, il vient :

$$\frac{S_M(\omega)}{L^{5,75}} = \frac{1,78\ 10^{-6}}{(\omega L^2)^{2,875}} \qquad \omega > \frac{1}{\tau_c}$$

(voir annexe pour interprétation)

b) énergie

* Calcul de B et z

En reprenant les mêmes notations, les résultats deviennent :

L	T_c	Temps total d'enregistrement en MCS/spin	S en MCS	C(O) MCS/spins	énergie moyenne par spin	τ_c MCS/spin
6	2,405	4600	4,59	176,9	- 1,36	11,5
7	2,386	6640	4,43	247,1	- 1,34	15,5
8	2,371	3030	4,85	372,57	- 1,39	13,842
9	2,365	4305	4,465	470,97	- 1,414	18,28
10	2,36	3519	4,4	631,9	- 1,4	20,4
13	2,85	6781	4,5	1081,25	- 1,35	35,89

On trouve bien que l'exposant z est le même et l'on a :

$$(\tau_c)_{ener} = \frac{1}{20}\ (\tau_c)_{aim}$$

voir diagramme (II)

ce qui explique que l'on a pu procéder à des simulations beaucoup plus courtes.

* Spectre de puissance

On présente le même tableau que pour l'aimantation.

Puis les résultats sont répartis dans le diagramme (III) qui représente $S(\omega)/L^4$ en fonction de ωL^2 il vient :

$$\frac{S(\omega)}{L^4} = \frac{0,265}{(\omega L^2)^2} \qquad \omega > \frac{1}{\tau_c}$$

(voir annexe pour interprétation)

II - VERRE DE SPIN

Les calculs ont été faits sur des modèles du type (2, maillage carré, tore, J_{ij} tiré au hasard uniforme sur [-1, 1]) et n'ont porté que sur l'aimantation. Les programmes continuent d'être exploités sur l'énergie.

a) Etude de τ_c, S et $\overline{M}/n$

On peut dresser les résultats suivants :

L	T	Temps d'enregistrement en MCS/spin	S en MCS	C(0) en MCS/spin	Aimantation moyenne M/n	τ_c en MCS/spin
5	Tg	56 139	11,2	0,983	0,018	3265
15	Tg	8 969	8,97	0,82	0,002	447
24	Tg	2 077	9,23	1,08	0,017	207
33	Tg	2 072	9,21	0,96	0,02	39
15	0,2	20 680 !	45,9	0,1	0,0078	2027

avec Tg =

(on présente, pour mémoire, un échantillon froid).

On constate, qu'à la différence du modèle d'Ising 2, est une fonction décroissante de L.

b) Spectre de puissance

Les tableaux suivants présentent les différents spectres de puissance.

Le diagramme (IV) présente $S(\omega)$ en fonction de ω, il apparaît :

$$S(\omega) \simeq \frac{5\ 10^{-2}}{\omega} \qquad \omega > \frac{1}{\tau_c}$$

CONCLUSION

Ising

1°. à T_c détermination du pouvoir spectral :

$$\frac{S_M(\omega)}{L^{5,75}} = \frac{1,78\ 10^6}{(\omega L^2)^{2,875}}$$

2°. Vérification du "Scaling Statique" pour $\overline{\Delta M^2}$ ou la susceptibilité.

3°. Détermination numérique de :

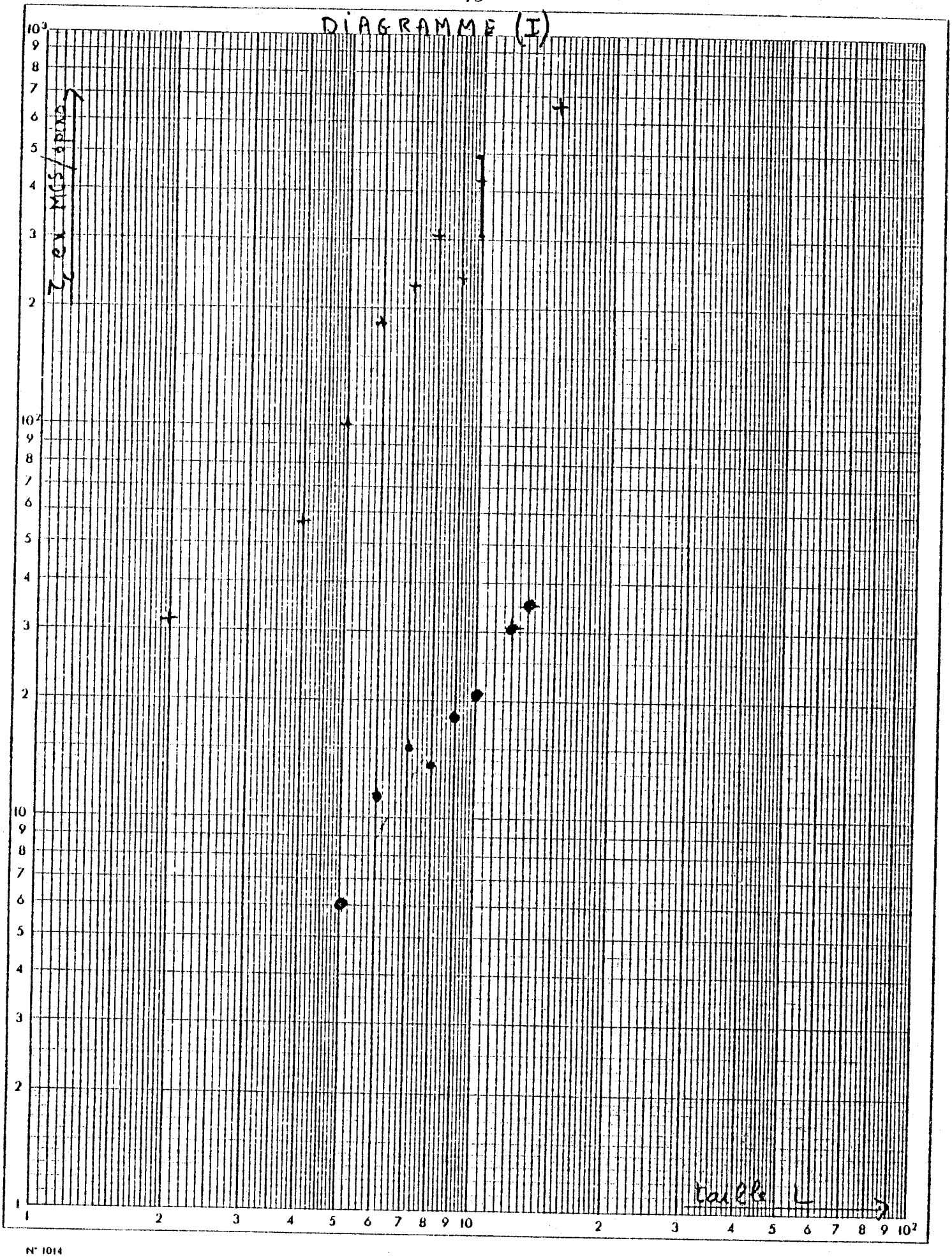
$(\tau_c)_{aim} = 4,25\ L^2$ et $(\tau_c)_{em} = \frac{1}{20}\ (\tau_c)_{aim}$

Verre de spin

1°. à Tg détermination du pouvoir spectral :

$S(\omega) = \frac{5\ 10^{-2}}{\omega}$ Bruit en 1/f

2°. Pas de dépendance critique en taille pour τ_c. τ_c décroît quand n croît.



