



# TRANSITIONS DE PHASE EN DIMENSIONS FRACTALES

Pascal Monceau

► **To cite this version:**

Pascal Monceau. TRANSITIONS DE PHASE EN DIMENSIONS FRACTALES. Data Analysis, Statistics and Probability. Université Paris-Diderot - Paris VII, 2004. <tel-00521313>

**HAL Id: tel-00521313**

**<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00521313>**

Submitted on 27 Sep 2010

**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.

Habilitation à diriger des recherches  
Transitions de phase en dimensions fractales

Pascal MONCEAU

## Résumé

Parmi les méthodes de la théorie du groupe de renormalisation, les développements en  $\epsilon$  sont basés sur des calculs dans l'espace réciproque et permettent de calculer les exposants critiques associés aux transitions magnétiques du second ordre pour des valeurs non entières de la dimension d'espace. Une interprétation physique naturelle consiste à se demander comment se comporte un système de spins en interaction dans un espace de dimension fractale. Or les structures fractales sont construites par itération d'une cellule génératrice dont les détails sont donc présents à plusieurs échelles ; la question qui se pose alors est de savoir ce qui se passe lorsque l'invariance par translation est remplacée par une invariance d'échelle géométrique. La convergence vers la limite thermodynamique se produit en même temps que le processus d'itération construit la structure. De ce fait, des simulations Monte Carlo fiables de ces transitions de phase n'ont pu être menées à bien que récemment, puisqu'elles nécessitent la simulation de très grandes tailles, lesquelles varient comme des séries géométriques avec l'étape d'itération.

C'est en utilisant des algorithmes non locaux dits "d'amas" (Wolff, Swendsen-Wang), capables de réduire le ralentissement critique de manière significative, et des méthodes d'histogrammes pour traiter les données des simulations Monte-Carlo que j'ai tout d'abord réalisé ces études. Il s'avère que le calcul précis des exposants critiques est rendu encore plus difficile par le fait que l'analyse en tailles finies du modèle d'Ising souffre de corrections d'échelle qui peuvent affecter fortement le comportement de certaines grandeurs thermodynamiques, en particulier lorsque la dimension fractale tend vers 1. J'ai montré que ces corrections d'échelle sont en partie liées à la très forte inhomogénéité du réseau sous-jacent (due à l'existence de trous sur plusieurs ordres de grandeurs) et à la concomitance de la construction du fractal avec la convergence vers la limite thermodynamique. Les résultats que j'ai obtenus pour les exposants critiques, ou leurs bornes, sont toujours compatibles avec la relation d'hyperscaling dans laquelle on substitue la dimension de Hausdorff à la dimension d'espace. Le comportement critique en dimension non entière se décrit dans le cadre de l'universalité faible. Cela se manifeste par un désaccord net

entre les exposants que j'ai obtenus par les méthodes Monte Carlo et les développements en  $\epsilon$ . Les exposants critiques ne dépendent pas seulement de la dimension d'espace, des propriétés de symétrie du paramètre d'ordre et de la portée des interactions, mais aussi des propriétés géométriques de la structure fractale : Très récemment des calculs précis d'exposants critiques m'ont permis de montrer que des classes d'universalité différentes sont en général nécessaires pour décrire le comportement du modèle d'Ising sur des fractals de même dimension et de lacunarités différentes. Un tel résultat généralise le concept d'universalité faible proposé par Masuo Suzuki.

L'hypothèse d'homogénéité qui sous-tend les lois d'échelle permettant de décrire un comportement critique se dérive par renormalisation. La procédure de renormalisation dans l'espace direct est naturelle dans les fractals, puisqu'elle suit exactement le processus inverse de construction de la structure. Avec mon étudiant Pai-Yi Hsiao, nous avons mené à bien l'étude du modèle d'Ising par une méthode de renormalisation Monte-Carlo sur une structure fractale de dimension voisine de 1,89 ; il s'avère que l'exposant associé à l'une des directions propres peut être calculé avec une très bonne précision et est en accord avec les résultats de l'analyse en tailles finies. En revanche, la convergence est très lente dans l'autre direction, ce qui est lié aux corrections d'échelle mises en évidence lors de cette analyse.

La cinétique stochastique associée à la formation des amas construits par l'algorithme de Wolff sous-tend la compréhension du phénomène de ralentissement critique. J'ai montré que les distributions des tailles des amas de Wolff ont une propriété d'homogénéité qui fait intervenir l'un des exposants associé à une des directions propres du processus de renormalisation. Par ailleurs, les distributions des tensions de surface des amas vérifient une propriété analogue dans laquelle intervient un nouvel exposant critique. L'étude des fonctions d'autocorrélation m'a permis de calculer précisément les exposants dynamiques de Wolff lorsque la température critique est connue, et d'éclaircir l'évolution du ralentissement critique avec la dimension et la connectivité.

Dans le cas de systèmes invariants par translation, l'ordre de la transition ferromagnétique du modèle de Potts est lié au nombre d'états de spin ; le passage du premier au second ordre est attendu pour des dimensions non entières. Par ailleurs, la présence

de désordre peut, dans certaines conditions, induire une transition du second ordre à partir d'un système qui en présente une du premier. L'étude du comportement critique du modèle de Potts sur des fractals est donc particulièrement intéressante, puisque deux des paramètres qui le déterminent (dimensionnalité et désordre structurel) sont liés. Avec mon étudiant Pai-Yi Hsiao, nous avons montré que la transition associée au modèle de Potts à trois états sur une structure fractale de dimension voisine de 1,89 est du second ordre. Les difficultés attendues lorsqu'on augmente le nombre d'états de spins se font déjà nettement sentir : Les corrections d'échelle empêchent de calculer la température critique avec une très bonne précision. Nous n'avons donc pu donner que des bornes pour certains exposants ; nous avons cependant clairement mis en évidence la différence entre les classes d'universalité de Potts à 2 et 3 états.

L'étude de la percolation en dimension non entière est liée à la fois à celle du modèle de Potts et aux algorithmes d'amas. Elle est basée sur l'étude des moments de la distribution de taille des amas, ce qui nécessite la localisation de pics en fonction de la probabilité d'occupation. J'ai pu montrer que les corrections d'échelle n'affectent pratiquement pas le comportement des pics avec la taille des structures, et proposé de les interpréter en termes de "seuil effectif".



# Table des matières

<b>Notice et résumé des activités universitaires</b>	<b>6</b>
0.1 Curriculum vitae . . . . .	6
0.2 Activités d'Enseignement . . . . .	8
0.3 Responsabilités administratives . . . . .	10
0.4 Encadrement de stages de second cycle et thèses . . . . .	10
0.5 Jurys de thèses . . . . .	11
0.6 Comité de lecture . . . . .	11
0.7 Publications . . . . .	12
<b>1 Introduction</b>	<b>15</b>
<b>2 Propriétés topologiques des fractals de Sierpinski déterministes</b>	<b>19</b>
2.1 Degré de ramification . . . . .	22
2.2 Connectivité et nombre moyen de premiers voisins par site . . . . .	23
2.3 Lacunarité . . . . .	24
<b>3 Propriétés critiques du modèle d'Ising sur des fractals de Sierpinski déterministes</b>	<b>26</b>
3.1 Analyse en tailles finies . . . . .	27
3.2 Méthodes Monte-Carlo dans l'ensemble canonique . . . . .	30
3.3 Exposants de la longueur de corrélation et températures critiques . . . . .	32
3.4 Simulations aux points critiques, hyperscaling, corrections d'échelle et convergence vers la limite thermodynamique . . . . .	36

3.5	Comportement des pics de susceptibilité, développements en $\epsilon$ et universalité faible . . . . .	39
3.6	Renormalisation Monte-Carlo . . . . .	41
3.7	Commentaires : dimension critique inférieure et chaleur spécifique . . . . .	45
<b>4</b>	<b>Lois d'échelles des distributions des amas au point critique, ralentissement critique</b>	<b>47</b>
4.1	Distribution de la taille des amas générés par l'algorithme de Wolff au point critique . . . . .	48
4.2	Distribution de l'énergie de surface des amas générés par l'algorithme de Wolff au point critique . . . . .	51
4.3	Temps d'autocorrélation et exposants dynamiques . . . . .	53
<b>5</b>	<b>Modèle de Potts</b>	<b>58</b>
<b>6</b>	<b>Percolation</b>	<b>63</b>
<b>7</b>	<b>Désordre orientationnel dans les cristaux moléculaires</b>	<b>68</b>
	<b>Perspectives</b>	<b>71</b>
	<b>Remerciements</b>	<b>73</b>
	<b>Annexe 1 : Transformation de Fortuin-Kasteleyn et algorithme de Wolff</b>	<b>75</b>
	<b>Annexe 2 : Méthode des histogrammes</b>	<b>79</b>
	<b>Annexe 3 : Algorithme de Wang-Landau</b>	<b>82</b>
	<b>Annexe 4 : Algorithme de Newmann-Ziff</b>	<b>85</b>
	<b>Articles joints en annexe</b>	<b>94</b>

# Liste des tableaux

3.1	Valeurs des exposants critiques $\alpha, \beta, \gamma, \nu$ et des températures critiques (ou de leurs bornes) pour différents fractals de Sierpinski. . . . .	35
3.2	Valeurs des rapports d'exposants critiques $\beta/\nu$ et $\gamma/\nu$ pour différents fractals de Sierpinski. . . . .	37
4.1	Dimension fractale $d_{fw}$ des amas de Wolff, exposant de surface $S_w$ et exposants dynamiques $z_w^M$ et $z_w^E$ . . . . .	49

# Table des figures

2.1	Tapis de Sierpinski $SP_a(3^2, 8, 5)$ à la cinquième étape d'itération. $d_f \approx 1.8928$ .	20
2.2	Cellules génératrices de différents fractals de Sierpinski. . . . .	21
2.3	Tamis de Sierpinski à la troisième étape d'itération ( $d_f = \ln 3 / \ln 2 \approx 1.58496$ ). . . . .	22
2.4	Cellule génératrice d'un fractal de Sierpinski $SP_d(3^3, 9)$ de degré de ramification fini ( $d_f = 2$ ). . . . .	23
3.1	Ecart relatif $\rho_g(l^d, N_{oc}, k)$ du nombre moyen de premiers voisins par spin, par rapport à sa limite thermodynamique, en fonction de l'étape d'itération $k$ pour différents réseaux de Sierpinski. . . . .	31
3.2	Rapport des exposants $\gamma/\nu$ en fonction de la dimension fractale. . . . .	41
3.3	Version "expansée" $SP_a^1(3^2, 8, 1)$ du tapis de Sierpinski $SP_a(3^2, 8, 1)$ . . . . .	42
4.1	Distributions de probabilité $P_k(s)$ de la taille des amas de Wolff au point critique dans le cas $SP_a(5^2, 24, k)$ . . . . .	50
4.2	Invariance d'échelle des distributions $P_k(s)$ lors du passage d'une étape d'itération $k$ à la suivante. . . . .	51
4.3	Invariance d'échelle des distributions $\mathcal{P}_S( \Delta E )$ de la tension superficielle des amas lors du passage d'une étape d'itération $k$ à la suivante. . . . .	53
5.1	Ordre de la transition associée au modèle de Potts en fonction de la dimensionnalité d'espace $d$ et du nombre d'états de spins $q$ . . . . .	59
6.1	Invariance d'échelle des seconds moments de la distribution de taille des amas pour $SP_a(3^2, 8, k)$ . . . . .	66

6.2	Probabilité $\Pi_L(p)$ d'apparition d'un amas de percolation en fonction de la probabilité d'occupation $p$ , pour $SP_a(3^2, 8)$ et $SP_a(4^2, 12)$ . . . . .	67
7.1	Identification des amas par l'algorithme de Hoshen-Kopelman et ajout de sites selon l'algorithme de Newman-Ziff. . . . .	87

# Notice et résumé des activités universitaires

## 0.1 Curriculum vitae

MONCEAU Pascal

Né le 9 Septembre 1956 à Lyon

Maître de conférences, 9<sup>ème</sup> échelon de la classe normale, à l'Université d'Evry, Boulevard F. Mitterrand, 91025 EVRY Cedex.

Laboratoire de recherche : Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée, Pôle Matière et Systèmes Complexes, FR2438 CNRS, 2 place Jussieu, 75251 PARIS Cedex 05. email : pmo@ccr.jussieu.fr

## CURSUS DE FORMATION

### Formation initiale

- 1975-77 : Classes de mathématiques supérieures et spéciales. Lycée du Parc, Lyon.
  - Juin 77 : Admission aux ENSI (INPG de Grenoble) et à l'IPES sciences de Lyon.
- 1977-79 : Licence et maîtrise ès sciences physiques de l'Université Lyon I.
- 1979-80 : Service national comme éducateur du contingent.
- 1980-81 : Préparation au CAPES à l'Université Lyon I.
  - Juillet 81 : Admission au CAPES de sciences physiques.

## Formation continue

- De 1986 à 1990, parallèlement à un service d'enseignement secondaire à temps complet.
- 1986-88 : Attestation d'Études Supérieures Approfondies de physique théorique de l'Université Paris 7.
- 1988-90 : DEA de physique des solides de l'Université Paris 7.
- Juillet 90 : Admission à l'agrégation externe de physique.

## Formation doctorale et post-doctorale

- Thèse de physique des solides, préparée au Laboratoire de Magnétisme des Surfaces de l'Université Paris 7 sous la direction de J.C.S. Lévy, soutenue le 16 Décembre 1994 devant le Jury composé de : E. Courtens, M. Fayard, H.J. Herrmann, J.C.S. Lévy, R. Maynard, J. Vannimenus (Mention très honorable).

**Sujet :** "*Propriétés élastiques et vibrationnelles de réseaux lacunaires*".

- Ecole d'été d'analyse numérique (CEA, INRIA, EDF.), "*Modélisation et simulation en physico-chimie. Applications aux matériaux et aux polymères*", Ablis ( 26 Juin-7 Juil. 1995).
- Cours et TP de troisième cycle : "*Analyse en ondelettes et traitement du signal et de l'image*" assurés par J. P. Antoine et P. Vanderghenst, Paris, (17-30 Jan 2000).

## DEROULEMENT DE CARRIERE

1982 : Titularisation comme professeur certifié.

1991 : Nomination sur un poste de professeur agrégé à l'Université d'Évry.

1997 : Nomination sur un poste de maître de conférences à l'Université d'Évry

## 0.2 Activités d'Enseignement

### Enseignement secondaire

De 1981 à 1991, comme professeur à temps plein, certifié puis agrégé : Toutes classes, de la sixième à la terminale C.

### Enseignement universitaire

Le tableau ci dessous donne une vue synthétique des enseignements que j'ai assurés à l'Université d'Evry depuis mon détachement sur un poste de professeur agrégé en 1991. On y retrouve un historique de l'ouverture de plusieurs filières dans lesquelles la physique tient une place importante. Présent dès l'ouverture de ces filières, j'ai participé à la création "ex nihilo" de nombreux enseignements ; ces derniers figurent en caractères italiques sur le tableau. Attendu que mon travail de recherche fait appel aux méthodes numériques, j'ai activement participé à la réflexion concernant l'utilisation de l'outil informatique dans l'enseignement des sciences et la formation à ces méthodes. Cette réflexion a par ailleurs débouché sur une communication orale que j'ai présentée à un congrès de l'INRP en 1998. Ainsi, la mise en place des travaux d'expérimentation numérique en licence et maîtrise de physique axés autour de l'utilisation du langage C constitue le projet le plus novateur dans lequel je me sois impliqué. Plus récemment, j'ai introduit l'utilisation du logiciel de calcul formel Maple dans de nouvelles séances de ces travaux d'expérimentation numérique. J'ai développé les efforts entrepris dans cette direction en assurant un cours de mécanique en première année s'appuyant fortement sur l'utilisation de l'outil informatique à des fins pédagogiques. Plus de la moitié de mon enseignement est actuellement consacrée à la formation des professeurs de physique de l'enseignement secondaire. Outre les cours dispensés en vue de l'écrit du concours du CAPES, les séances de travaux pratiques et de préparation à l'épreuve orale de montage et traitement automatisé de l'information y ont une place importante. Les responsabilités administratives que j'assume depuis quelques années en rapport avec la formation des maîtres sont en adéquation avec mon implication dans la préparation au CAPES et mon expérience du système éducatif français, du collège unique à la formation doctorale.