N° 1014

DIAGRAMME II

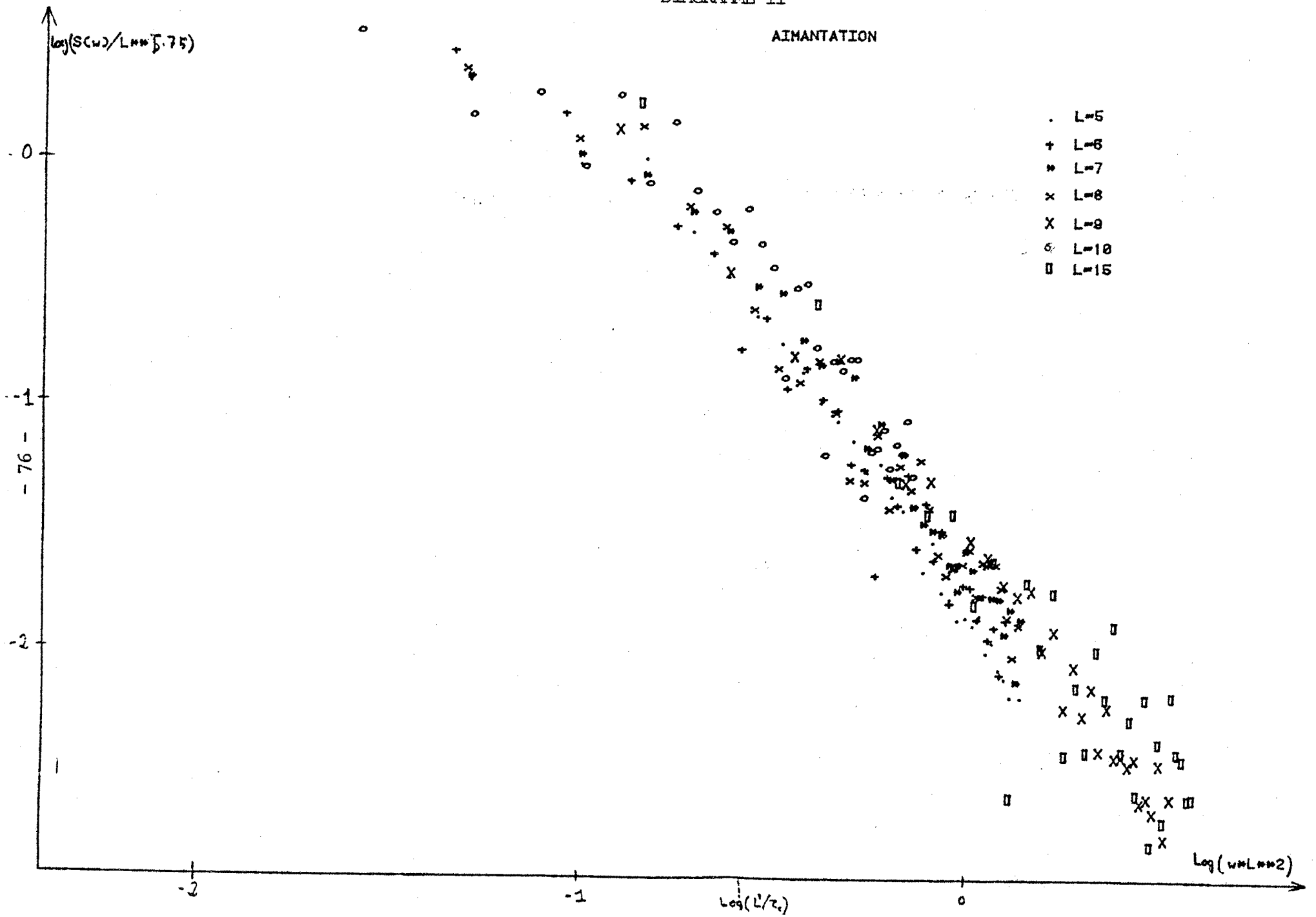
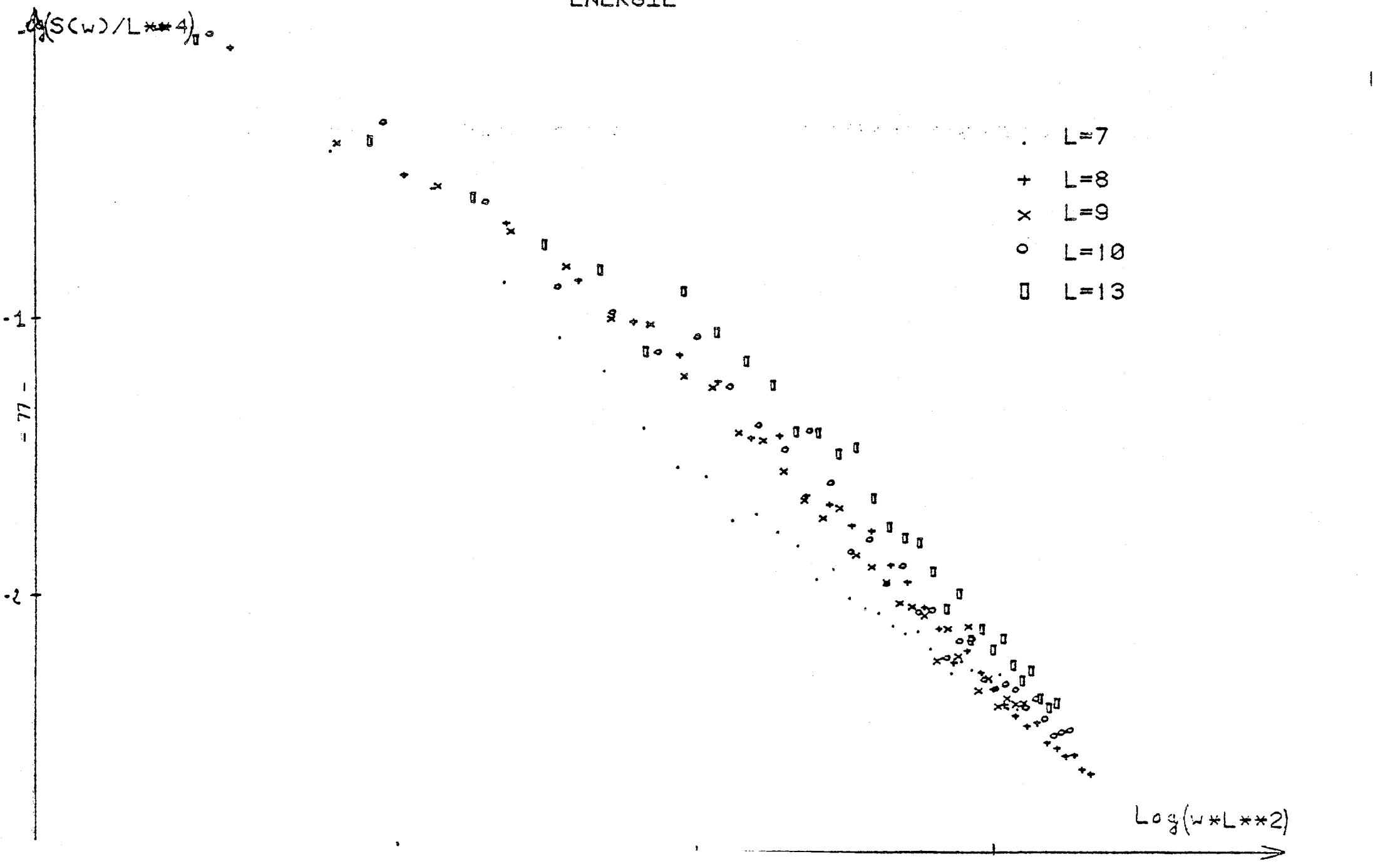
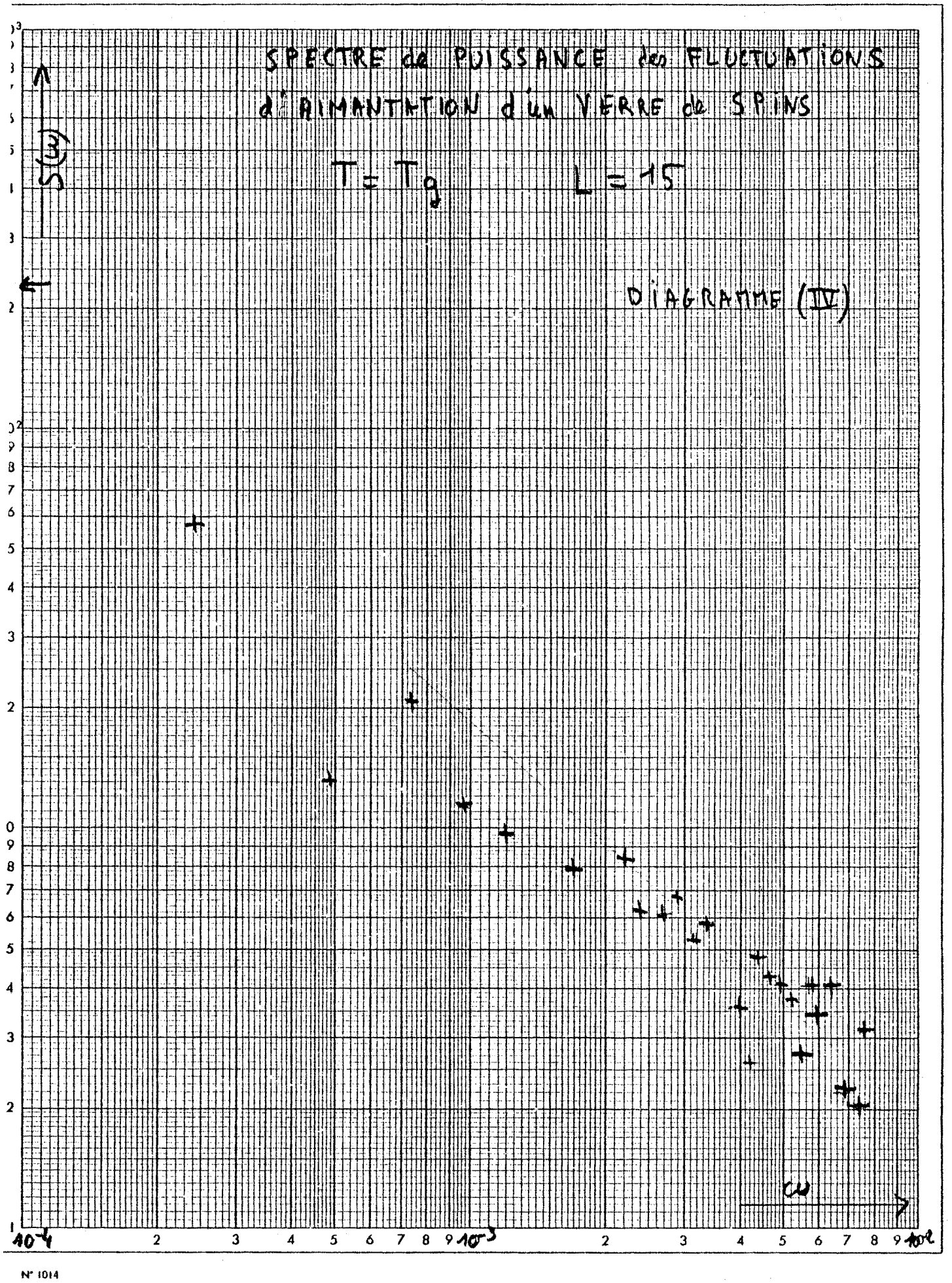


DIAGRAMME III

ENERGIE




SPECTRE de PUISSANCE des FLUCTUATIONS
d'AIMANTATION d'un VERRE de SPINS
T = Tg
L = 15
DIAGRAMME (IV)
S(ω)
ω
10⁻⁴
10⁻³
10⁻²

- Les Papiers Canson - Fabriqué -

* L=9 * ISING * Tc *

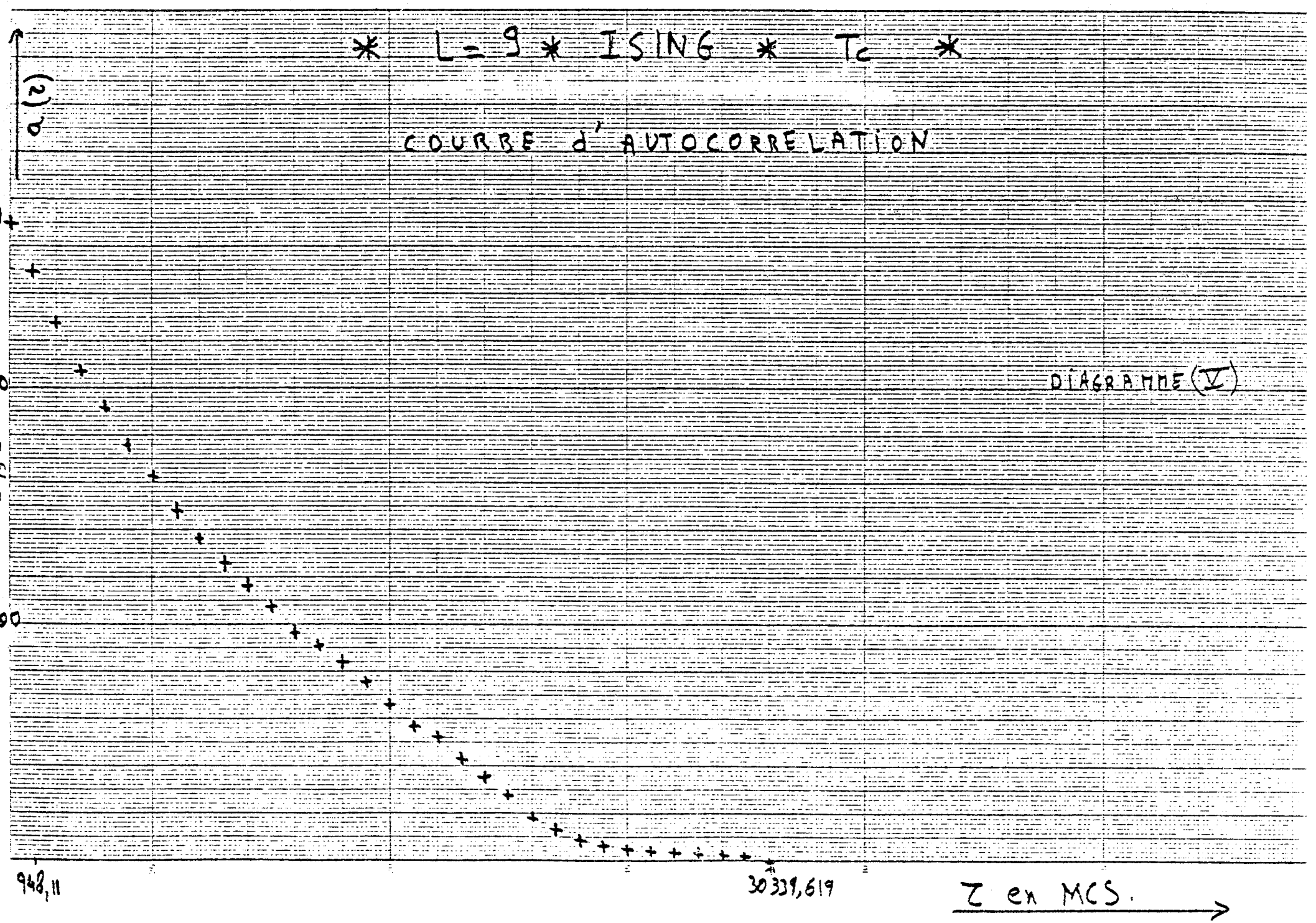
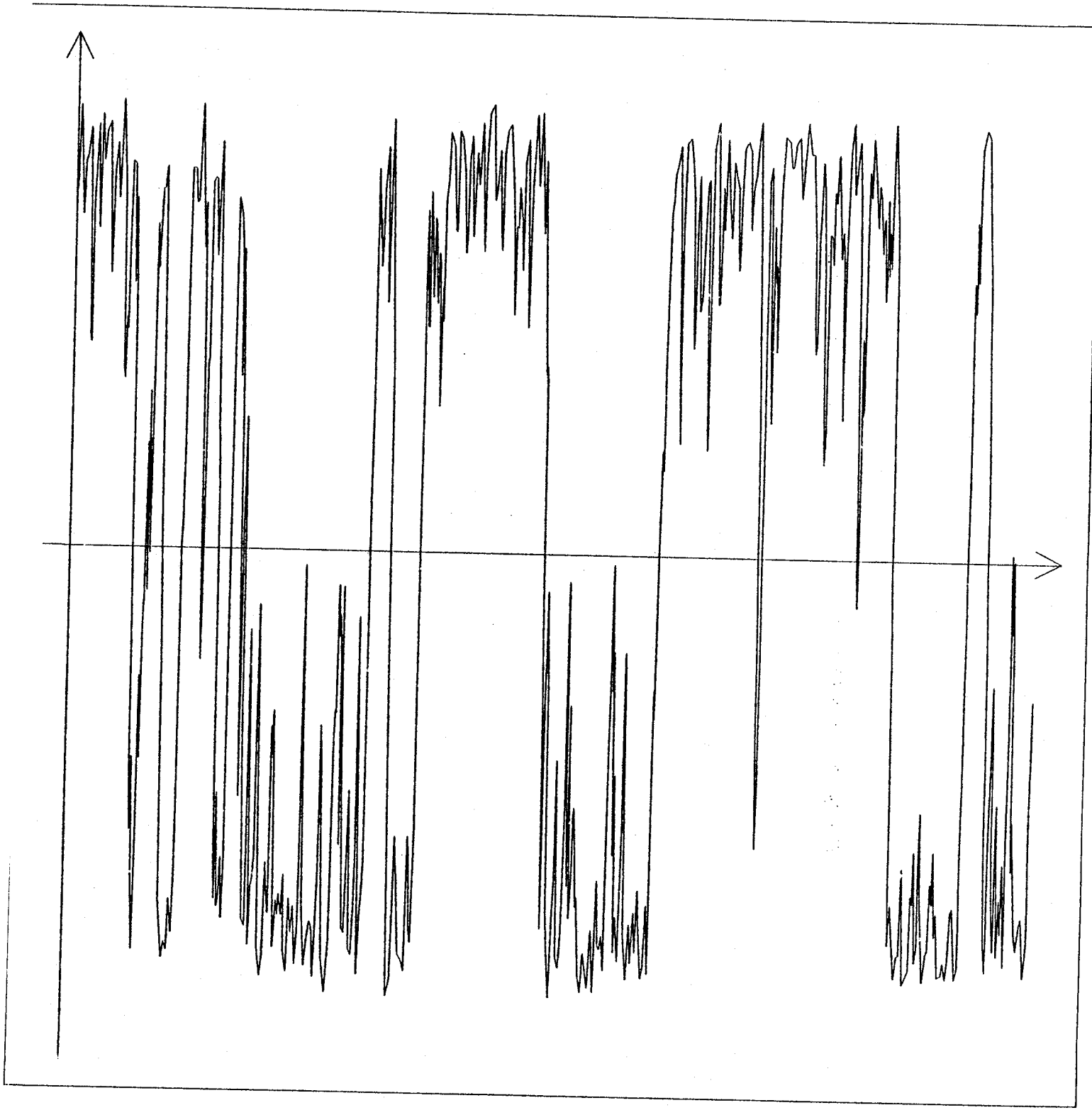


DIAGRAMME (V)