Filière	Matière enseignée	années
DEUG Sdm1	TD d'optique, <i>mécanique</i> , thermodynamique, <i>électricité</i>	1991-1994
	<i>Travaux pratiques</i>	1991-1994
	<i>Cours de mécanique (Support de l'outil informatique)</i>	1996-2000
DEUG Sdm2	<i>Cours et TD de "vibrations et ondes"</i>	1991-1996
	<i>TD de mécanique du solide</i>	1991-1993
	TD d'électromagnétisme	1994-1995
	<i>Travaux pratiques</i>	1991-1997
LICENCE de physique	<i>Cours et TD d' électromagnétisme et thermodynamique des milieux continus</i>	1995-2000
	<i>Travaux d'expérimentation numérique : "Oscillateurs anharmoniques", "Propagation de paquets d'ondes",</i>	1995-2002
	<i>"Simulation Monte-Carlo dans l'ensemble canonique",</i>	1995-2002
	<i>"Perturbations à l'oscillateur harmonique quantique"</i>	1995-2001 2002-2004
LICENCE de sciences physiques	<i>Projets de mécanique avec soutenance</i>	2002-2003
MAITRISE de physique	Cours et TD de "transitions de phase"	2001-2004
	<i>Travaux d'expérimentation numérique : "Modèle d'Ising"</i>	1996-2001
	<i>Travaux d'expérimentation numérique : "Modélisation mécanique de transitions de phase"</i>	2002-2004
IUP génie des matériaux	<i>Tutorat de 4 étudiants en troisième année</i>	1996-2000
	<i>Travaux pratiques</i>	1993-1995
Préparation au CAPES de sciences physiques	<i>Cours et TD de mécanique</i>	1992-2001
	Cours et TD d'optique physique	2001-2004
	Cours et TD d'électronique	2002-2004
	<i>Travaux pratiques</i>	1992-2004
	<i>Préparation à l'épreuve de montage</i>	1992-2004
<i>Préparation à l'épreuve orale pédagogique "sur dossier"</i>	1992-2003	

### 0.3 Responsabilités administratives

- Responsable des enseignements de travaux pratiques du DEUG "Sciences et Structures de la Matière" et de la gestion du budget de fonctionnement (1992-1997).
- Responsable des enseignements de physique en préparation au CAPES, et de la gestion du budget de fonctionnement (depuis Sept. 1998).
- Membre du conseil scientifique et pédagogique de L'UFR de l'académie de Versailles (Sept. 1999-Jan. 2001), au titre de représentant de l'Université d'Evry.
- Membre de la commission de spécialistes (28<sup>ème</sup> section) de l'Université d'Evry depuis Février 2001.
- Directeur du département de Physique et Modélisation de l'Université d'Evry du 1<sup>er</sup> Septembre 2000 au 1<sup>er</sup> Septembre 2001.
- Chargé de mission auprès du président de l'Université d'Evry pour les questions concernant la formation des maîtres et les relations avec l'UFR de l'académie de Versailles depuis Septembre 2002.
- Directeur adjoint du département de Physique et Modélisation de l'Université d'Evry du 1<sup>er</sup> Juin 2003 au 16 Septembre 2004.

### 0.4 Encadrement de stages de second cycle et thèses

#### Direction de stages de maîtrise de physique

Juin-Sept. 1996, F. Hébert, Université Paris VII, "*Transitions de phase du second ordre en dimensions fractales*".

Jan.-Fév. 1997, N. Raffalli, Université d'Evry-Val d'Essonne, "*Etude du squelette élastique de l'amas de percolation*".

Jan.-Fév. 1998, R. Quilleau, Université d'Evry-Val d'Essonne, "*Etude de paramètres d'ordre orientationnel et translationnel dans un cristal plastique : Le thiophène*".

Jan.-Fév. 1999, L. Sagui, Université d'Evry-Val d'Essonne, "*Percolation en dimension non entière*".

Juin.-Juil. 2000, A. Duarte, Université d'Evry-Val d'Essonne, "*Percolation en dimen-*

*sion non entière*".

Jan.-Fév. 2002, T. Szydlo, Université d'Evry-Val d'Essonne, "*Comparaison des sections efficaces de diffusion de particules par différents potentiels ; écrantage*".

Juin.-Juil. 2003, F. X. Josse-Michaux, Magistère de physique, "*Quantification de Berezin de l'oscillateur harmonique en dimension finie*". (avec J. P. Gazeau).

### **Co-direction de thèse**

Juin 1999 - Nov. 2002, Pai-Yi Hsiao (Thèse de physique théorique de l'Université Paris VII Denis Diderot) "*I. comportement critique des modèles de spin classiques sur des fractals ; II. Magnétisme orbital d'un gaz d'électrons bidimensionnel confiné par un potentiel harmonique*". (Avec J. P. Gazeau). Après une année de position post doctorale à l'Université d'Urbana Champaign, Illinois dans le groupe de E. Luijten, Pai-Yi Hsiao est actuellement maître de conférences à l'Université de TsingHua (HsinChu) à Taïwan.

## **0.5 Jurys de thèses**

- "*I. comportement critique des modèles de spin classiques sur des fractals ; II. Magnétisme orbital d'un gaz d'électrons bidimensionnel confiné par un potentiel harmonique*", soutenue par Pai-Yi Hsiao le 13 Novembre 2002 à l'Université Paris VII.
- "*Théorie du transport électronique dans les systèmes désordonnés*", soutenue par Djilali Bourbie le 1<sup>er</sup> Mars 2003 à l'Université d'Oran ès Senia.

## **0.6 Comité de lecture**

Activités de "referee" à Physical Review depuis cette année.

## 0.7 Publications

### Reuves internationales à comité de lecture

1. D. Berger, S. Chamaly, M. Perreau, D. Mercier, P. Monceau and J.C.S. Lévy, J. Phys. I (France) **1**, 1433, (Oct. 1991). *Optical diffraction of fractal figures :random Sierpinski carpets.*
2. P. Monceau, J.C.S. Lévy and M. Perreau, Phys. Lett. A **171**, 167, (Dec.1992). *Statistics of local environments in fractals.*
3. P. Monceau, J.C.S. Lévy, H. Isambert and D. Berger, J. Phys. I (France) **3**, 1891, (Sept. 1993). *Optical diffraction of stretched lacunary spring networks.*
4. P. Monceau and J.C.S. Lévy, Phys. Rev B **49**, 1026, (Jan.1994). *Monodimensional effects on elastic and vibrational properties of lacunary networks.*
5. P. Monceau, B. Barret, D. Berger and J.C.S. Lévy., J. Phys. I (France) **5**, 963, (Aug. 1995). *Optical diffraction of stretched lacunary networks with central forces and bond bending couplings.*
6. P. Monceau, M. Perreau and F. Hébert, Phys. Rev. B **58**, 6386, (Sept. 1998). *Magnetic critical behavior of the Ising model on fractal structures.*
7. P. Y Hsiao, P. Monceau, and M. Perreau, Phys. Rev. B **62**, 13856, (Dec. 2000). *Magnetic critical behavior of fractals in dimensions between 2 and 3.*
8. P. Monceau and M. Perreau, Phys. Rev. B **63**, 184420, (Apr. 2001). *Critical behavior of the Ising model on fractals structures in dimensions between 1 and 2 : Finite-size scaling effects.*
9. J. M. P. Antoine, J. P. Gazeau, J. Klauder, P. Monceau, and K. Penson, J. Math. Phys. **42** N°6 (June 2001). *Temporally stable coherent states for infinite well and Pöschl-Teller potentials.*
10. P. Y. Hsiao and P. Monceau, Phys. Rev. B **65**, 184427, (May 2002). *Critical behavior of the three-state Potts model on the Sierpinski carpet.*
11. P. Monceau and P. Y. Hsiao, Phys. Lett. A **300**, 685, (Aug. 2002). *Anomalous dimension exponents on fractal structures for the Ising and three-state Potts model.*

12. P. Monceau and P. Y. Hsiao, Phys. Rev. B **66**, 104422, (Sep. 2002). *Cluster Monte-Carlo distributions in fractal dimension between two and three : Scaling properties and dynamical aspects for the Ising model.*
13. P. Monceau, T. Szydlo and G. Valent, Eur. J. Phys. **24**, 47, (Dec. 2002). *Screened Coulomb scattering versus Thomson scattering.*
14. P. Y. Hsiao and P. Monceau, Phys. Rev. B, **67**, 064411 ( 2003). *Critical behavior of the ferromagnetic Ising model on a Sierpinski carpet : Monte-Carlo renormalization group study.*
15. P. Monceau and P. Y. Hsiao, E. P. J. B **32**, 81 (Mar. 2003). *Cluster Monte-Carlo dynamics for the Ising model on fractal structures in dimensions between one and two.*
16. P. Y. Hsiao and P. Monceau, Phys. Rev. B **67**, 172403, (May 2003). *Scaling law of Wolff cluster surface energy.*
17. P. Monceau and P. Y. Hsiao, Physica A, **331**, 1, (Jan. 2004). *Direct evidence for weak universality on fractal structures.*
18. P. Monceau and P. Y. Hsiao. *Percolation transition in fractal dimensions.* Phys. Lett. A **332**, 310, (Nov. 2004).

### Article de revue

P. Monceau and P. Y. Hsiao, *Magnetic phase transitions in fractal dimensions*, Recent Research Developments in Physics, **5**, 903-934, (2004) Transworld Research Network, Kerala.

## Actes de colloques et proceedings

1. P. Monceau et J. C. S. Lévy, actes des journées d'automne de la Société Française de Métallurgie et de Matériaux, Revue de Métallurgie, **9**, 1183, (Sep.1993). *Simulation numérique des propriétés élastiques de matériaux lacunaires.*
2. D. André, N. Billy, D. Borgis, M. Chamarro, M. Condat, D. Delande, M.P. Gaigeot, O. Hardouin-Duparc, L. Hilico, S. Ménard, P. Monceau, P. Nedellec, et V. Voliotis. Huitièmes Journées nationales, "Informatique et Pédagogie des Sciences Physiques"(I.N.R.P.), Montpellier (Mar. 1998). Editions de l'I.N.R.P. *Un nouveau concept en licence-maîtrise de physique : Les travaux d'expérimentation numérique.*
3. J.P. Gazeau and P. Monceau, Conférence Moshe Flato, 131, (Dijon, Sept. 99). Ed. Dito. Sternheimer, Kluwer, (2000). *Generalized coherent states for arbitrary quantum systems.*
4. J.P. Gazeau and P. Monceau, Proceedings of the sixth international Wigner symposium, 111, (Istanbul, Aug. 99). Ed. Bogazici University Press, Istanbul, (2002). *Generalized coherent states as wave packets.*

## Ouvrages universitaires

N. Billy, J. Desbois, M. A. Duval, M. Elias, P. Monceau, M. Toulmonde, A. Plaszczynski, Belin, (2004). *CAPES de Sciences Physiques.*

# Chapitre 1

## Introduction

L'étude des transitions de phase du second ordre en dimensions fractales s'insère dans le champ plus vaste des phénomènes critiques dans les milieux désordonnés. Le désordre doit être compris ici comme un écart à la symétrie de translation, et peut être obtenu d'un très grand nombre de manières : Introduction de défauts, dilution, distribution des couplages selon certaines lois de probabilité, quasipériodicité... Une des questions importantes est de savoir si le comportement critique au voisinage d'un point de transition est modifié par l'introduction de tel ou tel type de désordre. Le premier élément de réponse à cette question a été apporté par Harris [49] dans le cas où on introduit des défauts dans un système invariant par translation : La pertinence du désordre est déterminée par le signe de l'exposant de chaleur spécifique. Le critère de Harris n'est d'aucun secours dans le cas des fractals, puisque le type de désordre mis en jeu y est radicalement différent : Les "défauts" que constituent les lacunes sont présentes sur plusieurs ordres de grandeurs comme on peut le voir sur la figure 2.1. La pertinence d'un désordre de type fractal sur le comportement critique des modèles de spin à symétrie discrète a été étudiée en premier par Gefen, Mandelbrot, Aharony et leurs collaborateurs [41, 42, 43, 44, 45, 46] dans le cas de fractals de Sierpinski déterministes par des méthodes de renormalisation dans l'espace direct. Ils ont souligné l'effet de plusieurs caractéristiques topologiques de la structure fractale sur le comportement critique de tels modèles. La question la plus importante qui ressort de ces résultats est de savoir comment l'invariance d'échelle du réseau sous-jacent affecte une transition du second ordre. En d'autres termes,

et pour reprendre une expression due à Eugene Stanley [93] : Qu'en est-il des "trois piliers des phénomènes critiques", à savoir les lois d'échelle, l'universalité et la renormalisation dans le cas des fractals ? Lorsque j'ai décidé de travailler sur ce problème en 1996 avec Michel Perreau à la suite des tentatives qu'il avait faites pour calculer analytiquement de manière exacte la fonction de partition du modèle d'Ising sur un fractal, les résultats disponibles étaient relativement dispersés et parfois contradictoires. Il y a deux raisons à cela :

a) De nombreuses structures fractales différentes ont été étudiées, ce qui conduit à des résultats dont le domaine de validité ne peut pas être facilement extrapolé ; c'est inhérent au sujet.

b) Les études ont été réalisées à l'aide des méthodes habituellement utilisées pour l'étude des phénomènes critiques ; la plupart d'entre elles comportent des approximations qui n'ont pas le même domaine de validité :

Renormalisation dans l'espace réel selon la procédure de Migdal-Kadanoff [46].

Renormalisation par blocs [22].

Développements en- $\epsilon$  [59].

Développements haute température [1, 23].

Méthode de matrice de transfert [82].

Simulations Monte-Carlo (algorithme de Métropolis) [9, 14, 15, 21].

Les progrès des méthodes de simulation Monte-Carlo des phénomènes critiques, en particulier la découverte des algorithmes de cluster [98, 108] et des méthodes d'histogrammes [31, 32] laissaient entrevoir la possibilité d'aller beaucoup plus loin dans l'étude du problème posé au début de cette introduction. Le peu d'espoir de voir aboutir une méthode purement analytique m'a poussé à les utiliser très largement. Il n'a pas été possible à ce jour de définir un champ permettant de décrire correctement le désordre fractal structurel, c'est à dire prenant en compte l'ensemble des propriétés géométriques qui jouent un rôle dans le comportement critique des fractals. En fait, une théorie générale semble actuellement encore hors de portée. Ce mémoire relate de façon synthétique l'ensemble des résultats que j'ai obtenus sur des fractals de Sierpinski déterministes et les éléments de réponse que j'ai pu apporter aux questions qui restaient encore en suspens

lorsqu'ont débuté mes travaux de recherche dans ce domaine [73].

Le chapitre 2 est consacré à la description des fractals que j'ai étudiés et de leurs propriétés topologiques du point de vue des phénomènes critiques.

Le chapitre 3 est consacré au comportement critique du modèle d'Ising sur des fractals de Sierpinski déterministes ; la partie centrale de mon travail de recherche y est exposée (Références [73, 52, 74, 75, 55, 78]). Les points les plus importants qui y sont discutés sont les suivants :

- Convergence vers la limite thermodynamique, hypothèse d'homogénéité, difficultés avec l'analyse en taille finies et corrections d'échelle.

- Calcul précis des exposants critiques du modèle d'Ising pour des fractals de dimensions et propriétés géométriques différentes ; rôle de certains paramètres géométriques.

- Rôle de la dimension fractale dans la relation d'hyper-scaling.

- Comparaison avec les développements en  $\epsilon$ .

- Universalité faible.

- Renormalisation Monte-Carlo.

Le chapitre 4 traite de l'étude du ralentissement critique en dimension non entière, en particulier des propriétés des amas générés par l'algorithme de Wolff (Références [76, 77, 54]). Les deux points essentiels sont :

- Lois d'échelles associées aux distributions de la taille et de la tension de surface des amas aux points critiques. Relations avec l'ordre à longue portée.

- Calcul des fonctions d'autocorrélation et exposants dynamiques.

Le chapitre 5 est consacré au modèle de Potts à  $q$  états en dimension fractale. Une partie de cette étude est actuellement en cours ; les points fondamentaux sont les suivants :

- Intérêt de l'étude de la dépendance de l'ordre de la transition avec  $q$  et avec la dimension fractale.

- Résultats obtenus pour le modèle de Potts à 3 états dans le cas d'un fractal de Sierpinski (Référence [53]).

- Mise en oeuvre d'un algorithme permettant de calculer directement la densité d'états.

Le chapitre 6 est consacré à la transition de percolation en dimension non entière ; les résultats de ce travail sont actuellement soumis à publication. Les points qui ressortent sont :

- Mise en oeuvre d'un algorithme permettant d'identifier les amas de manière dynamique.
- Analyse des moments de la distribution de taille des amas ; lois d'échelle.
- Interprétation des corrections d'échelle lors de l'analyse en tailles finies en terme de "seuil effectif".

Le chapitre 7 relate le travail de recherche que j'ai effectué sur un tout autre sujet : L'étude du désordre orientationnel dans les cristaux plastiques par simulation Monte-Carlo. J'y explique pourquoi je n'ai rien publié sur ce sujet, et dans quelle mesure les difficultés que j'ai rencontrées permettent de tirer des enseignements sur la manière dont il faudrait aborder ce sujet aujourd'hui.

Ce mémoire se termine par une esquisse des perspectives ouvertes par ce travail, suivi de 4 annexes dans lesquelles sont détaillés les algorithmes que j'ai utilisés.

## Chapitre 2

# Propriétés topologiques des fractals de Sierpinski déterministes

D'une manière générale, les fractals peuvent être définis comme des objets qui possèdent des propriétés d'autosimilarité ; l'opération d'invariance géométrique qui leur est associée est le changement d'échelle. Les propriétés topologiques de tels objets ont été étudiées dès le dix-neuvième siècle par des mathématiciens comme Cantor, Koch, Peano, Dedekind,... Ce n'est qu'autour de 1960 que les travaux de Benoit Mandelbrot ont permis au concept de fractal de s'imposer dans de nombreux domaines de la science. Les tapis de Sierpinski [92] et leur généralisation par Menger constituent un modèle générique de fractals qui a été très largement utilisé pour étudier des phénomènes physiques en dimension non entière ; leur construction est facile et la façon de le faire permet d'explorer un très large domaine de propriétés topologiques. Puisque, jusqu'à maintenant, et à ma connaissance, les transitions de phase magnétiques n'ont été étudiées que sur des fractals pour lesquels les propriétés d'autosimilarité sont déterministes, je ne décrirai que ces derniers. Alors que les réseaux de Bravais sont construits par des translations discrètes d'une cellule élémentaire, les tapis de Sierpinski déterministes généralisés sont construits à partir d'une cellule appelée cellule génératrice, par un processus itératif qui met en jeu des dilatations.

La cellule génératrice, notée  $SP_g(l^d, N_{oc}, 1)$ , est initialement définie dans un espace Euclidien de dimension entière  $d$  à partir d'un hypercube de côté  $l$  qu'on divise en  $l^d$

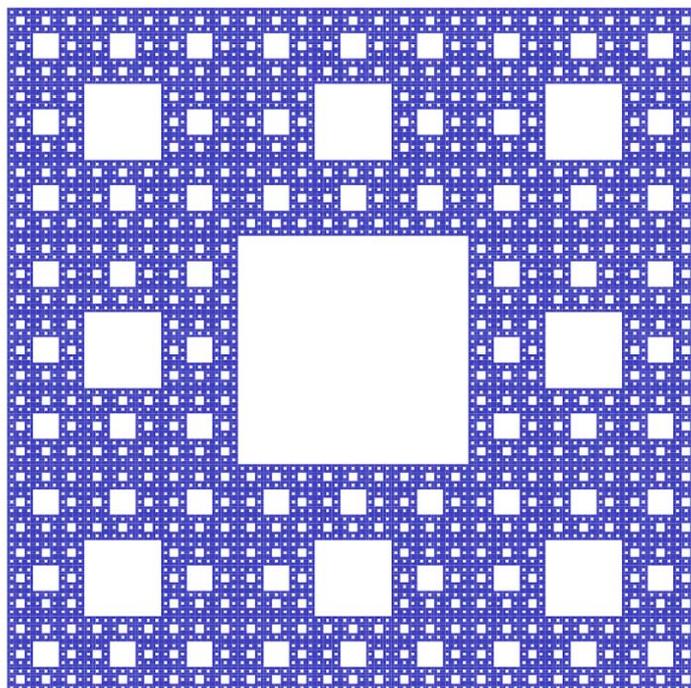


FIG. 2.1 – Tapis de Sierpinski  $SP_a(3^2, 8, 5)$  à la cinquième étape d'itération.  $d_f \approx 1.8928$ .

sous-hypercubes parmi lesquels  $N_{oc}$  sont occupés. L'indice  $g$  se réfère à la distribution des sous-hypercubes occupés dans la cellule génératrice ; conventionnellement,  $g$  sera égal à  $a$  pour des cellules évidées uniquement au centre, à une autre lettre ( $b$  ou  $c$ ) dans d'autres cas : Quelques familles de cellules génératrices caractérisant les fractals que j'ai étudiés sont représentées sur la figure 2.2. Le fractal est alors construit de la façon suivante : La cellule génératrice est agrandie par une opération de dilatation d'un facteur  $l$  et chaque sous-hypercube occupé est remplacé par la cellule génératrice. Ce processus peut être répété autant de fois que l'on veut, et le réseau obtenu après un nombre  $k$  fini d'étapes d'itération est noté  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$ . Sa taille est  $L = l^k$  et le nombre de sous-hypercubes (de côté  $l$ ) occupés est  $N = (N_{oc})^k$ . La figure 2.1 montre un exemple de construction d'un réseau  $SP_a(3^2, 8, 5)$  ; Un "vrai" fractal au sens mathématique du terme n'est obtenu que dans la limite où le nombre d'itérations est infini, et on le note  $SP_g(l^d, N_{oc})$ . Du point de vue de la physique statistique, faire tendre  $k$  vers l'infini équivaut à prendre la limite thermodynamique. La principale caractéristique d'un objet fractal est déterminée

par un nombre que l'on appelle sa dimension de Hausdorff; la définition rigoureuse de la dimension de Hausdorff repose sur la théorie de la mesure de Lebesgue. Dans le cas d'un tapis de Sierpinski généralisé  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$ , le nombre de sous-hypercubes occupés croît avec sa taille  $L$  selon une loi de puissance  $N = L^{d_f}$ , si bien que la dimension de Hausdorff s'identifie à l'exposant associé, c'est à dire  $d_f = \ln(N_{oc})/\ln(l)$ . La dimension de Hausdorff n'est cependant pas la seule mesure pertinente des fractals, car des géométries et des connectivités très différentes peuvent correspondre à une valeur donnée de  $d_f$ . Les trois paragraphes suivants ont pour but la description de paramètres géométriques supplémentaires impliqués dans les transitions de phase sur des fractals.

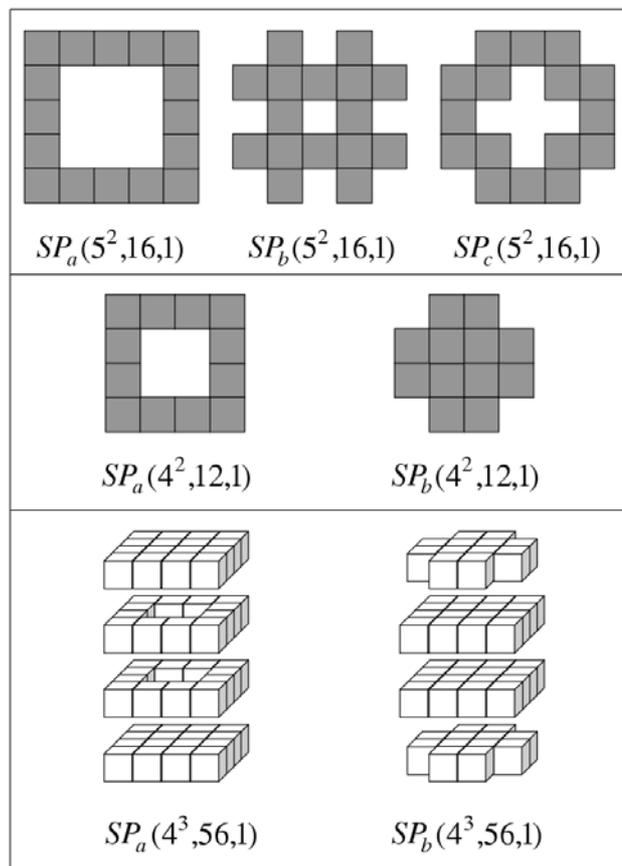


FIG. 2.2 – Cellules génératrices de différents fractals de Sierpinski.

## 2.1 Degré de ramification

Le degré de ramification  $R$  en un point donné d'un fractal a été défini par B. Mandelbrot [66] comme étant égal au nombre de liens qu'il faut couper pour isoler un ensemble arbitrairement grand de sites connectés à ce point. Il est facile de vérifier que le degré de ramification des tapis de Sierpinski dont les cellules génératrices sont décrites sur la figure 2.2 est infini, alors qu'il est fini pour le "tamis" de Sierpinski montré sur la figure 2.3.

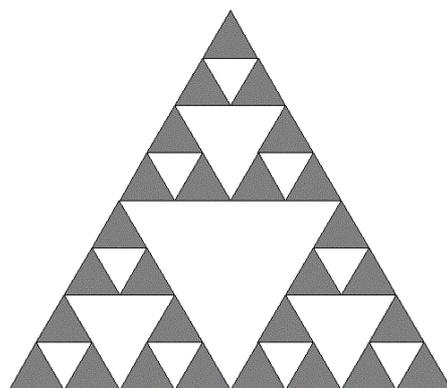


FIG. 2.3 – Tamis de Sierpinski à la troisième étape d'itération ( $d_f = \ln 3 / \ln 2 \approx 1.58496$ ).

La question de savoir si le degré de ramification est fini ou non joue un rôle central dans les transitions de phase, puisqu'il est lié au comportement de la fonction de corrélation à deux points. On peut s'en convaincre facilement en observant le fractal  $SP_d(3^3, 9)$  dont la cellule génératrice est représentée sur la figure 2.4 : Sa dimension fractale est 2 et son degré de ramification est fini ; de même un réseau carré bidimensionnel peut être considéré comme un fractal  $SP_g(l^2, l^2)$  et a un degré de ramification infini. Un des résultats les plus remarquables concernant les modèles de spins à symétrie discrète sur des fractals a été obtenu par Gefen et al. [46] : Une transition de phase du second ordre à température non nulle ne peut se produire que sur un fractal de degré de ramification infini.

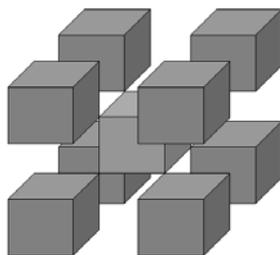


FIG. 2.4 – Cellule génératrice d'un fractal de Sierpinski  $SP_d(3^3, 9)$  de degré de ramification fini ( $d_f = 2$ ).

## 2.2 Connectivité et nombre moyen de premiers voisins par site

Puisque le nombre de premiers voisins d'un site fluctue spatialement dans les réseaux où l'invariance par translation est brisée, la notion de nombre de coordination perd son sens. On peut cependant définir un ensemble d'états de connectivité locaux à partir du nombre de premiers voisins et de la distribution de ces derniers dans les directions de l'espace. Les valeurs moyennes des densités de chacun de ces états peuvent être calculées analytiquement dans le cas des fractals par une méthode de matrice de transfert [86]. J'ai consacré une partie de mon travail de thèse à l'étude de ces moyennes et de leurs fluctuations dans le cas de tapis de Sierpinski aléatoires [71]; dans ce dernier cas, à la différence des tapis de Sierpinski déterministes, la distribution des sous-hypercubes occupés dans chacune des nouvelles cellules lorsqu'on passe d'une étape d'itération  $k$  à la suivante est tirée aléatoirement. Le point le plus important, commun aux fractals aléatoires et déterministes, est la dépendance de ces densités moyennes avec l'étape d'itération des réseaux de Sierpinski et leur convergence lorsque  $k$  tend vers l'infini. Bien qu'on s'attende encore moins à ce que les méthodes de champ moyen donnent des résultats quantitatifs pour les transitions de phase dans le cas des fractals que dans celui des réseaux invariants par translation, il n'est pas inutile de se rappeler qu'elles conduisent à des valeurs de la température critique proportionnelles au nombre de coordination. Ainsi, le nombre moyen de premiers voisins par site qu'on notera  $z_g(l^d, N_{oc}, k)$  reste une grandeur intéres-

sante puisqu'il donne une mesure de la topologie locale moyenne des structures et de leur convergence vers la limite thermodynamique. On peut montrer [51] que :

$$z_g(l^d, N_{oc}, k) = \frac{N_I}{N_{oc} - N_S} \left[ 1 - \left( \frac{N_S}{N_{oc}} \right)^k \right] + d \left( \frac{N_S}{N_{oc}} \right)^k \quad (2.2.1)$$

$N_S$  est le nombre de sites occupés sur chaque hypersurface de la cellule génératrice et  $N_I$  le nombre de liens internes à celle-ci. On notera  $z_g(l^d, N_{oc})$  le nombre moyen de premiers voisins lorsque  $k$  tend vers l'infini. La figure 3.1 montre la variation relative  $\rho_g(l^d, N_{oc}, k)$ , définie comme  $(z_g(l^d, N_{oc}, k)/z_g(l^d, N_{oc}) - 1)$ , en fonction de  $k$  pour différents fractals de Sierpinski cités dans ce mémoire. On retiendra que, pour une famille de structures données, la convergence est d'autant plus lente que la dimension fractale est faible.

Le caractère particulier du désordre dans les réseaux fractals par rapport, par exemple à un désordre totalement aléatoire, a conduit B. Mandelbrot à définir la connectivité d'un point de vue dépassant l'aspect purement local : la connectivité  $\mathcal{Q}$  est alors définie comme la plus petite valeur de la dimension fractale de l'hypersurface qui délimite des ensembles bornés [66].