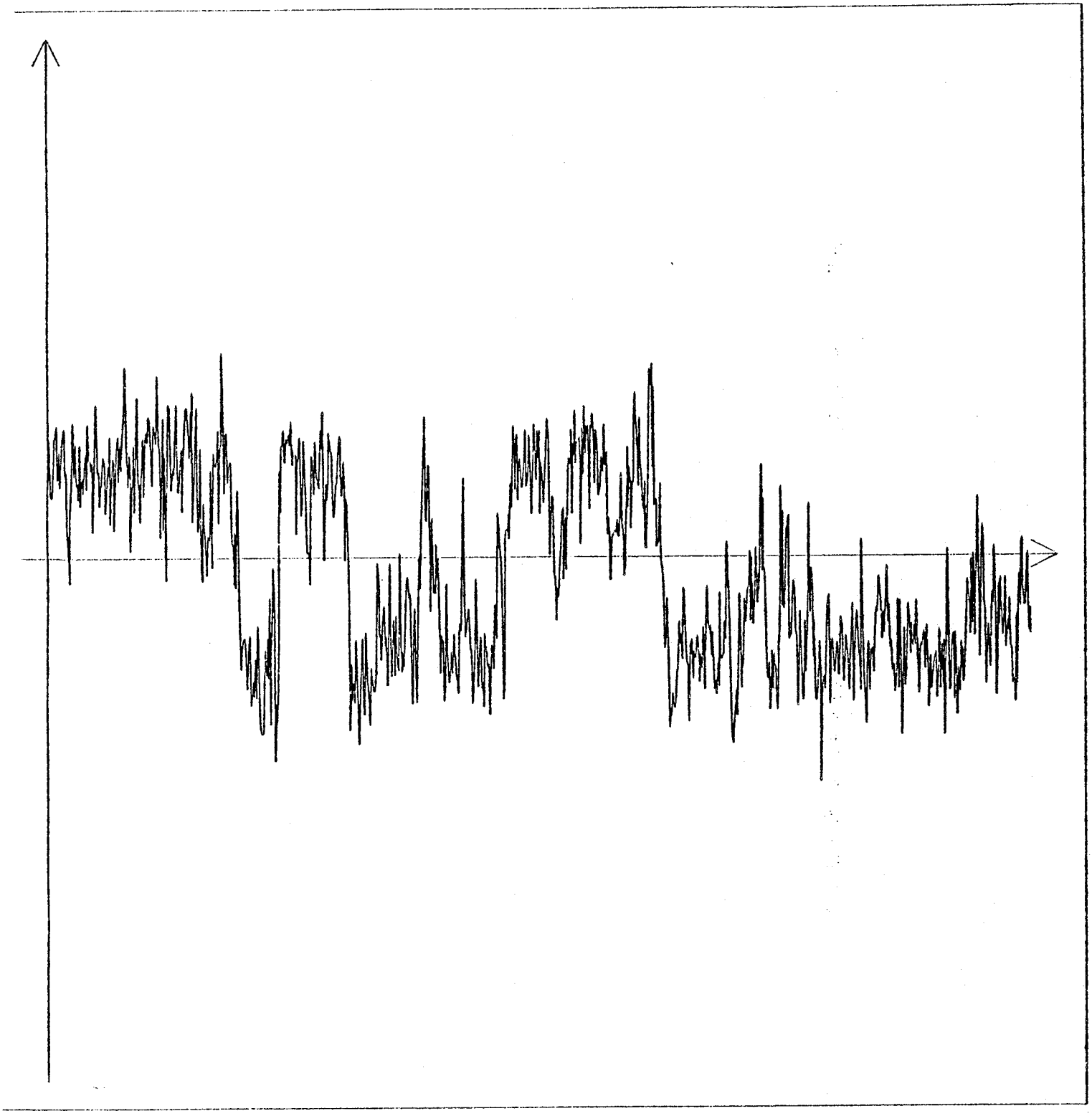
FLUCTUATIONS D'AIMANTATION A T_c

(MODELE D'ISING)



FLUCTUATIONS D'AIMANTATION A T_g D'UN VERRE DE SPINS

(APRES CONCENTRATION)



CHAPITRE VI

CALCUL DE LA FONCTION DE PARTITION

Cette partie présente un procédé très simple de calcul de la fonction de partition sur des modèles d'un type particulier : les modèles du type : (2, carré, bord libre, quelconque).

I - ASPECT THEORIQUE

1. Cas général

On se propose de calculer la fonction de partition Z sur un maillage du type cité plus haut :

$$Z_n(T) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\left(-\frac{E(\sigma)}{T}\right) \qquad (I)$$

où σ est une configuration de spins, $E(\sigma)$ son énergie, T la température, et où l'on somme sur toutes les configurations.

Posons $x_{ij} = \text{th}\,\frac{J_{ij}}{T}$ $\quad 1 \leq i \leq IN$ $\quad 1 \leq j \leq IN$

où J_{ij} est la valeur de la liaison entre le spin i et le spin j proches voisins.

On montre [I] que l'on peut écrire :

$$Z_N(T) = \prod_{(i,j)\text{voisins}} (1-x_{ij}^2)^{-1/2} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)\text{voisins}} (1+x_{ij}\,\sigma_i\sigma_j) \qquad (II)$$

où (i,j) voisins signifie que le spin i est connecté au spin j par la liaison J_{ij} qui induit la variable $x_{ij} = \text{th}\,\frac{J_{ij}}{T}$. La sommation $\sum_{\{\sigma\}}$ porte sur les 2^{N^2} configurations de spins $\sigma = \{\sigma_i,\ 1 \le i \le N\}$.

On montre aussi que :

$$\sum_{\{\sigma\}} \prod_{(i,j)\text{voisins}} (1+x_{ij}\,\sigma_i\sigma_j) = 2^N\,(\det[I-\Delta])^{1/2} \qquad (III)$$

où $\Delta = \Lambda \mathfrak{D}$

est une matrice $4\,N^2 \times 4\,N^2$ définie ainsi :

Définition de Λ :

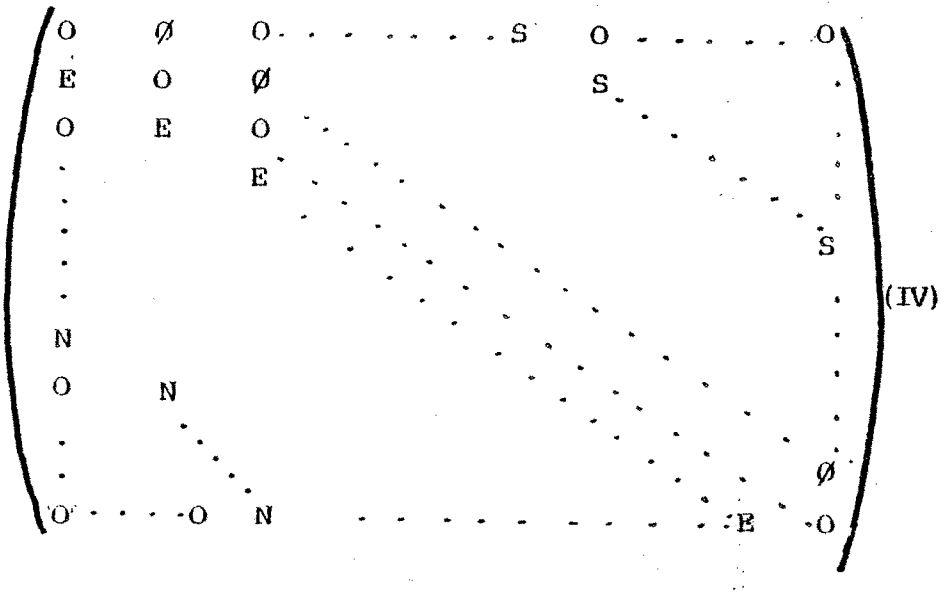
Soit J la matrice d'incidence :

$$J = \begin{pmatrix}
0 & 1 & 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\
1 & 0 & 1 & & & 1 & \\
0 & 1 & 0 & & & & \\
 & & & 1 & & & \\
 & & & 1\ 0\ 0 & & & \\
1 & & & 0\ 0\ 1 & & & 1 \\
 & 1 & & 0\ 1\ 0\ 1 & & & \\
 & & & & & & 1 \\
0 & \cdots & & \cdots & 1 & \cdots & 1\ 0
\end{pmatrix}$$

$$J_{ij} = \begin{cases} 1 \text{ si le spin i est relié au spin j} \\ 0 \qquad\quad \text{sinon} \end{cases}$$

s'obtient en faisant subir 2 transformations à J :

1°. Remplaçons chaque J_{ij} qui vaut 1 par le symbole N, E, S ou Ø suivant que J_{ij} représente une liaison nord, est, sud ou ouest.



Attention que les bords libres introduisent des termes nuls sur les sur diagonales et sous diagonales.

2°. Chaque symbole est remplacé par le bloc 4 x 4 suivant :

$$0 = \begin{pmatrix} 0&0&0&0\\ 0&0&0&0\\ 0&0&0&0\\ 0&0&0&0 \end{pmatrix} = 0_4 \qquad \emptyset = \begin{pmatrix} 1&a&0&\bar{a}\\ 0&0&0&0\\ 0&0&0&0\\ 0&0&0&0 \end{pmatrix}$$

$$S = \begin{pmatrix} 0&0&0&0\\ 0&\underline{0}&0&0\\ 0&\bar{a}&1&a\\ 0&0&&0 \end{pmatrix} \qquad E = \begin{pmatrix} \underline{0}&0&0&0\\ \bar{a}&1&a&0\\ 0&0&0&0\\ 0&0&0&0 \end{pmatrix} \qquad \text{(IV)}$$

$$\text{et } N = \begin{pmatrix} 0&0&0&0\\ 0&0&0&0\\ 0&0&\underline{0}&0\\ a&0&\bar{a}&1 \end{pmatrix} \qquad \text{avec} \quad a = e^{i\pi/4}$$

$\mathcal{D}$ est aussi une matrice $4N^2 \times 4N^2$ définie ainsi :

Définition de $\mathcal{D}$:

Partant aussi de la matrice d'incidence, tous les termes diagonaux sont remplacés par 0_4 et le terme correspondant au site (i,j) $1 \leq i \leq N$ et $1 \leq j \leq N$ est remplacé par :

$$E_{ij} = \begin{pmatrix} J_{ij} & 0 & 0 & 0\\ 0 & J_{i-1j} & 0 & 0\\ 0 & 0 & J_{ij-1} & 0\\ 0 & 0 & 0 & J_{i-1J-1} \end{pmatrix}$$

correspondant aux quatre liaisons adjacentes au spin i-j.

Reportant alors (III) dans (II) il vient :

$$Z_N(T) = \left[2^N \prod_{(i,j)} (1-x_{ij}^2)^{-1/2}\right] \quad (\det\ (I-\Delta))^{1/2}$$

2°. Cas du modèle $\pm$ J.