## 2.3 Lacunarité

La notion de lacunarité est sous-tendue par le besoin de donner une mesure de l'écart à l'invariance par translation. Bien que plusieurs définitions en aient été proposées, elles sont toutes basées sur l'idée de la méthode dite "des boîtes". La première définition [66] a été donnée dans le cadre de Tapis de Sierpinski construits à partir d'une cellule génératrice plane de symétrie carrée dont le trou est au centre :  $a$  étant le côté de ce carré central évidé, on effectue toutes les translations discrètes possibles permettant de placer un carré test de même côté dans la cellule génératrice (l'unité de longueur étant le côté du sous-carré de la cellule génératrice). Pour chacune des  $p(a)$  positions possibles, on compte le nombre  $n_i(a)$  de sous-carrés occupés dans le carré test, et la lacunarité  $\Lambda_0$  est donnée par l'écart quadratique moyen :

$$\Lambda_0 = \frac{1}{p(a)} \sum_{i=1}^{p(a)} (n_i(a) - \bar{n}(a))^2 \quad (2.3.1)$$

Cette définition présente l'inconvénient de prendre en compte les translations discrètes de "boîtes" d'une taille unique. Par ailleurs, Lin et Yang [64] ont remarqué qu'une telle définition ne satisfait pas la condition suivante : La lacunarité doit être nulle si et seulement si la structure est invariante par translation. Wu et Hu [110] ont généralisé de la manière suivante la notion de lacunarité pour satisfaire cette condition : Etant donné un fractal  $SP_g(l^d, N_{oc})$ , on appelle  $a$  le côté d'un hypercube  $\mathcal{H}(a)$ , où  $a < l$ , et  $p(a) = (l - a + 1)^d$  le nombre de translations discrètes qui permettent de placer  $\mathcal{H}(a)$  dans la cellule génératrice ; pour une position donnée de  $\mathcal{H}(a)$ , indiquée par  $i$ , on compte le nombre  $n_i(a)$  de sous hypercubes élémentaires contenus dans  $\mathcal{H}(a)$ . L'hypervolume de  $\mathcal{H}(a)$  pondéré par la densité de la cellule élémentaire est :

$$\bar{m}(a) = a^d \left( \frac{N_{oc}}{l^d} \right) \quad (2.3.2)$$

On calcule l'écart quadratique moyen par rapport à  $\bar{m}(a)$ , puis on moyenne sur toutes les tailles  $a$  possibles, ce qui permet de définir la lacunarité par :

$$\Lambda_g(l^d, N_{oc}) = \frac{1}{(l-1)} \sum_{a=1}^{l-1} \sqrt{\frac{1}{p(a)} \sum_{i=1}^{p(a)} \left( 1 - \frac{n_i(a)}{\bar{m}(a)} \right)^2} \quad (2.3.3)$$

C'est à cette définition que je me référerai par la suite. Il est intéressant de noter que Taguchi [102] propose d'aller encore plus loin en prenant en compte les étapes d'itérations supérieures à 1 de la cellule génératrice dans les fluctuations de  $n_i(a)$ . Il obtient ainsi une lacunarité dépendante de l'étape d'itération, mais qui converge à la limite thermodynamique, comme le font les densités des états de connectivité et le nombre moyen de premiers voisins. Une ultime amélioration a été apportée par Allain et Cloitre [4] puis Aarao Reis et Riera [2] qui ont étudié les lois d'échelles satisfaites par  $n_i(a)$ .

## Chapitre 3

# Propriétés critiques du modèle d'Ising sur des fractals de Sierpinski déterministes

Les premiers articles rapportant les résultats de simulations Monte-Carlo du modèle d'Ising sur des fractals de degré de ramification infini (et de dimensions fractales comprises entre 1 et 2) ont été publiés par Bhanot et ses collaborateurs [14, 15]; ils y attirent l'attention sur les difficultés rencontrées par les simulations utilisant l'algorithme de Métropolis, en particulier le ralentissement critique. Plus tard, Angles d'Auriac et Rammal [9] ont étudié le comportement critique statique et dynamique du modèle d'Ising pour deux dimensions fractales différentes, et noté une interpolation monotone des exposants critiques entre ceux des dimensions entières. En 1987, Bonnier et ses collaborateurs [21] ont étudié sept dimensions fractales différentes et suggéré que c'est le nombre moyen de premiers voisins par spin qui joue un rôle dans les relations entre exposants, et non la dimension de Hausdorff. Tous ces auteurs n'avaient pu simuler que des réseaux de Sierpinski de petite taille (jusqu'à la troisième ou plus rarement la quatrième étape d'itération), ce qui limite la fiabilité de l'analyse en tailles finies, et leurs résultats ne permettent pas de tirer des conclusions nettes.

Pour le modèle d'Ising, on notera le Hamiltonien du système de la manière suivante :

$$\mathcal{H}_{\text{Ising}} = -J_{\text{Ising}} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (3.0.1)$$

Les états de spin  $\sigma_i$  et  $\sigma_j$  sont égaux à  $\pm 1$ , et ils sont placés aux centres des carrés ou des cubes occupés des réseaux de Sierpinski; la sommation concerne toutes les paires  $\langle i, j \rangle$  de sites occupés premiers voisins et la constante d'échange  $J_{\text{Ising}}$  est positive.

### 3.1 Analyse en tailles finies

A la limite thermodynamique, les singularités du paramètre d'ordre  $m$ , de la chaleur spécifique par spin  $c$ , de la susceptibilité du paramètre d'ordre  $\chi$  et de la longueur de corrélation  $\xi$  au point critique d'une transition de phase du second ordre sont décrites respectivement par les exposants  $\beta$ ,  $\alpha$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$ . Désignant par  $t = \frac{T-T_c}{T_c}$  l'écart relatif de la température  $T$  par rapport à sa valeur  $T_c$  au point critique, on peut les écrire :

$$m \sim (-t)^\beta \text{ avec } t < 0 \quad (3.1.1)$$

$$c \sim |t|^{-\alpha} \quad (3.1.2)$$

$$\chi \sim |t|^{-\gamma} \quad (3.1.3)$$

$$\xi \sim |t|^{-\nu} \quad (3.1.4)$$

Le champ extérieur  $h$  est nul,  $t$  est supposé "petit" et le signe  $\sim$  s'entend au sens d'un comportement asymptotique lorsque  $t \rightarrow 0$ . L'analyse en tailles finies repose sur l'hypothèse d'homogénéité de Widom : La partie singulière de l'énergie libre par spin lors d'un changement de l'unité de longueur d'un facteur  $b$  se comporte de la façon suivante :

$$f(t, h) = b^{-d} f(tb^{y_t}, hb^{y_h}) \quad (3.1.5)$$

où  $d$  est la dimension d'espace, et où  $t$  et  $h$  sont supposés "petits". Cette relation, initialement prise comme hypothèse est correcte lorsque le réseau est invariant par translation et peut se déduire de la renormalisation du Hamiltonien.  $y_t$  et  $y_h$  sont les exposants associés aux deux directions propres des flots de renormalisation. Lors du changement d'échelle décrit ci-dessus, la longueur de corrélation se comporte comme :

$$\xi(t, h) = b\xi(tb^{y_t}, hb^{y_h}) \quad (3.1.6)$$

Des simulations Monte-Carlo ont permis de s'assurer que l'hypothèse d'homogénéité reste correcte dans le cas de réseaux quasi-périodiques pour lesquels l'invariance par translation est brisée [12, 60, 61]. Il est nécessaire que les deux conditions suivantes soient remplies pour qu'on puisse l'appliquer à des fractals :

i) Le choix de  $b$  doit être restreint à une puissance entière de la taille de la cellule génératrice du réseau afin que la structure de ce dernier reste invariante lors du changement d'échelle. Cela est imposé par la symétrie d'échelle discrète qui doit être satisfaite lors d'une procédure de renormalisation dans l'espace direct [18].

ii) La dimension  $d$  dans l'équation (3.1.5) doit être remplacée par la dimension de Hausdorff  $d_f$ , attendu que le facteur  $b^{-d_f}$  décrit la manière dont le nombre de spins décroît lors du changement d'échelle. Cette dernière contrainte n'est pas respectée lorsque les spins sont placés aux coins ("vertices") des réseaux de Sierpinski.

Une difficulté supplémentaire provient de la notion de longueur de corrélation : Puisque l'invariance par translation est brisée dans les fractals, la fonction de corrélation à deux points dépend de la position des spins. Une fonction de corrélation d'une variable scalaire  $r$  et indépendante de la position peut être définie en prenant une moyenne des fonctions de corrélation à deux points sur toutes les paires de spins séparées par une distance euclidienne  $r$ . D'autres définitions peuvent en être données puisqu'il existe d'autres manières de définir la notion de distance dans les fractals. Le point important est qu'il est nécessaire qu'une longueur caractéristique  $\xi(T)$  puisse permettre de décrire le comportement d'une fonction de corrélation moyenne au voisinage du point critique. Dans ces conditions, une telle fonction de corrélation se comporterait comme  $\exp(-r/\xi(T))/r^{d_f-2+\eta}$ , où  $\eta$  désigne la dimension anormale, comme c'est le cas pour des réseaux invariants par translation.

Ces hypothèses permettent alors de montrer que les exposants critiques  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , et  $\nu$  sont reliés aux exposants  $y_t$  et  $y_h$  et à la dimension fractale  $d_f$  :

$$\alpha = 2 - d_f/y_t, \beta = (d_f - y_h)/y_t, \gamma = (2y_h - d_f)/y_t, \nu = 1/y_t \quad (3.1.7)$$

On en tire alors les deux relations classiques entre les exposants décrivant les singularités au point critique (relations de Rushbrooke et "hyperscaling") :

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2 \quad (3.1.8)$$

$$\frac{\gamma}{\nu} + 2\frac{\beta}{\nu} = d_f \quad (3.1.9)$$

Lorsque la taille  $L$  du réseau est finie, ce qui est nécessairement le cas pour des simulations Monte-Carlo, un argument supplémentaire doit être pris en compte pour décrire le comportement de la partie singulière de l'énergie libre par spin lors d'un changement d'échelle d'un facteur  $b$  :

$$f(t, h, L) = b^{-d_f} f(tb^{y_t}, hb^{y_h}, L/b) \quad (3.1.10)$$

La loi d'échelle pour des réseaux finis peut être déduite de cette relation dans laquelle on fixe  $b$  à sa valeur limite  $L$ , à condition que la longueur de corrélation soit grande devant  $L$ . Il est légitime d'espérer qu'une telle condition soit vérifiée dans la région critique où  $t \ll 1$ , puisque la longueur de corrélation diverge au point critique. Le comportement en tailles finies de la partie singulière de l'énergie libre par spin s'écrit donc :

$$f(t, h, L) = L^{-d_f} \mathcal{F}(tL^{y_t}, hL^{y_h}) \quad (3.1.11)$$

On en déduit facilement les relations décrivant les comportements en taille finies de la chaleur spécifique  $c_L(T)$ , du paramètre d'ordre  $m_L(T)$ , et de la susceptibilité du paramètre d'ordre  $\chi_L(T)$  :

$$c_L(T) \sim L^{\alpha/\nu} T \mathcal{C}(tL^{1/\nu}) \quad (3.1.12)$$

$$m_L(T) \sim L^{-\beta/\nu} \mathcal{M}(tL^{1/\nu}) \quad (3.1.13)$$

$$\chi_L(T) \sim L^{\gamma/\nu} \mathcal{X}(tL^{1/\nu}) \quad (3.1.14)$$

$\mathcal{C}$ ,  $\mathcal{M}$ ,  $\mathcal{X}$  sont les fonctions d'échelle associées.

L'examen des propriétés topologiques des fractals de Sierpinski déterministes décrites au chapitre 2 montre que la convergence vers la limite thermodynamique se produit en même temps que la structure est construite par un procédé itératif. Cette convergence se reflète dans le comportement du nombre moyen de premiers voisins par spin  $z_g(l^d, N_{oc}, k)$  avec  $k$  dont la variation relative est représentée sur la figure 3.1. Lors de simulations Monte-Carlo de phénomènes critiques sur des fractals, il est nécessaire que l'étape d'itération soit assez élevée pour que l'on soit dans la région asymptotique;  $z_g(l^d, N_{oc}, k)$  doit donc être le plus près possible de sa limite lorsque  $k$  tend vers l'infini.

Par ailleurs, les tailles des réseaux impliqués dans une analyse en tailles finies doivent satisfaire la symétrie d'échelle discrète mentionnée ci-dessus (i); les tailles des réseaux augmentent donc exponentiellement avec la taille puisque une telle condition impose que  $L = l^k$ . De plus, lors de simulations dans l'ensemble canonique, les configurations successives générées dans la région critique sont corrélées [17], ce qui a pour effet d'augmenter les incertitudes statistiques. Ce phénomène, lié à la divergence de  $\xi(T)$ , est connu sous le nom de ralentissement critique. Puisque ces corrélations augmentent avec la taille des réseaux, le nombre de pas Monte-Carlo nécessaires pour obtenir des moyennes thermodynamiques avec une précision donnée peut devenir gigantesque. On conçoit donc que le ralentissement critique ait constitué pendant longtemps un très gros obstacle à la simulation de phénomènes critiques sur des fractals.

## 3.2 Méthodes Monte-Carlo dans l'ensemble canonique

A la fin des années quatre-vingt, la relation entre le modèle de Potts à  $q$  états et la percolation de liens découverte et formalisée par Fortuin et Kasteleyn [37], a conduit

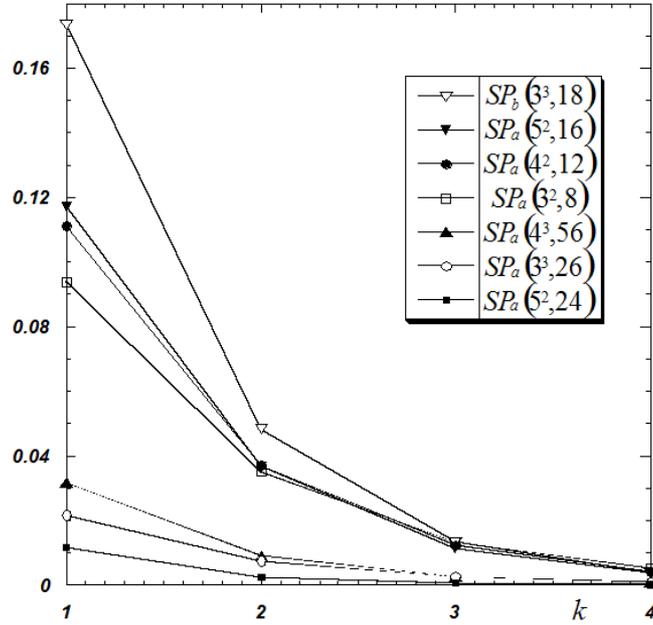


FIG. 3.1 – Ecart relatif  $\rho_g(l^d, N_{oc}, k)$  du nombre moyen de premiers voisins par spin, par rapport à sa limite thermodynamique, en fonction de l'étape d'itération  $k$  pour différents réseaux de Sierpinski.

Swendsen et Wang [98], puis Wolff [108] à développer des algorithmes capables de réduire considérablement le ralentissement critique. Ces algorithmes permettent des simulations dans l'ensemble canonique et sont applicables à des modèles sur réseaux pour des interactions entre premiers voisins. Leur point fort est qu'ils sont non locaux : Au lieu de renverser des spins au hasard comme on le fait avec l'algorithme de Métropolis, on construit un (ou plusieurs) amas de spin à chaque pas Monte-Carlo. L'algorithme de Wolff que j'ai très largement utilisé lors de mes simulations est décrit dans l'annexe 1.

Au même moment qu'ont été mis au point les algorithmes de Wolff et Swendsen-Wang, s'est développée la méthode des histogrammes [31, 32]. On en trouvera une description dans l'annexe 2. Elle permet de calculer les moyennes thermodynamiques non seulement

à la température  $T_0$  à laquelle a été faite la simulation, mais aussi sur une plage de température d'une "certaine largeur"  $\Delta T$  autour de  $T_0$ . L'idée est qu'au cours d'une simulation Monte-Carlo dans l'ensemble canonique, les états générés sont ceux dont le poids dans la fonction de partition est important non seulement à la température de simulation mais dans un intervalle encadrant cette température. On exploite donc l'information contenue au voisinage du pic de la distribution en construisant un histogramme à la température de la simulation et on calcule les grandeurs thermodynamiques à une température différente en pondérant de nouveau par le facteur de Boltzmann. La largeur  $\Delta T$  de la région où cette méthode est fiable est reliée à la largeur des histogrammes et diminue donc lorsque la taille du système augmente. Il importe de s'assurer soigneusement de cette fiabilité en recouvrant les régions où l'on calcule les grandeurs thermodynamiques. Malgré cette limitation, la méthode des histogrammes s'est avérée très efficace pour le calcul de pics dans les grandeurs thermodynamiques, jusqu'à des réseaux comportant plus de 10 millions de spins.

### 3.3 Exposants de la longueur de corrélation et températures critiques

De même qu'ils adoucissent les singularités des grandeurs thermodynamiques, les effets de taille finie déplacent par rapport à la température critique les positions des pics correspondant aux grandeurs divergentes : Ces pics se produisent lorsque la fonction d'échelle associée est maximale, c'est-à-dire pour une valeur fixée de son argument  $tL^{1/\nu}$ . Ainsi, la température à laquelle se trouve le pic associé à une grandeur divergente qu'on note  $\kappa$  (c'est par exemple  $\chi$ ) dépend de la taille selon la relation :

$$T_c^\kappa(L) = T_c + g_\kappa L^{-1/\nu} \quad (3.3.1)$$

où  $g_\kappa$  désigne une constante associée à la grandeur  $\kappa$ . Les relations du type (3.3.1) permettent donc de déduire la température critique  $T_c$  de l'évolution de la position des pics  $T_c^\kappa(L)$  avec  $L$ , à condition de connaître l'exposant de la longueur de corrélation  $\nu$ . Ce dernier est accessible via la largeur des pics, puisqu'elle diminue avec la taille selon une

loi de puissance en  $L^{-1/\nu}$ . On peut calculer  $\nu$  avec une meilleure précision que ne le permet l'étude de la largeur des pics en analysant l'évolution avec la taille des dérivées logarithmiques de l'aimantation,  $\Phi_L^n(T)$ , définies par :

$$\Phi_L^n(T) = \frac{\partial \ln(M^n)}{\partial (k_B T)} = \langle E \rangle_T \langle M^n \rangle_T - \langle EM^n \rangle_T \quad (3.3.2)$$

où  $M$  et  $E$  désignent respectivement l'aimantation et l'énergie totales d'une configuration donnée, et où le symbole  $\langle \rangle_T$  s'entend au sens d'une moyenne thermodynamique canonique ;  $k_B$  désigne la constante de Boltzmann. L'hypothèse d'homogénéité permet de montrer que le comportement en taille finie de  $\Phi_L^n(T)$  s'écrit :

$$\Phi_L^n(T) \sim L^{1/\nu} T^2 \mathcal{L}_n(tL^{1/\nu}) \quad (3.3.3)$$

où  $\mathcal{L}_n$  désigne la fonction d'échelle associée. Les maxima des dérivées logarithmiques  $\Phi_L^n$  se comportent donc comme  $\Phi_n^{\max}(L) \sim L^{1/\nu}$ .

On peut par ailleurs calculer la température critique sans connaître la valeur de  $\nu$  grâce au cumulants de l'aimantation, défini par :

$$U_L(T) = 1 - \langle M^4 \rangle_T / (3\langle M^2 \rangle_T)^2 \quad (3.3.4)$$

Binder a montré que ce cumulants présente un point fixe [17] à  $T = T_c$ , c'est-à-dire que  $U_L(T_c) = U^*$ , où  $U^*$  est une valeur indépendante de la taille du système.

C'est à l'occasion du stage de maîtrise de Frédéric Hébert, en 1996, que nous avons mis au point les codes de calculs mettant en oeuvre l'algorithme de Wolff pour des dimensions fractales comprises entre 1 et 2, puis la méthode des histogrammes. Après quelques mois de tests, j'étais en mesure de lancer une campagne de calculs. Il a fallu près d'un an avant que les résultats de celle-ci, menée en collaboration avec Michel Perreau, aient pu être exploités. Une des principales raisons, évoquée au chapitre 2, est que les tailles simulées sont en progression géométrique. Ainsi, dans le cas du fractal  $SP_a(3^2, 8)$ , nous avons été conduits à simuler jusqu'à la septième étape d'itération [73] (où  $L = 2\,187$ , et  $N = 2\,097\,152$  spins). C'est quelques mois après la parution de ces résultats que José Carmona et ses collaborateurs [27] ont publié leurs travaux sur les fractals  $SP_a(3^2, 8)$  et

$SP_a(4^2, 12)$ . A la suite de ces travaux, et dans le but d'étudier plus en détail l'influence de la dimension fractale sur la convergence vers la limite thermodynamique, [74], nous avons réalisé des simulations sur les fractals  $SP_a(5^2, 24)$ , et  $SP_a(5^2, 12)$ , puis  $SP_a(4^2, 12)$  et ajouté la huitième étape d'itération à  $SP_a(3^2, 8)$  (avec  $L = 6\,561$ , et  $N = 16\,777\,216$  spins). Il s'avère que le comportement des maxima  $\Phi_n^{\max}(L)$  des dérivées logarithmiques avec la taille présente des écarts par rapport aux lois de puissance, sauf pour  $SP_a(5^2, 24)$  où  $d_f \approx 1.9746$ . Ces écarts sont interprétés comme des corrections d'échelle par les deux groupes, mais traités de manière différente par chacun d'eux. Contrairement à José Carmona et ses collaborateurs, nous n'avons pas cherché à les intégrer directement dans les "fits" de nos résultats. La raison essentielle de notre choix découle du caractère très particulier de ces corrections dans le cas des fractals : La comparaison entre  $SP_a(5^2, 24)$  et  $SP_a(5^2, 12)$ , où les tailles simulées (ici jusqu'à la cinquième étape d'itération) sont les mêmes, montre que ces corrections ont un caractère topologique lié (entre autres) à la dimension fractale. Attendu qu'un "fit" à quatre paramètres est nécessaire dans l'hypothèse où ces corrections sont représentées par un terme supplémentaire de la forme  $L^{-\omega}$ , trop peu de points sont disponibles pour affirmer qu'une telle forme est correcte dans le cas des fractals. Comme les corrections d'échelle sont d'autant plus importantes que la dimension fractale est faible, nous ne pouvons donner que des bornes inférieures à  $\nu$  pour les plus petites valeurs de  $d_f$ . Il en va autrement pour les dimensions fractales comprises entre 2 et 3 que nous avons étudiées dans le cadre de la thèse de Pai-Yi Hsiao, où elles sont beaucoup plus faibles [52]. Nous reviendrons plus longuement sur leur signification physique dans le paragraphe 3 – 4 à la lumière de l'ensemble des résultats disponibles. Les valeurs des températures critiques calculées à partir des relations (3.3.1), où  $\kappa$  est  $\Phi^1$ ,  $c$  ou  $\chi$ , sont cohérentes lorsque  $d_f \approx 1.9746$  et  $d_f > 2$ . Dans les autres cas, les bornes inférieures de  $\nu$  conduisent à des bornes supérieures des températures critiques.

Le comportement des cumulants de Binder est lui aussi affecté par des corrections d'échelle qui augmentent lorsque la dimension fractale diminue de 2 à 1 : Ils ne se croisent pas exactement au même point lorsque la taille varie, mais les températures des points d'intersection entre une étape d'itération et la suivante convergent (plus vite qu'une série géométrique) lorsque  $k$  augmente. Cette convergence est plus rapide lorsque  $d_f > 2$ , et

les valeurs des températures critiques données par les deux méthodes sont cohérentes avec une précision relative meilleure que  $10^{-4}$ . La table 3.1 récapitule les valeurs de  $\nu$  et  $T_c$  tirées des références [27, 52, 74], ainsi que celles des systèmes bi et tridimensionnels invariants par translation (valeurs de  $T_c$  pour les réseaux carré et cubique).

TAB. 3.1 – Valeurs des exposants critiques  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\nu$  et des températures critiques (ou de leurs bornes) pour différents fractals de Sierpinski. La dernière colonne indique le côté de la taille maximale prise en compte dans l'analyse en tailles finies.

Fractal	$d_f$	Ref.	$T_c$	$\nu$	$\beta$	$\gamma$	$\alpha$	Taille max.
$SP_a(5^2, 16)$	1.7227	[74]	<0.808	>4.06		>6.81		3125
$SP_a(4^2, 12)$	1.7925	[74]	<1.049	>3.37		>5.73		4096
$SP_a(4^2, 12)$	1.7925	[27]	1.077(4)	3.23(8)	0.223(30)	5.39(20)	-3.83(26)	4096
$SP_a(3^2, 8)$	1.8928	[74]	1.4795(5)	>1.565	>0.11	>2.70	<-0.92	6561
$SP_a(3^2, 8)$	1.8928	[27]	1.481	1.70(1)	0.1360(25)	2.94(2)	-1.212(25)	2187
$SP_a(5^2, 24)$	1.9746	[74]	2.0660(15)	1.083(3)	0.120(4)	1.90(1)	-0.140(18)	3125
	2	[18]	2.269185	1	0.125	1.75	0	
$SP_b(3^3, 18)$	2.631	[52]	2.35090(9)	0.844(11)	0.272(15)	1.683(35)	-0.227(65)	243
$SP_a(4^3, 56)$	2.904	[52]	3.99893(10)	0.704(16)	0.347(11)	1.348(40)	-0.042(62)	256
$SP_a(3^3, 26)$	2.966	[52]	4.21701(6)	0.664(19)	0.336(18)	1.291(50)	0.037(86)	243
	3	[33]	4.511424(53)	0.6289(8)	0.3258(44)	1.2470(39)	0.101(92)	96

On notera que les valeurs de  $\nu$  et  $T_c$  annoncées par le groupe José Carmona sont cohérentes avec les bornes que nous avons trouvées pour  $SP_a(3^2, 8)$ ; la sous-estimation de  $\nu$  et la surestimation de  $T_c$  par rapport à nos bornes restent inférieures à quelques pourcent dans le cas de  $SP_a(4^2, 12)$ . D'un point de vue semi-qualitatif, l'exposant de la longueur de corrélation augmente lorsque la dimension fractale décroît; cela se conçoit aisément puisque la région critique devient de plus en plus étroite à mesure que  $d_f$  tend vers 1, dimension à laquelle la transition de phase disparaît (ou devient infiniment étroite à  $T =$

0). Par ailleurs, la température critique décroît avec  $d_f$ , et suit ainsi la variation du nombre moyen de premiers voisins à la limite thermodynamique  $z_g(l^d, N_{oc})$ . Cette généralisation de l'argument de champ moyen rappelé au paragraphe 2–2 reste qualitativement correcte pour décrire l'évolution de  $T_c$  dans le cas de fractals.

### 3.4 Simulations aux points critiques, hyperscaling, corrections d'échelle et convergence vers la limite thermodynamique

Lorsque la température critique est connue avec une précision suffisante, l'évolution avec  $L$  du paramètre d'ordre  $m_L(T_c)$  et de sa susceptibilité  $\chi_L(T_c)$  au point critique permettent de calculer les valeurs de  $\beta/\nu$  et de  $\gamma/\nu$ . Cela est possible quand  $d_f > 2$ , pour  $SP_b(3^3, 18)$ ,  $SP_a(4^3, 56)$ ,  $SP_a(3^3, 26)$ , et quand  $d_f < 2$ , pour  $SP_a(5^2, 24)$  et  $SP_a(3^2, 8)$ ; dans la pratique, les deux premières étapes d'itération ne sont jamais prises en compte, et les quatre premières sont mises de côté dans le cas de  $SP_a(3^2, 8)$  où les corrections d'échelle sont plus fortes. Les simulations aux points critiques permettent par la même occasion de vérifier la cohérence de l'analyse en tailles finies en s'assurant que le comportement des dérivées logarithmiques  $\Phi_L^n(T_c)$  donne des valeurs de  $\nu$  compatibles avec celles que l'on déduit du comportement de leurs maxima  $\Phi_n^{\max}(L)$ . La table 3.2 récapitule les valeurs de  $\beta/\nu$  et de  $\gamma/\nu$  que nous avons calculées ainsi que celles du groupe de José Carmona. Le point important qui ressort de ces résultats est que les valeurs de  $\gamma/\nu$  et  $\beta/\nu$  sont compatibles avec la relation d'hyperscaling  $\gamma/\nu + 2\beta/\nu = d_f$  où la dimension d'espace est bien la dimension de Hausdorff.

Lorsque la température critique n'est pas connue avec une précision suffisante, il s'avère qu'on peut malgré tout calculer  $\gamma/\nu$  de manière fiable à partir du comportement du pic de susceptibilité  $\chi^{\max}(L)$ . On peut ensuite théoriquement calculer  $\beta/\nu$  à partir du comportement de  $m_L$  aux températures de ces pics  $T_c^x(L)$ , puisque l'argument des fonctions d'échelle y reste constant. Toutefois, le comportement de  $m_L(T_c^x(L))$  avec  $L$  est affecté de corrections d'échelle importantes lorsque  $d_f < 2$ , si bien qu'on ne peut

alors donner que des bornes supérieures à  $\beta/\nu$ . Il ressort des onze structures fractales que nous avons étudiées que les bornes de  $\beta/\nu$ , ou leurs valeurs, sont toujours compatibles avec la relation d'hyperscaling où la dimension d'espace est la dimension de Hausdorff. La substitution de  $d$  par  $d_f$  dans l'hypothèse d'homogénéité Eq.(3.1.5) est subordonnée à la condition que la décroissance du nombre de spins lors d'un changement de l'échelle de longueur  $b$  soit décrite par le facteur  $b^{-d_f}$ ; la présence de la dimension de Hausdorff dans la relation d'hyperscaling en est une conséquence. La situation où les spins sont situés aux vertex en lieu et place des centres des carrés des fractals de Sierpinski ne satisfait pas cette hypothèse.

TAB. 3.2 – Valeurs des rapports d'exposants critiques  $\beta/\nu$  et  $\gamma/\nu$  pour différents fractals de Sierpinski. La lacunarité est indiquée dans la quatrième colonne.

Fractal	$d_f$	Ref.	$\Lambda_s(l^d, N_{oc})$	$\gamma/\nu$	$\beta/\nu$	$d_f - \gamma/\nu$
$SP_a(5^2, 16)$	1.7227	[78]	0.5167	1.677(8)	< 0.042	0.0457(80)
$SP_b(5^2, 16)$	1.7227	[78]	0.3265	1.688(9)	< 0.033	0.0347(90)
$SP_c(5^2, 16)$	1.7227	[78]	0.3183	1.721(8)	< 0.024	0.0017(80)
$SP_a(4^2, 12)$	1.7925	[74]	0.4124	1.708(7)	< 0.048	0.0845(70)
$SP_a(4^2, 12)$	1.7925	[27]	0.3370	1.67(2)	0.069(10)	0.1225(200)
$SP_b(4^2, 12)$	1.7925	[78]	0.3370	1.727(7)	< 0.039	0.0655(70)
$SP_a(3^2, 8)$	1.8928	[74]	0.2549	1.732(4)	0.075(10)	0.1608(40)
$SP_a(3^2, 8)$	1.8928	[27]	0.2549	1.730(1)	0.080(1)	0.1628(10)
$SP_a(5^2, 24)$	1.9746	[74]	0.1042	1.750(5)	0.1108(4)	0.2246(50)
	2	[18]	0	1.75	0.125	0.25
$SP_b(3^3, 18)$	2.6309	[52]	0.4160	1.991(7)	0.3224(14)	0.6399(70)
$SP_a(4^3, 56)$	2.9037	[52]	0.2895	1.915(13)	0.493(7)	0.9897(130)
$SP_b(4^3, 56)$	2.9037	[78]	0.1994	1.983(21)	0.458(7)	0.9207(210)
$SP_a(3^3, 26)$	2.9656	[52]	0.1437	1.943(18)	0.0506(12)	1.0226(180)
	3	[33]	0	1.9828(57)	0.518(7)	1.0172

Les écarts à l'analyse en tailles finies qui affectent les comportements de  $m_L(T_c^x(L))$ ,

$\Phi_L^n(T_c)$ ,  $\Phi_n^{\max}(L)$  et  $U_L(T_c)$  quand  $1 < d_f < 2$  ne peuvent pas s'expliquer uniquement par un effet de taille finie standard au sens où on l'entend habituellement pour des réseaux invariants par translation. Le fait que ces écarts augmentent pour chacune des grandeurs thermodynamiques (excepté  $\chi^{\max}(L)$ ) lorsque la dimension fractale décroît de 2 vers 1, et la comparaison entre  $SP_a(5^2, 24)$  et  $SP_a(5^2, 16)$  évoquée au paragraphe 3.3 confirment l'existence d'un caractère topologique dans ces corrections d'échelle. Une des contributions aux corrections d'échelle provient du caractère particulier de la convergence vers la limite thermodynamique dans le cas des fractals lorsque la taille du réseau augmente. La vitesse de cette convergence peut être reliée au comportement du nombre moyen de premiers voisins par site  $z_g(l^d, N_{oc}, k)$  avec  $k$  exprimé par l'équation (2.2.1) : On peut estimer correctement le taux de convergence en s'intéressant à l'écart relatif  $\rho_g(l^d, N_{oc}, k)$  de  $z_g(l^d, N_{oc}, k)$  par rapport à sa limite lorsque  $k$  tend vers l'infini  $z_g(l^d, N_{oc})$ . Deux termes gouvernent les variations de  $\rho_g(l^d, N_{oc}, k)$  : La valeur initiale (quand  $k$  est nul) et la raison  $\left(\frac{N_S}{N_{oc}}\right)$  de la série géométrique. La figure 3.1 montre clairement que  $\rho_g(l^d, N_{oc}, k)$  converge vers zéro plus vite pour le fractal  $SP_a(5^2, 24)$  que pour  $SP_a(5^2, 16)$ , et plus vite pour  $SP_a(3^3, 26)$ , et  $SP_a(4^3, 56)$  que pour les autres fractals ; en ce qui concerne  $SP_b(3^3, 18)$ , la valeur initiale est grande, mais dès que  $k \geq 4$  la convergence est plus rapide que pour  $SP_a(3^2, 8)$ , ou  $SP_a(4^2, 12)$ .