On a alors $x_{ij} = th\ (\frac{\pm J}{T}) = \pm\ th\ (\frac{J}{T})$

suivant que la liaison J_{ij} vaut + 1 ou - 1
d'où $x_{ij}^2 = th^2\ \frac{J}{T}$
posons alors $x = th\ \frac{J}{T}$

Reportons dans (V)

$$Z_N(T) = 2^N (1-x^2)^{-N}\ (\det\ (I-\Delta))^{1/2}$$

or $\Delta = \Lambda\, \mathcal{D}$ $\mathcal{D}$ ne dépend pas des x_{ij} et Λ peut s'écrire :

$$\Lambda = x \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & & \\ \vdots & & & & 0 \\ 0 & & & 0 & \varepsilon_{4N^2} \end{pmatrix} = x\ \Lambda_J$$

avec $\varepsilon_i = \pm\ 1$

donc $Z_N(T)$ s'exprime uniquement en fonction de x.

$$\boxed{Z_N(T) = 2^N \prod_{ij} (1-x^2)^{-1/2}\ (\det\ (I-x\ \Lambda_J \mathcal{D}))^{1/2}}$$

où Λ contient la configuration de liaisons.

Le calcul de Z apparaît alors comme le calcul d'un déterminant. C'est-à-dire que le calcul de Z est polynomial.

De plus, la structure très particulière du déterminant permet un algorithme très spécialisé.

3. Intérêt du calcul de Z

1°. Le calcul de Z permet bien sûr de retrouver tous les paramètres physiques.

2°. Mais de plus, une conjecture de M Fisher [II] est que "les zéros de la série, limite du polynôme Z_n quand la taille tend vers l'infini, se répartissent sur une courbe fermée qui coupe l'axe des x en un point d'abscisse $x_c = \text{th} \frac{J}{T_c}$ où T_c est la température critique.
Le calcul de $Z_N(x)$ peut donc permettre de calculer, par des méthodes d'interpolation, des zéros de Z_N, et en faisant varier N, de chercher numériquement la courbe limite de ces zéros.

II - CALCUL PRATIQUE

1. Présentation

On s'intéresse d'abord aux modèles "factorisables" : donc de la forme (2, carré, bord libre, $\pm$ J), pour lesquels la fonction $Z_N(T)$ s'exprime en fonction de $x = \text{th} \frac{J}{T}$.

Dans la formule (VI), seul le calcul du déterminant det $(I - x \Lambda_J \mathcal{D})$ présente une difficulté.

A un modèle de dimension N x N (N^2 spin) correspond un déterminant de taille $4\ N^2 \times 4\ N^2$. L'application brutale de la méthode d'élimination de Gauss conduirait à un algorithme en $(\frac{4\ N^2}{6})^3 = \frac{32}{3}\ N^6$ multiplications (en ne gardant que le terme de plus haut degré).

Cependant, on peut bien améliorer cet algorithme en utilisant les particularités de la matrice, qui sont de deux types :

- particularités géométriques ;
- particulartiés des valeurs.

Seules les particularités géométriques ont été utilisées.

2. Particularités géométriques

a) chaque ligne ne contient d'abord au plus que 4 valeurs non nulles. Certaines d'entre elles n'en contiennent qu'une, le terme diagonal qui vaut 1. Ce sont les lignes correspondant aux spins du bord, dans la direction où ceux-ci sont libres (par exemple le spin (1,1) dans les directions Nord et Ouest). Il y a donc 4 N lignes de ce type, que l'on peut retirer du déterminant, avec bien sûr les colonnes correspondantes. Il reste à calculer un déterminant $4\ N^2 - 4\ N = 4\ N\ (N-1)$

b) La méthode de Gauss consiste à remplacer la matrice proposée par une matrice triangulaire inférieure qui lui soit semblable, par combinaisons linéaires successives des lignes entre elles. Or ici, certaines lignes sont déjà triangulaires inférieures. Ce sont celles correspondant à une ligne de 0 pour les blocs 0 et S (voir (IV) et (IV')). Il y en a 2 pour 4 soit 1 sur 2 !

c) Ce déterminant a de plus une "structure boucle" de longueur $4(n+1)$, donc dans les combinaisons linéaires des lignes seules au plus les $4(n+1)$ premiers termes seront à combiner, et beaucoup seront nuls. L'évaluation du nombre de ces termes nuls au cours du calcul est difficile, et rend impossible l'estimation exacte de l'algorithme. On ne peut qu'en calculer un majorant, qui sera d'autant moins bon que la taille est petite.

On ne traite que $2n(n-1)$ lignes et les combinaisons linéaires ne portent que sur $4\,n + 4$ termes.

Soit donc n_x le nombre de multiplications.

$$n_x < \sum_{i=1}^{2N(N-1)-1} 4(N+1) = \sum_{i=1}^{2N(N-1)-1} N + 4 \sum_{i=1}^{2N(N-1)-1} 1$$

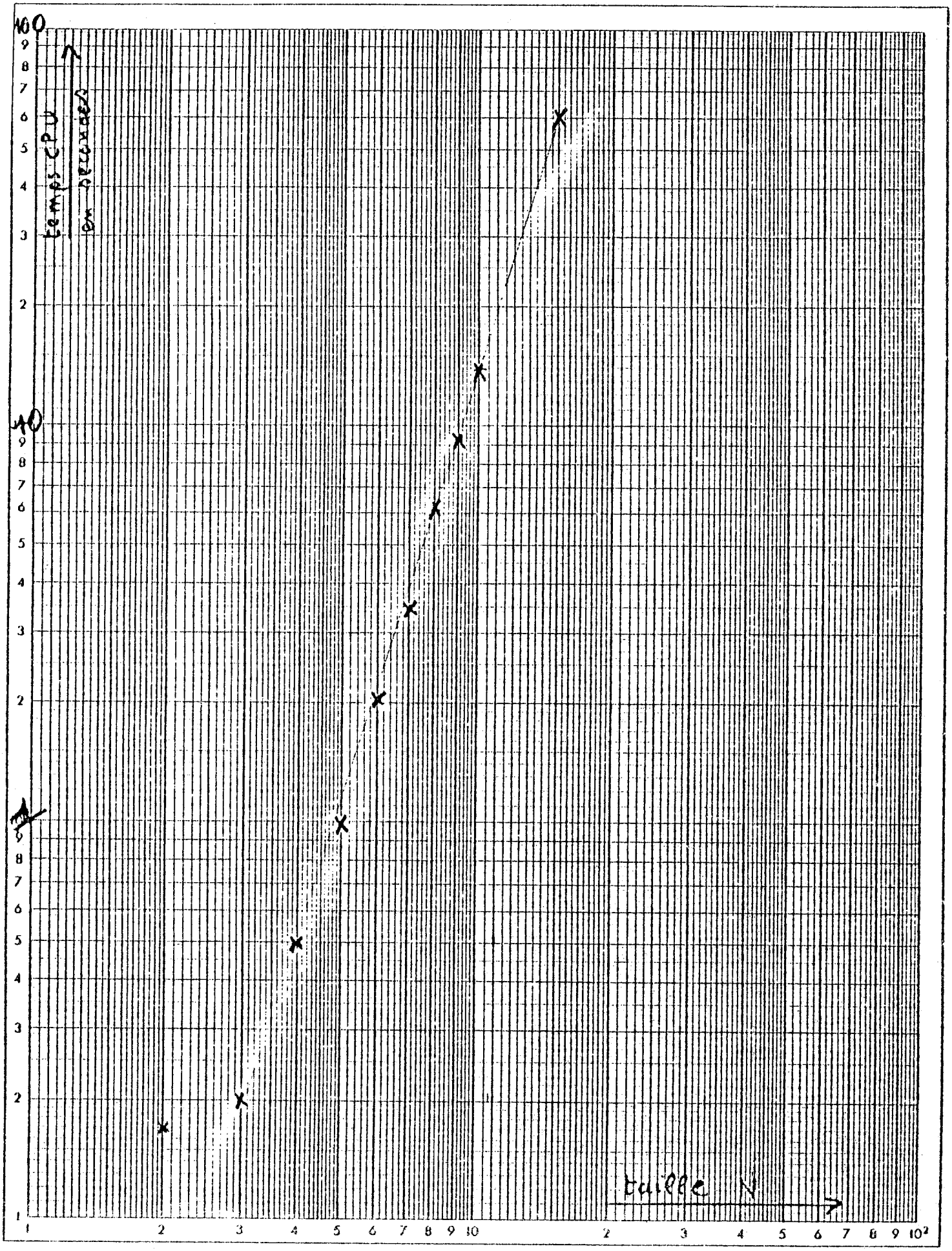
$$n_x < 4\ \frac{(2N(N-1)-1)\ (2N(N-1))}{2} + 4\ (2N(N-1)+1)$$

le terme de plus haut degré vaut $8\ N^4$:

$$n_x < 8\ N^4$$

3. Les résultats

L'exploitation de cet algorithme est en cours. Cependant des calculs préliminaires, pour le rester et évaluer sa complexité, ont été fait sur ces grilles où $Z_N(t)$ avait été calculé par des méthodes de dénombrement partiel [III]. Les résultats sont satisfaisants, bien que ces vérifications n'aient pas porté sur des grilles de taille supérieure à 7 x 7.