Des calculs plus récents m'ont permis de montrer que les corrections d'échelle sont plus importantes pour les structures  $SP_a(5^2, 16)$  et  $SP_a(4^2, 12)$  que pour les autres structures de même dimension fractale [78] ; or, les lacunarités de  $SP_a(5^2, 16)$  et  $SP_a(4^2, 12)$  sont plus élevées (la vitesse de convergence de  $\rho_g(l^d, N_{oc}, k)$  est aussi plus lente pour ces structures). Il est clair que, dans ces cas, les corrections d'échelle ont un caractère topologique et ne dépendent pas uniquement de la dimension fractale. On retiendra en conclusion que les corrections d'échelle sont d'autant plus faibles que la convergence du nombre moyen de voisins vers la limite thermodynamique est rapide.

### 3.5 Comportement des pics de susceptibilité, développements en $\epsilon$ et universalité faible

Quelle que soit la structure fractale, les maxima de la susceptibilité suivent des lois de puissance, comme le prévoit l'analyse en tailles finies ; les corrections d'échelle qui les affectent restent extrêmement faibles, même si elles sont fortes pour les autres grandeurs thermodynamiques. Ce dernier point, déjà souligné par José Carmona, est un des résultats les plus remarquables de l'ensemble des simulations menées sur des fractals de Sierpinski. Le rapport d'exposants  $\gamma/\nu$  peut donc toujours être calculé avec une bonne précision. Par ailleurs, lorsque la température critique est connue, nous avons vérifié que les valeurs de  $\gamma/\nu$  déduites des simulations aux points critiques sont cohérentes avec celles que l'on calcule à partir du comportement des maxima. L'ensemble des résultats rassemblés dans la table 3.2 appelle les commentaires suivants :

Des fractals de même dimension de Hausdorff, mais de lacunarités différentes conduisent à des valeurs de  $\gamma/\nu$  dont on peut affirmer qu'elles sont différentes : On peut distinguer  $SP_c(5^2, 16)$  de  $SP_a(5^2, 16)$  ou de  $SP_b(5^2, 16)$ , ainsi que  $SP_a(4^2, 12)$  de  $SP_b(4^2, 12)$  et  $SP_a(4^3, 56)$  de  $SP_b(4^3, 56)$ . Ces résultats montrent de manière directe que la formulation habituelle de l'universalité n'est pas correcte dans le cas des fractals ; ce dernier point avait déjà été souligné par Gefen [46], puis par Wu et Hu [110]. Bien que la relation d'hyper-scaling soit satisfaite lorsqu'on remplace la dimension d'espace  $d$  par  $d_f$ , l'ensemble d'exposants critiques  $\{\alpha, \beta, \gamma, \nu\}$  ne dépend pas seulement de la dimension de Hausdorff, de la symétrie du paramètre d'ordre et de la portée des interactions, mais aussi de propriétés topologiques de la structure fractale, comme la lacunarité. Clairement, le comportement critique du modèle d'Ising sur des fractals est décrit par une universalité plus faible que sur des réseaux invariants par translation. En 1974, Masuo Suzuki [95] a suggéré l'idée d'universalité faible pour décrire le comportement critique du modèle à huit vertex : Cette universalité serait définie par les rapports d'exposants  $\alpha/\nu$ ,  $\gamma/\nu$  et  $\beta/\nu$  et non l'ensemble  $\{\alpha, \beta, \gamma, \nu\}$ . Quoi qu'il en soit, la formulation de l'universalité qui décrit le comportement critique du modèle d'Ising sur les fractals est encore plus faible que celle de Masuo Suzuki, puisque seule la somme  $\gamma/\nu + 2\beta/\nu$  reste constante pour une

dimension fractale donnée, et non chaque terme de la somme.

La figure 3.2 montre que les valeurs de  $\gamma/\nu$  calculées par simulation Monte-Carlo sur des fractals de Sierpinski sont en net désaccord avec les résultats des développements en  $\epsilon$  obtenus par Le Guillou et Zinn-Justin [59]. Par ailleurs, pour une dimension de Hausdorff donnée, les différences entre les valeurs de  $\gamma/\nu$  déduites des simulations et celles des développements en  $\epsilon$  ne diminuent pas lorsque la lacunarité décroît. Il y a donc peu d'espoir que des fractals (du type Sierpinski) puissent constituer des systèmes physiques capables d'interpoler entre des dimensions entières. Les développements en  $\epsilon$  sont basés sur des techniques de renormalisation dans l'espace réciproque; l'invariance par translation reste donc sous-jacente à ce type de procédure. Elle s'applique à un hypothétique réseau de dimension non entière invariant par translation. Les désaccords entre les résultats des développements en  $\epsilon$  et ceux des simulations Monte-Carlo peuvent donc être attribués à la brisure de la symétrie de translation. Dans le cas des fractals, comme je l'ai exposé au début de ce mémoire, on atteint la limite thermodynamique en même temps que l'on construit la structure par itération de la cellule génératrice; les lacunes sont donc présentes sur le réseau à tous les ordres de grandeur. Les détails topologiques de la cellule génératrice, jouent donc un rôle particulier, puisqu'ils sont présents à toutes les échelles. Ainsi, l'influence des propriétés topologiques de la structure fractale sur le comportement critique introduit un champ supplémentaire décrivant un désordre qui se comprend comme un écart à la symétrie de translation.

Les valeurs de  $\gamma/\nu$  sont suffisantes pour permettre la description du comportement de l'ordre à longue distance au point critique. En admettant l'hypothèse exposée dans le paragraphe 3 – 1, à savoir qu'on puisse définir une fonction de corrélation moyenne à deux points  $G(r) = \langle S(0)S(r) \rangle$  indépendante de la position, elle se comporte comme  $G(r) \sim r^{2-d_f-\eta}$  au point critique. L'exposant de dimension anormale  $\eta$  décrit la déviation par rapport à un comportement critique gaussien [18]. En outre, une analyse dimensionnelle permet de montrer que l'on peut déduire  $\eta$  du rapport d'exposants  $\frac{\gamma}{\nu}$ ; on trouve [18, 75] que  $\eta = 2 - \frac{\gamma}{\nu}$ , ce qui implique  $G(r) \sim r^{\gamma/\nu-d_f}$  compte tenu de la relation d'hyper-scaling. La différence  $(d_f - \gamma/\nu)$  a donc une signification physique qui peut être reliée au comportement de l'ordre à longue distance au point critique. Les valeurs de  $(d_f - \gamma/\nu)$

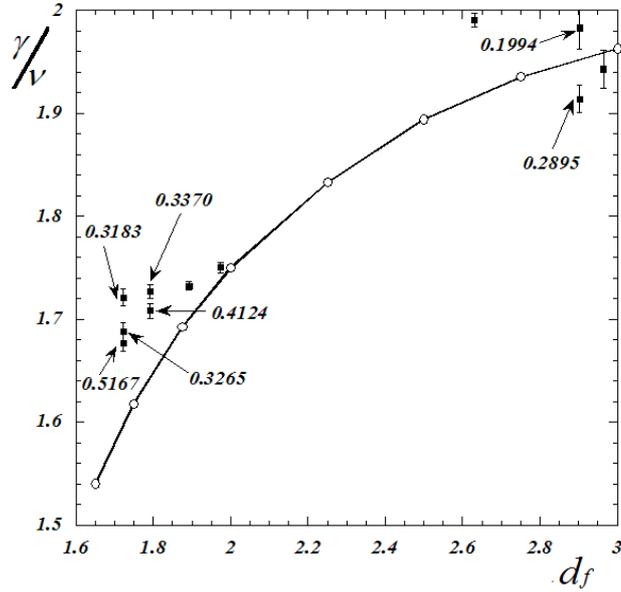


FIG. 3.2 – Rapport des exposants  $\gamma/\nu$  en fonction de la dimension fractale. Les carrés noirs sont les résultats des références [52, 74, 78]; les nombres indiquent la lacunarité. Les cercles correspondent aux résultats des développements en  $\epsilon$  de la référence [59].

rassemblées dans la dernière colonne de la table 3.2 suggèrent deux commentaires :

i) Pour une dimension fractale donnée, l'ordre à longue distance décroît plus vite lorsque la lacunarité augmente. La déviation par rapport à la symétrie de translation gêne la propagation de l'ordre à longue portée.

ii) L'ordre à longue portée décroît d'autant plus vite que la dimension fractale est faible; dans le cadre de l'universalité faible, cette remarque n'a de sens que pour des comparaisons entre fractals de la même famille.

### 3.6 Renormalisation Monte-Carlo

Les difficultés rencontrées dans les simulations Monte-Carlo des phénomènes critiques sur des fractals ont donné lieu, encore récemment, à des interprétations contradictoires.

Une des controverses les plus intéressantes a été soulevée par Pruessner et ses collaborateurs [89], qui ont remis en cause la validité de l'analyse en tailles finies sur les structures fractales. Leur étude est basée sur la comparaison entre ce qu'ils appellent des tapis de Sierpinski "expansés" et les tapis de Sierpinski habituels. Une version "expansée" de ces structures est représentées sur la figure 3.3 :  $SP_a^e(3^2, 8, k)$  désigne la version "expansée" de  $SP_a(3^2, 8, k)$ , où on note  $e$  le nombre d'"expansions". Les versions "expansés" ne sont pas fractales, mais le nombre moyen de premiers voisins est le même, quel que soit  $e$ ,  $k$  étant fixé.

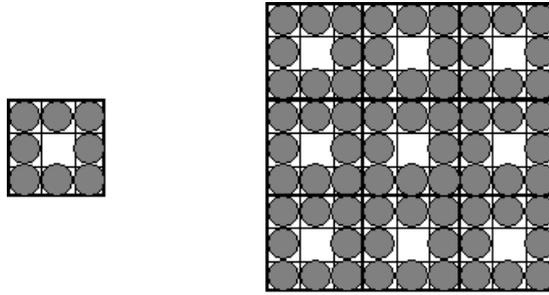


FIG. 3.3 – Version "expansée" (à droite)  $SP_a^1(3^2, 8, 1)$  du tapis de Sierpinski  $SP_a(3^2, 8, 1)$ .  $SP_a^1(3^2, 8, 1)$  n'est pas fractal et satisfait une invariance par translation dont  $SP_a(3^2, 8, 1)$  est la cellule élémentaire.

Attendu que  $SP_a(3^2, 8, k)$  est inclus (9 fois) dans  $SP_a^1(3^2, 8, k)$ , et qu'ils ont en commun le même nombre moyen de premiers voisins, l'argument de Pruessner et al. est basé sur le fait que leur comportement thermodynamique doit être le même tant que la longueur de corrélation  $\xi$  est inférieure à la taille de  $SP_a(3^2, 8, k)$ , c'est à dire  $3^k$ . Dans ces conditions, c'est à dire dans la phase haute température, les simulations numériques montrent, en étudiant la susceptibilité par spin, que  $SP_a(3^2, 8, k)$  se comporte comme sa version "expansée", plutôt que comme  $SP_a(3^2, 8, k+1)$ . Pruessner et ses collaborateurs attribuent cette différence au fait que les nombres de premiers voisins  $z_a(3^2, 8, k)$  et  $z_a(3^2, 8, k+1)$  sont différents et affirment qu'un tel résultat suffit à interdire l'analyse en tailles finies dans les fractals. Ils ne se préoccupent pas de la convergence vers la limite thermodynamique discutée précédemment, et interprètent comme une dépendance des

fonctions d'échelle avec l'étape d'itération ce que les autres auteurs traitent comme des corrections d'échelle. En fait, la comparaison entre une structure "expansée" et un tapis de Sierpinski classique basée uniquement sur des arguments de longueur de corrélation ne semble guère avoir de sens dans le cadre des phénomènes critiques dans la mesure où une renormalisation de  $SP_a^e(3^2, 8, k)$  vers  $SP_a(3^2, 8, k)$  ne satisfait pas la condition de symétrie d'échelle discrète, alors qu'une telle condition est satisfaite lors du passage de  $SP_a(3^2, 8, k+1)$  à  $SP_a(3^2, 8, k)$ . Le caractère particulier de la convergence vers la limite thermodynamique dans le cas des fractals, déjà invoqué à plusieurs reprises dans ce mémoire, m'a donc poussé à étudier le comportement critique par une autre méthode que l'analyse en tailles finies; fondamentalement, il était logique de se tourner vers une méthode de renormalisation.

Les systèmes de spins à symétrie discrète se prêtent de façon naturelle à une procédure de renormalisation du Hamiltonien dans l'espace direct [80, 81]. Comme une telle procédure met en jeu un nombre de couplages infini qu'on ne peut généralement pas traiter de manière analytique, on est obligé de le limiter pour rendre les calculs tractables; la fiabilité et la précision des résultats obtenus dépendent du nombre de couplages considérés. En 1976, Ma [65] a proposé de combiner la renormalisation dans l'espace direct avec des méthodes de simulation Monte-Carlo, ce qui permet d'augmenter le nombre de couplages impliqués. Cette méthode, connue sous le nom de renormalisation Monte-Carlo (MCRG par référence au terme anglais) a été développée sous sa forme actuelle par Swendsen [96, 97, 99, 100, 101]. Son efficacité dans l'étude des phénomènes critiques n'est plus à démontrer [83, 19, 20, 10, 48].