N° 1014

Les coûts de l'algorithme pour le calcul d'une valeur $Z_N(T)$ sont résumés dans le tableau :

Taille	Temps total CPU en seconde
2	0,17
3	0,2
4	0,5
5	1,07
6	2,05
7	3,5
8	6,05
9	9,3
10	14 s
15	60 s

Les variations du temps de calcul t(N) sont représentés sur la figure ci-contre ; on en déduit la loi empirique :

$$t(N) = A\, N^{\alpha} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} A = 9 \quad 10^{-3} \\ d = 3{,}15 \end{cases}$$

$2 \leq N \leq 15$

REFERENCES

[I] N. VDOVITCHERKO
Journal Phys. URSS 49,526 (1965)

[II] M.E. FISHER
Lectures in theoretical Physics 7c (University of Colorado Press, Boulder, 1965)

[III] R. RAMMAL
Thèse 1981.

ANNEXE

LES LOIS D'ECHELLES

Les lois d'échelles (loi du "scaling") sont des postulats "a priori" posés par des physiciens et que l'expérience (souvent l'expérimentation numérique par simulation) doivent confirmer (ou infirmer !). ([I]) ([II])

Ces lois sont relatives au comportement *en taille* des systèmes critiques. Elles posent des hypothèses sur la nature des singularités des fonctions de réponse du système, elles discutent aussi du comportement limite en taille, et elles postulent enfin que les variables du système se groupent entre elles pour devenir arguments de fonctions *universelles*.

Plus précisément :

Les hypothèses de "loi d'échelle statique" introduisent une longueur de cohérence ξ ; la taille L du système interviendra alors sous la forme L/ξ.

Les hypothèses de "loi d'échelle dynamique" introduisent de même un temps de corrélation τ_L ; et le temps t n'interviendra que sous la forme t/τ_L.

Par définition, la longueur de cohérence ξ diverge comme $\xi = \xi_0 \ \epsilon^{-\nu}$ à la température T avec $\epsilon = (T-T_c(\infty))/T_c(\infty)$; ξ_0 est une constante. A taille finie, on introduit $\epsilon = (T-T_c(N))/T_c(\infty)$. On a $T_c(N) \neq T_c(\infty)$: $T_c(N) = T_c(\infty)(1 + AL^{-\lambda})$ d'où δt qui représente la variation en taille de ϵ $\quad \delta\epsilon = (T_c(\infty)\ (1 + AL^{-\lambda}) - T_c(\infty))/T_c(\infty)$ d'où $\delta\epsilon = AL^{-\lambda}$ soit en posant $\nu = 1/\lambda$

$$\delta\epsilon = AL^{-1/\nu}$$

(par exemple pour le cas d = 2 ferromagnétique A = 0,36 ; O = 1).

De la même manière, le temps de corrélation τ_L diverge avec la taille $\tau_L^{aim} = AL^z$ (On a calculé numériquement A et z) pour l'aimantation et $\tau_L^{ener} = BL^{z'}$ pour l'énergie (on a vu aussi z' = z, B = A/20). Le temps interviendra donc sous la forme $\frac{t}{\tau_L} = \frac{t}{A} L^{-z}$ et la variable de la fonction universelle sera $x = tL^{-z}$.

On pourra alors écrire, en variables intensives (c'est-à-dire en unités de temps *par spins*, en aimantation ou en énergie par spins).

$$m(L,t) = L^{-\beta/\nu}\ f_m\ (t\ L^{1/\nu},\ t\ L^{-z})$$

$$e(L,t) = L^{-(1-\alpha)/\nu}\ f\ (t\ L^{1/\nu},\ t\ L^{-z})$$

d'où $C_m(t) = < m(O, m(t) > = L^{-2\beta/\nu}\ \phi m(t\ L^{1/\nu}\ ,\ t\ L^{-z})$

et $\quad C_e(t) = < m(O), m(t) > = L^{-2(1-\alpha)/\nu}\ \phi_e(t\ L^{1/\nu},\ t\ L^{-z})$

et si :

$$S_m(\omega) = \text{T.F. } (C_m(t)) \text{ et } S_e(\omega) = \text{T.F. } (C_e(t))$$

$$S_m(\omega) = 4 \int_0^\infty \cos\ t\ L^{-2\beta/\nu}\ \phi_m\ (tL^{1/\nu},\ tL^{-z})\ dt$$

et

$$S_e(\omega) = 4 \int_0^\infty \cos\ t\ L^{-2(1-\alpha)/\nu}\ \phi_e\ (t\ L^{1/\nu},\ t\ L^{-z})\ dt$$

en posant $x = t\,L^{-z}$ il vient :

$$\begin{cases} S_m(\omega) = L^{z-2\beta/\nu}\ \psi_m\ (L^{1/\nu},\ t\,L^{-z}) \\ S_e(\omega) = L^{z-2(1-\alpha)/\nu}\ \psi_e\ (L^{1/\nu},\ t\,L^{-z}) \end{cases}$$

passons alors aux variables extensives M et E (c'est-à-dire que l'on ne ramène plus par spins) si d est la dimension, il y a L^d spins ;

$$C_M(t) = \left\langle \sum_{i=1}^{n} \sigma_i(0) \times \sum_{j=1}^{n} \sigma_j(t) \right\rangle \propto L^{2d}\, C_m(t)$$

d'où :

$$\begin{cases} S_M(\omega) = L^{2d+z-2\beta/\nu}\ \Phi_m\ (L^{1/\nu},\ t\,L^{-z}) \\ S_E(\omega) = L^{2d+z-2(1-\alpha)/\nu}\ \Phi_e\ (L^{1/\nu},\ t\,L^{-z}) \end{cases}$$

Introduisons un autre paramètre à γ (c'est le paramètre tel que $\chi \sim \varepsilon^{-\gamma}$ à $T \gtrsim T_c$) en utilisant les relations de Rushbrooke; $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ et de Josephson; $d\nu = 2-\alpha$ il vient :

$$d\nu = 2-\alpha = 2\beta+\gamma \text{ d'où } 2d+z-2\beta/\nu = d+z+\gamma/\nu$$

et $$z - 2\,\frac{1-\alpha}{\nu} = d + z + \alpha/\nu$$

reportons alors dans (I) : en nous mettant à T_c (donc $\varepsilon \equiv 0$)

il vient :

$$(II) \quad \begin{cases} S_M(\omega,L) = L^{d+z+\gamma/\nu}\ \Phi_M(\omega L^z) \\ S_E(\omega,L) = L^{d+z+\alpha/\nu}\ \Phi_E(\omega L^z) \end{cases}$$

Or un troisième type de loi d'échelle indique qu'en taille infinie :

$$(III) \quad \begin{cases} \lim\limits_{L\to\infty} S_M(\omega,L) = \begin{cases} \dfrac{L^d}{\omega^{\mu_M}} & \text{à } T \gtrsim T_c \\ \dfrac{L^{2d}}{\omega^{\mu_M}} & \text{à } T \lesssim T_c \end{cases} \\ \text{et} \\ \lim\limits_{L\to\infty} S_E(\omega,L) = \dfrac{L^d}{\omega^{\mu_E}} \end{cases}$$

Rapprochons (II) et (III) il vient :

$$\boxed{\mu_M = 1 + \gamma/\nu_z \qquad \mu_E = 1 + \alpha/\nu_z}$$

Interprétation des résultats numériques obtenus

On s'attend donc à trouver, puisque dans le cas "Ising à 2 dimensions" $z = 2$, $\nu = 1$, $\gamma = 7/4$, $\alpha = 0$

$$\mu_M = 1 + \frac{7}{8} = 1{,}875 \quad \text{et} \quad \mu_E = 1$$

On a tracé (voir diagramme (II) et diagramme (III) sachant $d+z+\gamma/\nu = 5{,}75$ et $d+z+\alpha/\nu = 2$ les "fonctions universelles ϕ_M et ϕ_E".

On vérifie bien que, pour ϕ_M, les points correspondants aux différentes tailles "se mélangent" en un même nuage de points. Pour vérifier la valeur de μ_M il faut prendre la pente de "la droite définie par le nuage de points" (coordonnées log-log). Cependant les lois d'échelles ne sont valables que pour certaines fréquences. En effet si $t < \tau_0$ soit $\omega > \frac{1}{\tau_0}$ soit $\omega L^2 > \frac{L^2}{\tau_0}$ où τ_0 est le temps moyen de retournement d'un spin, il y aura forte corrélation puisque "en moyenne", le système n'aura pas fluctuer, de même si $t > \tau_L$ donc si $\omega < \frac{1}{\tau_L}$ donc si $\omega L^2 < \frac{L^2}{\tau_L} = \frac{AL^2}{L^z} = A$ (ici $z = 2$!!), on aura évidemment du bruit blanc, puisque le système aura "oublié" un état initial.

On ne pourra donc observer le comportement attendu d'après les lois d'échelles que pour : $A > \log \omega L^2 > \log (L^2/\tau_0)$ c'est-à-dire sur un intervalle d'amplitude Δ_L :

$$(\Delta_L)_{aim} = 2 \log L - (\log \tau_0 - \log A)$$

et l'observation sera d'autant meilleure que Δ_L grand donc L grand :

Dans la "fenêtre considérée", les résultats obtenus correspondent bien aux résultats attendus.