Lors d'un processus de renormalisation dans l'espace direct, on groupe les spins par blocs de taille  $b$  et on assigne à chacun des blocs un nouveau spin selon une règle que l'on s'est donnée; le nombre de spins est donc réduit d'un facteur  $b^{d_f}$  et le Hamiltonien obtenu après  $n$  étapes de renormalisation s'écrit :

$$\mathcal{H}^{(n)}(\{K_\alpha^{(n)}\}) = \sum_{\alpha=1}^{\infty} K_\alpha^{(n)} S_\alpha^{(n)} \quad (3.6.1)$$

$\{K_\alpha^{(n)}\}$  désigne l'ensemble des constantes de couplages après  $n$  étapes de renormali-

sation, et  $S_\alpha^{(n)}$  les sommes de spins associées. Le flot des couplages entre la  $n$ ème étape de renormalisation et la  $(n + 1)$ ème est décrit par une matrice dont les éléments sont définis par :

$$\mathcal{T}_{\alpha\beta}^{(n+1,n)} = \frac{\partial K_\alpha^{(n+1)}}{\partial K_\beta^{(n)}} \quad (3.6.2)$$

et satisfont la relation :

$$\frac{\partial \langle S_\alpha^{(n+1)} \rangle}{\partial K_\beta^{(n)}} = \sum_\gamma \frac{\partial \langle S_\alpha^{(n+1)} \rangle}{\partial K_\gamma^{(n+1)}} \mathcal{T}_{\gamma\beta}^{(n+1,n)} \quad (3.6.3)$$

Lors de la Renormalisation Monte-Carlo, on calcule les éléments de matrice  $\mathcal{T}_{\gamma\beta}^{(n+1,n)}$  en inversant la relation 3.6.3 où les dérivées partielles sont calculées à partir des moyennes :

$$\frac{\partial \langle S_\alpha^{(m)} \rangle}{\partial K_\gamma^{(n)}} = \langle S_\alpha^{(m)} S_\gamma^{(n)} \rangle - \langle S_\alpha^{(m)} \rangle \langle S_\gamma^{(n)} \rangle \quad (3.6.4)$$

On calcule les exposants critiques  $y_t$  et  $y_h$  à partir du flot des couplages : La plus grande valeur propre de la matrice  $\mathcal{T}$  dans le sous-espace des couplages pairs est  $b^{y_t}$  et celle qui est associée au sous-espace des couplages impairs est  $b^{y_h}$ . On peut voir l'opération qui consiste à grouper des spins dans un bloc soit comme une diminution de l'échelle des longueurs d'un facteur  $b$ , soit dans un esprit de "coarse graining" comme une diminution de la résolution. Le respect de la symétrie d'échelle discrète restreint le choix de  $b$  à des puissances entières du côté de la cellule génératrice dans le cas des fractals de Sierpinski ; si  $b = l$ , le processus de renormalisation coïncide géométriquement avec le processus inverse de construction de la structure.

Pendant la thèse de Pai-Yi Hsiao, nous avons étudié le comportement du modèle d'Ising par Renormalisation Monte-Carlo sur des fractals de Sierpinski  $SP_a(3^2, 8, k)$  ( $d_f \simeq 1.8928$ ) jusqu'à la huitième étape d'itération [55] ; c'est à ma connaissance la première fois que des résultats de Renormalisation Monte-Carlo sur des fractals ont été publiés. Les configurations permettant de calculer les moyennes nécessaires (relation 3.6.4) ont été générées par l'algorithme de Wolff. On trouvera des détails techniques supplémentaires dans l'article joint à ce mémoire. En premier lieu, les résultats des simulations confirment la valeur de la température critique calculée précédemment par analyse en tailles finies.

Par ailleurs, une dissymétrie dans la vitesse de convergence apparaît nettement entre les deux directions propres des flots de renormalisation. La convergence est rapide dans la direction associée à  $y_h$  et permet de calculer une valeur qui est en bon accord avec celle déduite d'une analyse en tailles finies, puisque les différences entre les exposants calculés par les deux méthodes restent inférieures à 0.5%. A la différence des systèmes invariants par translation, la convergence dans la direction associée à l'exposant  $y_t$  est lente, et ne permet d'en donner qu'une borne supérieure. La lenteur de cette convergence est à mettre en parallèle avec celle qui a été observée précédemment dans le comportement des dérivées logarithmiques  $\Phi_L^n(T)$  lors d'une analyse en tailles finies : Les écarts aux lois de puissance dans le comportement de  $\Phi_L^n(T)$ , interprétés comme des corrections d'échelle, ne permettent de donner qu'une borne inférieure à  $\nu = 1/y_t$ ; cette dernière est en parfait accord avec la borne supérieure de  $y_t$  fournie par la Renormalisation Monte-Carlo. La cohérence entre les résultats obtenus par Renormalisation Monte-Carlo et par l'analyse en tailles finies montre bien la validité de l'hypothèse d'homogénéité dans la description des phénomènes critiques sur des fractals, compte tenu du caractère particulier de la convergence vers la limite thermodynamique.

### 3.7 Commentaires : dimension critique inférieure et chaleur spécifique

Lorsque  $d_f$  est comprise entre 2 et 3, où des transitions de phase se produisent aux deux plus proches bornes entières, la situation est qualitativement différente du cas où elle est comprise entre 1 et 2; dans ce dernier cas, la transition de phase disparaît lorsque l'on atteint la borne inférieure. Bien que la dimension critique inférieure du modèle d'Ising soit 1, on s'attend à ce que la dimension effective soit plus élevée, car elle doit être déterminée par la dimension fractale limite en-dessous de laquelle il est impossible de construire un fractal de degré de ramification infini. Cette dimension limite n'a pas été déterminée à ce jour.

Bien que les déplacements des pics de la chaleur spécifique donnent des valeurs des

températures critiques cohérentes avec celles qu'on déduit des pics de la susceptibilité et des dérivées logarithmiques quand  $d_f > 2$ , les maxima  $c^{\max}(L)$  ne suivent pas des lois de puissance de  $L$ ; on ne peut donc pas calculer directement  $\alpha/\nu$ . Quoiqu'il en soit, on peut déduire les valeurs de  $\alpha$  de la loi d'échelle de Rushbrooke,  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ ; ces valeurs ont été reportées dans la table 3.2, où l'on peut constater, compte tenu de leurs incertitudes, qu'elles recouvrent des valeurs négatives. Si  $\alpha < 0$ , la chaleur spécifique ne diverge pas à la limite thermodynamique au point critique, mais présente une bosse. Dans ces conditions, il faut tenir compte de la partie non singulière dans la relation d'échelle 3.1.12, et la réécrire :

$$c_L(T) \sim A(T) + L^{\alpha/\nu} T \mathcal{C}(tL^{1/\nu}) \quad (3.7.1)$$

où  $A(T)$  est une modulation qui varie lentement avec  $T$ , comme le confirme le déplacement des pics de chaleur spécifique.  $c^{\max}(L)$  se comporte alors avec la taille comme  $c^{\max}(L) = \mathcal{A} - \mathcal{B}L^{\alpha/\nu}$ . Un "fit" à trois paramètres des résultats de nos simulations par cette relation n'est en général pas assez précis pour donner une valeur fiable de  $\alpha/\nu$ .

## Chapitre 4

# Lois d'échelles des distributions des amas au point critique, ralentissement critique

Il n'aurait pas été possible d'obtenir les résultats exposés au chapitre précédent sans l'utilisation d'algorithmes de "cluster". Comme ceux-ci sont sous-tendus par la mise en relation de la transition de percolation avec les transitions magnétiques, il est intéressant d'un point de vue physique d'aller plus loin dans la compréhension de cette relation et donc de la manière dont le ralentissement critique est réduit. Le travail que j'ai mené dans cette direction revêt deux aspects. D'une part, les idées de la théorie de la percolation suggèrent de s'intéresser à la distribution de taille des amas générés pendant les simulations [94]. D'autre part, les corrélations entre les configurations séparées par un nombre donné de pas Monte-Carlo permettent d'accéder à des propriétés dynamiques ; ces propriétés doivent être comprises au sens de la cinétique stochastique de construction des amas. On trouvera dans l'annexe 1 de ce mémoire des précisions concernant ces deux aspects dans le cas de l'algorithme de Wolff.

## 4.1 Distribution de la taille des amas générés par l'algorithme de Wolff au point critique

La taille  $s(n)$  de l'amas de Wolff construit au  $n^{\text{ième}}$  pas Monte-Carlo d'une simulation est le nombre de sites appartenant à l'amas de Fortuin-Kasteleyn associé. Les propriétés géométriques des amas générés dans le cas de réseaux invariants par translation se différencient de celles des amas générés sur des fractals par le fait que la forme de ces derniers est contrainte par l'invariance d'échelle du réseau sous-jacent. Lorsque la température critique est connue avec une précision suffisante, les simulations que j'ai menées dans le cadre du modèle d'Ising en collaboration avec Pai-Yi Hsiao ont permis d'étudier les distributions de probabilité de taille des amas au point critique pour plusieurs fractals de Sierpinski [76, 77].

En premier lieu, les résultats des simulations montrent que la taille moyenne  $\langle s_k \rangle$  des amas générés par l'algorithme de Wolff sur un réseau  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$  évolue avec la taille de ce réseau selon une loi de puissance  $\langle s_k \rangle \sim L^{d_{fW}}$ . Ainsi, pour un fractal  $SP_g(l^d, N_{oc})$  donné, l'exposant  $d_{fW}$  associé permet de définir une dimension fractale des amas de Wolff au point critique. La transformation de Fortuin-Kasteleyn [37], décrite dans l'annexe 1, permet de relier la loi d'échelle géométrique satisfaite par la taille moyenne des amas aux exposants de la transition magnétique, car on s'attend à ce que les comportements de  $\langle s_k \rangle$  et de la susceptibilité  $\chi \sim L^{\gamma/\nu}$  avec la taille  $L$  soient identiques [108]. On vérifie sur la table 4.1 que les valeurs de  $\gamma/\nu$  calculées à partir des fluctuations de l'aimantation sont compatibles avec celles de  $d_{fW}$  dans le cas des fractals étudiés.

Etant donné un réseau  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$ , on note  $P_k(s)$ , la distribution de probabilité de la taille des amas calculée en normalisant les histogrammes construits pendant les simulations au point critique. Quelques-unes de ces distributions sont représentées sur la figure 4.1 : elles comportent deux pics, comme l'avaient déjà remarqué Tamayo et al. [103] dans le cas du modèle d'Ising sur des réseaux plans invariants par translation, et suivent des lois de puissance (du type loi de Fisher du modèle "droplet" [35] ou de la percolation) pour les amas de petite taille. Des écarts à ces lois sont cependant sensibles dans le cas de la dimension fractale la plus basse, pour les réseaux  $SP_a(3^2, 8, k)$ , où les petites

oscillations qui se produisent autour de la loi de puissance traduisent les contraintes dues à l'invariance d'échelle du réseau sous-jacent. De telles oscillations ne sont pas sans rappeler celles que j'ai mises en évidence lors de mon travail de thèse sur la distribution des longueurs des segments dans les tapis de Sierpinski aléatoires [72].

TAB. 4.1 – Dimension fractale  $d_{fw}$  des amas de Wolff, exposant de surface  $S_w$  et exposants dynamiques  $z_w^M$  et  $z_w^E$ .

Fractal	$d_f$	$d_{fw}$	$S_w$	$z_w^M$	$z_w^E$
$SP_a(3^2, 8)$	1.8928	1.747(20)	0.838(2)	-0.12	0.089(15)
$SP_a(5^2, 24)$	1.9746	1.7525(45)	0.8188(2)	0.0214(130)	0.1524(130)
$SP_b(3^3, 18)$	2.6309	1.94(5)	0.849(8)	-0.095(24)	0.145(20)
$SP_a(4^3, 56)$	2.9037	1.92(2)	0.742(10)	0.0130(226)	0.178(41)
$SP_a(3^3, 26)$	2.9656	1.96(1)	0.738(2)	0.094(23)	0.247(39)

Nous avons pu pousser plus loin l'interprétation du comportement des distributions de taille : Le résultat le plus intéressant que nous avons obtenu est l'invariance des densités de probabilités  $\mathcal{P}(s)$  lors d'un changement d'échelle approprié. Cette invariance, valable au point critique, peut s'écrire :

$$\mathcal{P}(s) = b^{-d_f} \mathcal{P}(sb^{-x}), \quad (4.1.1)$$

Nous avons pu montrer analytiquement [76] que  $x$  est égal à l'exposant magnétique  $y_h = \beta/\nu + \gamma/\nu$  associé à l'une des directions propres des flots de renormalisation. La loi d'échelle ci-dessus fait intervenir la diminution de la taille des amas d'un facteur  $b^{-y_h}$  lors d'un changement de l'unité de longueur de 1 à  $b$ . Puisque  $b$  doit être choisi de manière à ce que la symétrie d'échelle discrète soit satisfaite lorsqu'on va d'une étape de renormalisation à la suivante, il ne peut être égal qu'à une puissance entière du côté de la cellule génératrice du réseau de Sierpinski. Il est dans ce cas plus commode d'écrire la loi d'échelle ci-dessus en terme de distribution de probabilité de la taille des amas  $P_k(s)$  associée à  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$ , plutôt que de densité de probabilité :

$$P_k(s) = P_{k-1}(sl^{-y_h}) \quad (4.1.2)$$

Les résultats de nos simulations sont en très bon accord avec cette loi. La figure 4.2 montre quelques exemples d'invariance d'échelle des distributions  $P_k(s)$  obtenus lors de la transformation  $s \rightarrow sl^{-yh}$  en allant d'une étape d'itération  $k$  à la suivante.

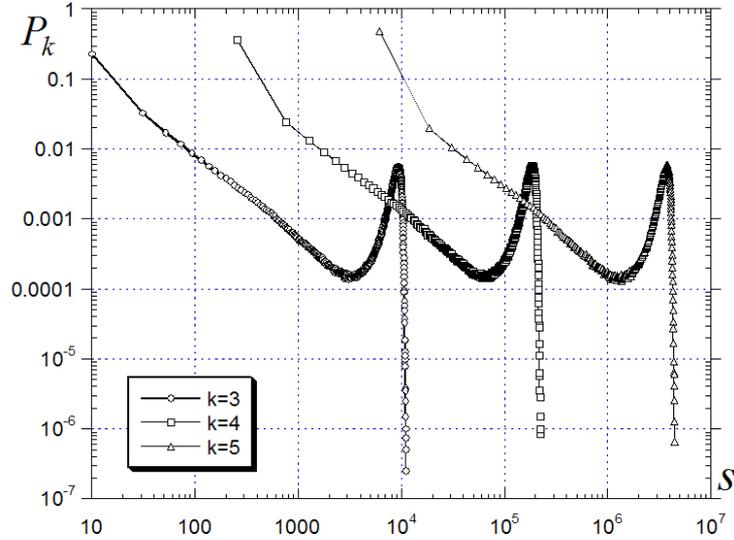


FIG. 4.1 – Distributions de probabilité  $P_k(s)$  de la taille des amas de Wolff au point critique dans le cas  $SP_a(5^2, 24, k)$ .

On peut comprendre d'un autre point de vue l'évolution de  $P_k(s)$  avec l'étape d'itération de la structure fractale en s'intéressant à la densité moyenne de la taille des amas,  $\mu(L) = \langle s_k \rangle / L^{d_f}$ , définie comme le rapport entre la taille moyenne des amas au point critique et le nombre de sites du réseau.  $\mu(L)$  est étroitement liée à la propagation de l'ordre à longue portée (on rappelle que  $L = l^k$ ) : La loi d'échelle satisfaite par la fonction de corrélation à deux points  $G(r)$  avec  $r$  mentionnée au paragraphe 3–5 suit la même forme que celle de  $\mu(L)$  avec la taille du réseau, c'est à dire  $\mu(L) \sim L^{d_f w - d_f}$ , et  $G(r) \sim r^{d_f w - d_f}$ . Il ressort des résultats de la table 4.1 que pour une famille donnée de structures fractales (a) ou b), la proportion moyenne de sites impliqués dans un pas de l'algorithme de Wolff décroît d'autant plus vite avec la taille que la dimension de Hausdorff est faible. On re-

marque par ailleurs que le réseau est envahi par un petit nombre d'amas de grande taille entourés d'une assemblée de petits amas ; très peu d'amas de tailles intermédiaires sont générés au point critique. De plus, pour une famille donnée de structures fractales, cet effet de ségrégation entre les grands et les petits amas est d'autant plus prononcé que la dimension de Hausdorff est faible.