Cependant pour ϕ_E, les résultats semblent moins bons. Ceci vient du fait que $(\tau_c)_{ener} < (\tau_c)_{aim}$ donc pour une même taille, l'amplitude $(\Delta_L)_{aim}$ sera beaucoup plus petite.

$$(\Delta_L)_{ener} = 2 \log L - (\log \tau_0 - \log (\frac{A}{20}) = (\Delta_L)_{aim} - \log 20.$$

Donc il faudra des tailles plus grandes pour rentrer dans le régime d'application des lois d'échelles. De plus, pour "mesurer" la pente μ_E, il faudra rester dans le domaine indiqué. Si l'on se conforme à ces restrictions, on trouve sensiblement la valeur attendue de μ_E.

BIBLIOGRAPHIE

CHAPITRE I

[I] L. ONSAGER : Physical Review 65 (1944) page 117

[II] K. BINDER, D. STAUFFER : Phys. Lett. A 57, 177 (1976)
voir aussi :
K. BINDER : Z Phys. B 26, 339 (1977)
voir aussi :
S. KIRKPATRICK : Phys. Rev. B 16, 4630 (1977)

CHAPITRE II

[I] K. BINDER : "Monte-Carlo Methods in Statiscal Physics"
Springer Verlag, Berlin (1979)

[II] F. ROBERT : Une approche booléenne du problème de la frustration.
Séminaire d'Analyse Numérique de l'IMAG n° 302,
Grenoble (1978).

[III] E. GOLES CHACC : Comportement oscillatoire d'une famille
d'automates cellulaires non uniformes.
Thèse de Docteur-Ingénieur (1980).

CHAPITRE III

[I] BORTZ, KALOS, LEBOWITZ : A new algorithm for Monte-Carlo simulation of Ising spin systems".
Journal of computational physics 17, 10-18 (1975).

[II] K. BINDER : "Monte-Carlo Methods in Statistical Physics".
Springer Verlag Berlin 1979.

[III] FELLER : "An introduction to probability theory and its application".
Vol. 1, Wiley (1970) (page 459).

CHAPITRE IV

[I] I.W. LEE : "Statistical theory of communication"
Wiley (1960).

[II] A. EBERHARD : "Algorithme de l'analyse harmonique numérique".
Thèse de Docteur-Ingénieur, Grenoble (1970).

[III] FELLER: "An introduction to probability theory and its application".
Vol. 1, Wiley (1970)

[IV] KARLIN : "Initiation au processus aléatoire". Dunod.

[V] R.S. VOSS, J. CLARK : "1/f noise" in music, music from 1/f noise
J. Acous. Soc. Am. 63 (1) janvier (1978).

[VI] M.J. KLEIN : Generalization of Ehrenfest Urn model.
Physical Review (103, 1) 1956.

CHAPITRE VI

[I] N. VDOVITCHERKO : Journal Phys. URSS 49,526 (1965)

[II] M.E. FISHER : Lectures in theoretical Physics 7c
(University of Colorado Press, Boulder, 1965).

[III] R. RAMMAL : Thèse 1981.

ANNEXE

[I] M.E. FISHER : Proceedings of the International Summer School
"Enrico Fermi".
Course LI (Academic, New-York, 1971)
voir aussi :
M.E. FISHER, M.N. BARBER : Phys. Rev. Lett 28, 1516 (1972).

[II] M. SUZUKI : Static and Dynamic Finite-size Scaling Theory
Based on the Renormalization Group Approach
Progress of Theorical Physics. Vol. 58 n° 4 (1977).

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 25.1.81

Le Président de la thèse N. Gastinel

Vu, et permis d'imprimer,

Grenoble, le 26.01.1981

Le Président de l'Université Scientifique et Médicale

G. CAU

Fréquence :	$\mathcal{F}_a$ (f) bruit blanc +	$\mathcal{F}_a'$(f) bruit en 1/f O	$\mathcal{F}_a$ (f) bruit Brownier X
.00000000E+00	.22443984E+02	.35834950E+02	.19360486E+03
.50000000E-01	.23013658E+02	.21707026E+02	.56155111E+02
.10000000E+00	.23128088E+02	.18245998E+02	.14322722E+02
.15000000E+00	.23427329E+02	.12501625E+02	.11185317E+02
.20000000E+00	.21607608E+02	.77929144E+01	.30760252E+01
.25000000E+00	.20560136E+02	.61122436E+01	.28012118E+01
.30000000E+00	.17215659E+02	.55523406E+01	.10926096E+01
.35000000E+00	.15123837E+02	.38596524E+01	.11270990E+01
.40000000E+00	.13705397E+02	.23211591E+01	.39250362E+00
.45000000E+00	.11637950E+02	.20347732E+01	.49659942E+00
.50000000E+00	.96052260E+01	.15361019E+01	.17373491E+00
.55000000E+00	.77646670E+01	.14149132E+01	.32307589E+00
.59999999E+00	.60249967E+01	.10227927E+01	.19327524E+00
.64999999E+00	.43458384E+01	.10899594E+01	.30705722E+00
.69999999E+00	.31393356E+01	.10168616E+01	.20404520E+00
.74999999E+00	.22775123E+01	.68367065E+00	.31386194E+00
.79999998E+00	.13960212E+01	.51459115E+00	.17794192E+00
.84999998E+00	.81978926E+00	.40435962E+00	.35033067E+00
.89999998E+00	.40158531E+00	.25736085E+00	.16877474E+00
.94999997E+00	.19512714E+00	.83540443E-01	.16054706E+00
.99999997E+00	.13465900E+00	.35771718E-01	.12414364E-02
.10500000E+01	.17465027E+00	.81920049E-01	.13093504E+00
.11000000E+01	.29573966E+00	.19614868E+00	.11118139E+00
.11500000E+01	.46944657E+00	.25097061E+00	.18022590E+00
.12000000E+01	.62983930E+00	.24004981E+00	.86104159E-01
.12500000E+01	.80917985E+00	.27863485E+00	.11273301E+00
.13000000E+01	.86838967E+00	.32365403E+00	.56152238E-01
.13499999E+01	.93661258E+00	.28042293E+00	.82829772E-01
.13999999E+01	.10141140E+01	.21355714E+00	.24833097E-01
.14499999E+01	.99974309E+00	.20089068E+00	.55943180E-01
.14999999E+01	.95067579E+00	.19327475E+00	.22757521E-01
.15499999E+01	.87200844E+00	.20368677E+00	.50198975E-01
.15999999E+01	.76136865E+00	.16445711E+00	.27234918E-01
.16499999E+01	.62713894E+00	.18273434E+00	.49728108E-01
.16999999E+01	.51407793E+00	.19626679E+00	.33914237E-01
.17499999E+01	.42581337E+00	.14650223E+00	.56904003E-01
.17999999E+01	.31894539E+00	.12917928E+00	.30649481E-01
.18499999E+01	.24226671E+00	.11278950E+00	.68817573E-01
.18999999E+01	.17901266E+00	.95718682E-01	.32387764E-01
.19499999E+01	.14326512E+00	.45906884E-01	.40170131E-01
.19999999E+01	.13012872E+00	.46184449E-01	.17273279E-02
.20499999E+01	.12571901E+00	.54740637E-01	.36902229E-01
.20999999E+01	.14569928E+00	.93157234E-01	.26730907E-01
.21499999E+01	.17365671E+00	.10303940E+00	.47064280E-01
.22000000E+01	.19894147E+00	.96307975E-01	.25066049E-01
.22500000E+01	.23294478E+00	.11062762E+00	.36313429E-01
.23000000E+01	.23872093E+00	.11994282E+00	.17909689E-01
.23500000E+01	.25471881E+00	.10412766E+00	.29582193E-01
.24000000E+01	.27261994E+00	.82951714E-01	.61849293E-02
.24500000E+01	.27073687E+00	.80252740E-01	.23375795E-01
.25000000E+01	.26994119E+00	.91021867E-01	.10884080E-01
.25500000E+01	.25956928E+00	.96072587E-01	.24374708E-01
.26000001E+01	.24023797E+00	.88916598E-01	.10955521E-01
.26500001E+01	.21825224E+00	.99822272E-01	.20999030E-01
.27000001E+01	.19855669E+00	.11233349E+00	.13205206E-01
.27500001E+01	.18433133E+00	.90989638E-01	.21895504E-01
.28000001E+01	.16441306E+00	.81554083E-01	.10584665E-01
.28500001E+01	.14949896E+00	.84367096E-01	.24729891E-01
.29000001E+01	.13646124E+00	.68435408E-01	.10753756E-01
.29500001E+01	.12655987E+00	.60837902E-01	.17523929E-01
.30000001E+01	.11306011E+00	.64270757E-01	.20155923E-02
.30500002E+01	.10537697E+00	.67610815E-01	.17735035E-01
.31000002E+01	.10364659E+00	.87399557E-01	.10611008E-01

ω	S(ω)
.00000000E+00	.22888741E+10
.24523167E-05	.21123404E+10
.49046334E-05	.35668328E+07
.73569502E-05	.31209730E+09
.98092669E-05	.48933114E+06
.12261584E-04	.56859865E+08
.14713900E-04	.41549500E+08
.17166217E-04	.41600860E+08
.19618534E-04	.17425580E+08
.22070850E-04	.26432492E+08
.24523167E-04	.27408355E+07
.26975484E-04	.21817563E+08
.29427801E-04	.11542545E+08
.31880117E-04	.19719340E+08
.34332434E-04	.41184894E+07
.36784751E-04	.79489550E+07
.39237068E-04	.42690269E+07
.41689384E-04	.11264287E+08
.44141701E-04	.71601070E+07
.46594017E-04	.14424086E+08
.49046334E-04	.42658330E+07
.51498651E-04	.57720901E+07
.53950968E-04	.28122104E+07
.56403284E-04	.71122998E+07
.58855601E-04	.17272040E+07
.61307918E-04	.46794729E+07
.63760234E-04	.21766803E+07
.66212551E-04	.73277559E+07
.68664868E-04	.42367979E+07
.71117184E-04	.39533063E+07
.73569501E-04	.27153021E+07
.76021818E-04	.27404448E+07

L = 9

ω	S(ω)
.00000000E+00	.51058557E+08
.16480101E-04	.31583701E+08
.32960203E-04	.80633830E+07
.49440304E-04	.35864587E+07
.65920405E-04	.35145527E+07
.82400507E-04	.17816439E+07
.98880609E-04	.10762496E+07
.11536071E-03	.10919854E+07
.13184081E-03	.48175979E+06
.14832091E-03	.62002149E+06
.16480101E-03	.52728362E+06
.18128112E-03	.40423543E+06
.19776122E-03	.36520907E+06
.21424132E-03	.38305133E+06
.23072142E-03	.21536346E+06
.24720152E-03	.25854255E+06
.26368162E-03	.12296156E+06
.28016172E-03	.18456442E+06
.29664183E-03	.11551160E+06
.31312193E-03	.15084048E+06
.32960203E-03	.82848981E+05
.34608213E-03	.12499915E+06
.36256223E-03	.76892238E+05
.37904233E-03	.78532419E+05
.39552243E-03	.71520526E+05
.41200254E-03	.76776624E+05
.42848264E-03	.50221717E+05
.44496274E-03	.52063322E+05
.46144284E-03	.45524860E+05
.47792294E-03	.72491769E+05
.49440304E-03	.35358493E+05
.51088315E-03	.52325815E+05

L = 4

ω	S(ω)
.00000000E+00	.38770358E+07
.29923229E-04	.28946479E+07
.59846458E-04	.15760018E+07
.89769687E-04	.83263902E+06
.11969292E-03	.53626410E+06
.14961615E-03	.41817935E+06
.17953937E-03	.16603594E+06
.20946261E-03	.22395476E+06
.23938583E-03	.11437972E+06
.26930906E-03	.13965939E+06
.29923229E-03	.10399526E+06
.32915552E-03	.92847699E+05
.35907875E-03	.55507344E+05
.38900198E-03	.52638640E+05
.41892521E-03	.19076646E+05
.44884844E-03	.49394192E+05
.47877167E-03	.37548839E+05
.50869489E-03	.50345127E+05
.53861813E-03	.24903205E+05
.56854136E-03	.38443897E+05
.59846458E-03	.22283327E+05
.62838782E-03	.29458681E+05
.65831104E-03	.14763165E+05
.68823427E-03	.21388085E+05
.71815750E-03	.17439542E+05
.74808073E-03	.17162839E+05
.77800396E-03	.12660052E+05
.80792719E-03	.15947946E+05
.83785042E-03	.10374481E+05
.86777365E-03	.11649178E+05
.89769687E-03	.74172236E+04
.92762011E-03	.12426375E+05

L = 11

ω	S(ω)
.00000000E+00	.10031605E+06
.13597787E-04	.78461790E+05
.27195575E-04	.13805340E+06
.40793363E-04	.17225509E+06
.54391150E-04	.90652140E+05
.67988937E-04	.16186120E+06
.81586725E-04	.66506542E+05
.95184512E-04	.11401139E+06
.10878230E-03	.17157822E+05
.12238009E-03	.22969904E+06
.13597787E-03	.16227660E+06
.14957566E-03	.12352643E+06
.16317345E-03	.11030762E+06
.17677124E-03	.10410432E+06
.19036902E-03	.14743142E+06
.20396681E-03	.62267104E+05
.21756460E-03	.80035082E+05
.23116239E-03	.56862069E+05
.24476017E-03	.79713072E+05
.25835796E-03	.94433324E+05
.27195575E-03	.71776258E+05
.28555353E-03	.54114942E+05
.29915132E-03	.60604052E+05
.31274911E-03	.63881953E+05
.32634690E-03	.73242472E+05
.33994469E-03	.55669230E+05
.35354247E-03	.45089543E+05
.36714026E-03	.38209677E+05
.38073805E-03	.43203513E+05
.39433584E-03	.28630761E+05
.40793362E-03	.51123784E+05

$L = 15$ $T = T_0$.

ω	$S(\omega)$
.00000000E+00	.22670206E+08
.24783006E-05	.55071078E+07
.49566013E-05	.13320166E+07
.74349019E-05	.20728190E+07
.99132026E-05	.11154842E+07
.12391503E-04	.96848367E+06
.14869804E-04	.48133715E+06
.17348104E-04	.79609453E+06
.19826405E-04	.44639657E+06
.22304706E-04	.85184054E+06
.24783006E-04	.60736252E+06
.27261307E-04	.60668507E+06
.29739608E-04	.67676414E+06
.32217908E-04	.52499208E+06
.34696209E-04	.57294895E+06
.37174510E-04	.47528998E+06
.39652810E-04	.35281783E+06
.42131111E-04	.25736877E+06
.44609411E-04	.48423238E+06
.47087712E-04	.43477272E+06
.49566013E-04	.40276045E+06
.52044314E-04	.37800054E+06
.54522614E-04	.27445321E+06
.57000915E-04	.40216361E+06
.59479215E-04	.34800162E+06
.61957516E-04	.18439659E+06
.64435817E-04	.41631580E+06
.66914117E-04	.19779409E+06
.69392418E-04	.22783883E+06
.71870719E-04	.19350419E+06
.74349019E-04	.20737172E+06
.76827319E-04	.32348787E+06

$L = 33$ $T = T_0$.

ω	$S(\omega)$
.00000000E+00	.20919180E+09
.21867256E-05	.19331503E+09
.43734512E-05	.79698584E+08
.65601768E-05	.98243544E+08
.87469024E-05	.58844375E+08
.10933628E-04	.10032863E+09
.13120354E-04	.42275071E+08
.15307079E-04	.75773397E+08
.17493805E-04	.42617846E+08
.19680530E-04	.34321215E+08
.21867256E-04	.26808070E+08
.24053981E-04	.33587676E+08
.26240707E-04	.26016076E+08
.28427433E-04	.19884486E+08
.30614158E-04	.69215446E+07
.32800884E-04	.15578374E+08
.34987610E-04	.14827120E+08
.37174335E-04	.81865975E+07
.39361061E-04	.26414699E+07
.41547786E-04	.78738691E+07
.43734512E-04	.76290479E+07
.45921237E-04	.76233498E+07
.48107963E-04	.76977202E+07
.50294689E-04	.21178476E+07
.52481414E-04	.33998349E+07
.54668140E-04	.35747568E+07
.56854865E-04	.39774147E+07
.59041591E-04	.30544108E+07
.61228317E-04	.35109520E+07
.63415042E-04	.31653526E+07
.65601767E-04	.42798874E+07
.67788494E-04	.26644132E+07

$L = 45$ $T = T_0$.

ω	$S(\omega)$
.00000000E+00	.20018040E+07
.35630185E-05	.10212673E+07
.71260371E-05	.55775220E+06
.10689056E-04	.19621625E+06
.14252074E-04	.10119843E+06
.17815093E-04	.50054671E+05
.21378111E-04	.58552474E+05
.24941130E-04	.64908287E+05
.28504148E-04	.53237047E+05
.32067167E-04	.23779162E+04
.35630185E-04	.21597901E+05
.39193204E-04	.16860157E+05
.42756223E-04	.20863690E+05
.46319241E-04	.19257690E+05
.49882260E-04	.15297926E+05
.53445278E-04	.10426128E+05
.57008297E-04	.13947855E+05
.60571315E-04	.15304005E+05
.64134334E-04	.15624731E+05
.67697352E-04	.10220583E+05
.71260371E-04	.92407555E+04
.74823390E-04	.10018567E+05
.78386408E-04	.81163858E+04
.81949426E-04	.78934995E+04
.85512445E-04	.51296624E+04
.89075464E-04	.60878930E+04
.92638482E-04	.67626895E+04
.96201501E-04	.49174388E+04
.99764519E-04	.54910403E+04
.10332754E-03	.57687648E+04
.10689056E-03	.52883434E+04
.11045357E-03	.40605269E+04

$L = 24$ $T = 0.2$

ω	$S(\omega)$
.00000000E+00	.31620156E+10
.24523167E-05	.17746462E+10
.49046334E-05	.37726808E+09
.73569502E-05	.22795521E+09
.98092669E-05	.14745476E+08
.12261584E-04	.43379051E+08
.14713900E-04	.74836345E+08
.17166217E-04	.47047535E+08
.19618534E-04	.12288556E+08
.22070850E-04	.22559669E+08
.24523167E-04	.67207282E+07
.26975484E-04	.21668706E+08
.29427801E-04	.13586020E+08
.31880117E-04	.17094277E+08
.34332434E-04	.79574170E+06
.36784751E-04	.92099310E+07
.39237068E-04	.36462429E+07
.41689384E-04	.65909496E+07
.44141701E-04	.62328782E+07
.46594017E-04	.14676168E+08
.49046334E-04	.58710681E+07
.51498651E-04	.80091872E+07
.53950968E-04	.19295275E+07
.56403284E-04	.81081216E+07
.58855601E-04	.12361219E+07
.61307918E-04	.39400866E+07
.63760234E-04	.14159011E+07
.66212551E-04	.75426650E+07
.68664868E-04	.39085997E+07
.71117184E-04	.53701596E+07
.73569501E-04	.15632297E+07
.76021818E-04	.28954215E+07