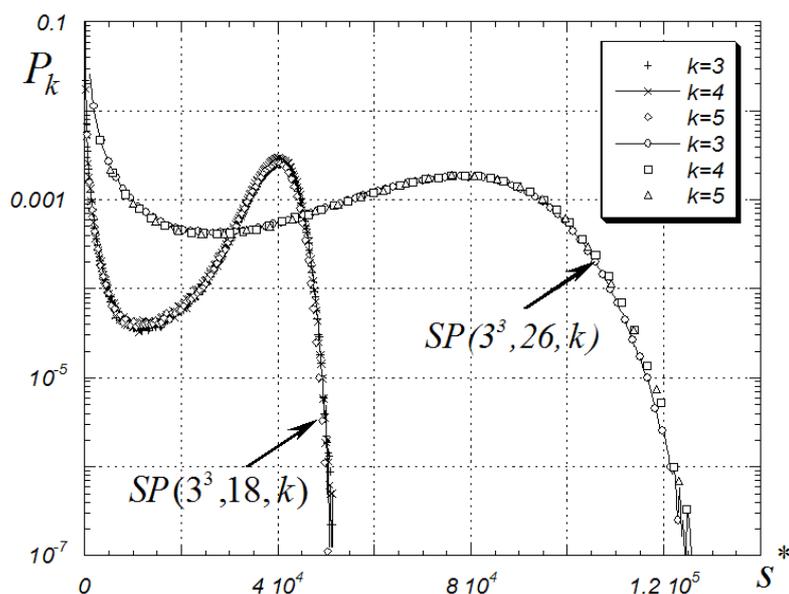


FIG. 4.2 – Invariance d'échelle des distributions  $P_k(s)$  lors du passage d'une étape d'itération  $k$  à la suivante, selon la transformation :  $s \rightarrow sl^{-y_h}$

## 4.2 Distribution de l'énergie de surface des amas générés par l'algorithme de Wolff au point critique

De la même manière que la différence  $|\Delta M|$  entre deux valeurs successives de l'aimantation est égale à deux fois la taille de l'amas de Wolff construit pendant un pas

Monte-Carlo, la différence  $|\Delta E|$  entre deux valeurs successives de l'énergie totale représente deux fois la tension de surface. Il apparaît donc que la taille des amas est liée aux corrélations du paramètre d'ordre tandis que la tension de surface est liée aux corrélations de l'énergie entre deux pas successifs. L'approfondissement de l'étude entreprise avec Pai-Yi Hsiao sur les distributions de taille suggérait donc de s'intéresser aux densités de probabilités  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$  au point critique [54].

Les résultats des simulations que nous avons menées montrent que le comportement de la tension de surface moyenne  $\langle |\Delta E|_k \rangle$  des amas construits par l'algorithme de Wolff au point critique sur un réseau  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$  suit une loi de puissance du type  $\langle |\Delta E|_k \rangle \sim L^{S_w}$ . La table 4.1 rassemble les valeurs des exposants  $S_w$  liés à la tension de surface que nous avons calculés pour cinq fractals différents, ainsi que pour les réseaux bi- et tri-dimensionnels invariants par translation. Par ailleurs, l'allure des courbes représentant  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$  en coordonnées logarithmiques suggère que la densité de probabilité satisfait une relation d'homogénéité par rapport à la tension de surface. On l'écrit :

$$\mathcal{P}_S(|\Delta E|) = b^{-d_S} \mathcal{P}_S(b^{-y_s} |\Delta E|) \quad (4.2.1)$$

Des arguments d'échelle permettent d'obtenir une relation entre les exposants  $d_S$ ,  $y_s$  et  $S_w$ . On peut montrer analytiquement [54] que  $S_w = 2y_s - d_S$ . Comme, de plus,  $d_S$  décrit la dimensionnalité d'une surface pour un système dont la dimension d'espace est  $d_f$ , on peut affirmer que  $d_S$  est compris entre  $d_f$  et  $d_f - 1$ . Les résultats de nos simulations montrent que la relation d'homogénéité (4.2.1) concernant  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$  est satisfaite avec une très bonne précision pour  $d_S = d_f - 1$ . La figure 4.3 montre quelques exemples d'invariance d'échelle des distributions  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$  où  $d_S = d_f - 1$  et  $y_s = (S_w + d_f - 1)/2$ .

On constate que, contrairement à la densité de probabilité des tailles,  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$  ne comporte pas deux pics. La ségrégation entre les petits et les grands amas évoquée dans le paragraphe précédent n'apparaît pas dans le comportement de  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$ . Une description plus complète des amas nécessiterait une distribution de probabilité bidimensionnelle, c'est-à-dire la probabilité qu'un amas ait à la fois une taille  $s$  et une énergie de surface  $|\Delta E|$ . Le calcul d'une telle distribution demanderait des ressources informatiques gigantesques. Quoi qu'il en soit, on peut comprendre l'allure de  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$  comme un effet de

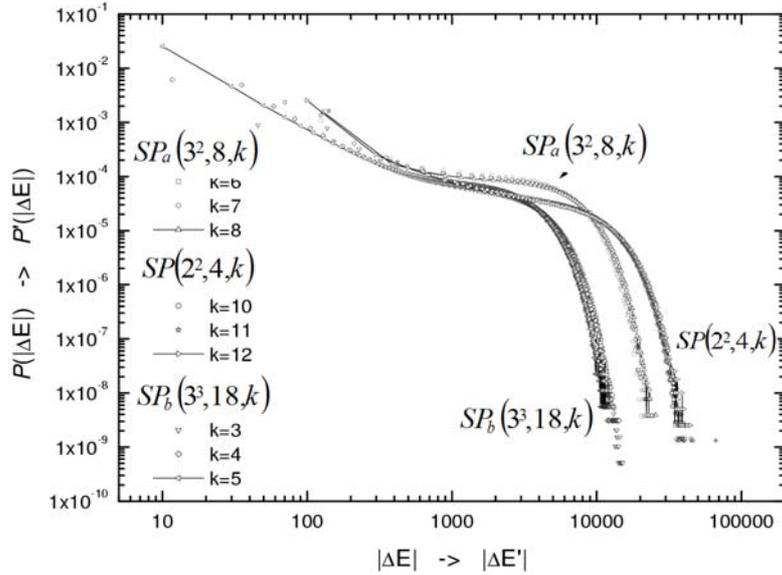


FIG. 4.3 – Invariance d'échelle des distributions  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|)$  lors du passage d'une étape d'itération  $k$  à la suivante, selon la transformation :  $\mathcal{P}_S(|\Delta E|) \rightarrow b^{-(d_f-1)}\mathcal{P}_S(b^{-y_s}|\Delta E|)$  pour  $SP_a(3^2, 8, k)$  et  $SP_b(3^3, 18, k)$  et les réseaux bidimensionnels réguliers.

dégénérescence lié à l'étude de ce que l'on appelle habituellement "lattice animals" en théorie de la percolation [94]. La distribution de l'énergie de surface des grands amas est large parce que le nombre de façons de construire un amas de taille donnée met en jeu un nombre élevé de frontières dont les tensions de surface sont distribuées sur une grande plage. Cela signifie par ailleurs que l'essentiel de la simulation met en jeu les grands amas.

### 4.3 Temps d'autocorrélation et exposants dynamiques

Dans le cas des systèmes de spin discrets, on peut relier les chaînes de Markov générées par les algorithmes Monte-Carlo à des propriétés dynamiques parce qu'on peut les interpréter en termes de processus de cinétique stochastique. On peut s'intéresser à la dynamique de deux points de vue : Le premier consiste à étudier la manière dont un

système hors d'équilibre relaxe vers l'équilibre thermodynamique ; le second point de vue reste dans le cadre des systèmes à l'équilibre thermodynamique. Les propriétés dynamiques du modèle d'Ising sur des fractals de Sierpinski ont été étudiées du premier point de vue par Zheng et Li [114], puis Pruessner et al. [89]. Etant plus directement intéressé par le ralentissement critique, j'ai adopté le second point de vue [54, 76, 77]. Il faut donc calculer les fonctions d'autocorrélation des grandeurs physiques à partir des simulations au point critique. Il y a plusieurs manières de calculer des temps caractéristiques à partir de ces fonctions, (avec une fiabilité plus ou moins bonne) et on peut leur attribuer différentes significations physiques [103]. Il n'est donc pas inutile de consacrer quelques lignes à ce point, afin de fixer les idées. D'une manière générale, on peut distinguer trois régimes dans le comportement de ces fonctions d'autocorrélation :

i) Un régime aux temps courts : La décroissance peut se décrire par une somme de plusieurs exponentielles de temps caractéristiques différents.

ii) Un régime aux temps intermédiaires : La décroissance peut être approximativement décrite par une seule exponentielle.

iii) Un régime aux temps longs : Les fluctuations statistiques deviennent importantes ; les configurations sont décorrélées, et on ne peut pas attribuer de signification physique d'un point de vue dynamique aux fonctions d'autocorrélation.

J'ai décidé de calculer les temps d'autocorrélation intégrés pour les deux raisons suivantes :

Premièrement, les temps d'autocorrélation intégrés ont une signification précise dans le cadre du ralentissement critique, puisqu'ils sont directement reliés aux erreurs statistiques  $\delta \langle A \rangle$  des moyennes thermodynamiques d'une grandeur  $A$  (en pratique  $A$  est soit l'énergie, soit l'aimantation) ; lorsqu'on les calcule à partir d'un run de  $N_s$  pas Monte-Carlo, on peut écrire [17] :

$$(\delta \langle A \rangle)^2 \simeq \frac{1}{N_s} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \left[ 1 + 2 \frac{\tau_A}{\delta \theta} \right] \quad (4.3.1)$$

où  $\tau_A$  est le temps d'autocorrélation intégré associé à la grandeur  $A$ , et  $\delta \theta$  l'unité de temps correspondant à un pas Monte-Carlo. Si on désigne par  $c_A(\theta)$  la fonction d'au-

to corrélation à la limite continue,  $\tau_A$  est défini par  $\tau_A = \int_0^{\infty} c_A(\theta) d\theta$ . On remarque que  $\delta \langle A \rangle$  n'est rien d'autre que l'erreur standard augmentée d'un terme que l'on appelle habituellement inefficacité statistique.

Deuxièmement, il s'avère que les fits des fonctions d'autocorrélation réalisés sur des intervalles bornés (par exemple la région intermédiaire) sont trop sensibles à la largeur de l'intervalle pour être fiables.

La procédure la plus fiable pour fiter des fonctions d'autocorrélation prend en compte la distribution des temps : Les fonctions d'autocorrélation discrètes  $C_A(n)$  sont développées sur une base restreinte d'exponentielles :

$$C_A(n) = \sum_{i=1}^p a_i \exp(-n/\tau_i) \quad (4.3.2)$$

où les coefficients  $a_i$  satisfont la condition de normalisation  $\sum_{i=1}^p a_i = 1$ . Ces fits sont réalisés de  $n = 0$  jusqu'à un "cutoff"  $n_C$ , qui doit être supérieur au plus grand temps caractéristique. On calcule alors facilement les temps d'autocorrélation intégrés à partir des résultats des fits de  $C_A(n)$ , puisque  $\tau_E^{int} = \sum_{i=1}^p \tau_i a_i$ . Dans la pratique, des fits à six paramètres sont suffisants pour donner des temps d'autocorrélation intégrés stables (insensibles aux valeurs de  $n_C$ ); augmenter  $p$  ne change pas non plus leur valeur. Cette méthode présente l'avantage de prendre en compte physiquement les queues des fonctions d'autocorrélation en moyenne, puisque  $C_A(n)$  tend vers zero lorsque  $n$  tend vers l'infini.

Dans le cas de l'algorithme de Wolff, les temps d'autocorrélation mesurés à partir des simulations Monte-Carlo au point critique doivent être normalisés par un facteur égal à la densité moyenne des amas,  $\mu(L) = \langle s_k \rangle / L^{d_f}$ , de manière à ce que l'unité de temps corresponde à un balayage du réseau dans sa totalité [76]. L'évolution des temps d'autocorrélation intégrés de l'énergie  $E$  et de l'aimantation  $M$  avec la taille du réseau suit des lois de puissance dont on déduit les exposants dynamiques de Wolff associés  $z_w^E$  et  $z_w^M$ . Les exposants que nous avons calculés pour cinq structures de dimensions fractales différentes sont rassemblés dans la table 4.1; ces résultats appellent les commentaires suivants :

i) Il apparaît clairement que les exposants qui décrivent le comportement dynamique de l'énergie et de l'aimantation sont différents. L'algorithme de Wolff décorrèle plus efficacement l'aimantation que l'énergie, puisque  $z_w^M$  est toujours plus petit que  $z_w^E$ . Cela est étroitement lié aux caractéristiques des distributions de la taille des amas et de leur tension de surface discutées dans le paragraphe précédent.

ii) L'exposant dynamique de Wolff, relié à la grandeur thermodynamique limitante (l'énergie) décroît lorsque la dimension fractale diminue. Une telle proposition ne peut pas se généraliser puisque l'universalité est faible. On s'attend donc à ce que cet exposant dépende de la famille de structure fractale, mais que pour une famille donnée, l'algorithme de Wolff soit d'autant plus efficace à réduire le ralentissement critique que la dimension fractale est faible.

iii) Puisque  $\delta \langle E \rangle$  est relié aux fluctuations canoniques de l'énergie, la relation (4.3.1) suggère que l'exposant dynamique  $z_w^E$  est relié au comportement critique de la chaleur spécifique. Dans le cas de l'algorithme de Swendsen-Wang, Li et Sokal [63] ont montré que l'exposant dynamique associé  $z_{sw}$  est borné inférieurement par  $\alpha/\nu$ . Bien que cela n'ait pas été démontré pour l'algorithme de Wolff, on constate que les exposants  $z_w^E$  que nous avons calculés sont aussi bornés par  $\alpha/\nu$ . Enfin, la relation empirique  $\tau_E = a + bc_L(T_c)$  entre les temps d'autocorrélation de l'énergie et les chaleurs spécifiques proposée par Coddington and Baillie [29] dans le cadre du modèle d'Ising sur des réseaux invariants par translation n'est pas vérifiée sur des fractals.

La compréhension du rôle fondamental joué par la tension de surface dans les mécanismes du ralentissement critique suggère de pousser plus loin des calculs analytiques. Ces derniers sont très vite limités par la présence de la valeur absolue dans la définition de cette tension. Cependant, puisque la tension de surface  $|\Delta E|$  est la valeur absolue de la différence d'énergie entre deux pas Monte-Carlo consécutifs, elle peut être reliée à la valeur de la fonction d'autocorrélation  $C_E(n)$  pour  $n = 1$ . L'écart quadratique moyen de la tension de surface des amas de Wolff  $\langle |\Delta E|_k^2 \rangle$  sur un réseau donné  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$  peut s'écrire :

$$\langle |\Delta E|_k^2 \rangle = 2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) (1 - C_E(1)) \quad (4.3.3)$$

La valeur de  $(C_E(1) - 1)$  permet de définir ce que l'on appelle des temps de fluctua-

tions statistiques  $\tau_{wsf}^E$ , qui donnent une estimation de la pente de la fonction d'autocorrelation à l'origine. Pour un fractal  $SP_g(l^d, N_{oc})$  donné, le comportement de  $\tau_{wsf}^E$  avec la taille du réseau suit une loi de puissance qui permet de définir un exposant dynamique, qu'on notera  $\zeta_w^E$ . Bien que l'exposant de surface ne puisse pas être directement relié à l'un des exposants dynamiques, nous avons pu trouver une inégalité impliquant  $S_w$  et l'exposant dynamique  $\zeta_w^E$ . Des arguments d'échelle nous ont permis de montrer analytiquement [54] que  $(2S_w + \zeta_w^E) \nu < 2$ .

# Chapitre 5

## Modèle de Potts

Le modèle de Potts présente des transitions de phase qui ont des caractéristiques beaucoup plus variées que le modèle d'Ising. L'article de revue écrit par Wu [109] sur ce sujet constitue une solide référence. Le Hamiltonien du modèle de Potts à  $q$ -états s'écrit :

$$\mathcal{H}_{\text{Potts}} = -J_{\text{Potts}} \sum_{\langle i,j \rangle} \delta(\sigma_i, \sigma_j) \quad (5.0.1)$$

où  $\sigma_i$  et  $\sigma_j$ , qui peuvent prendre toutes les valeurs entières entre 1 et  $q$ , représentent les états de spin aux sites occupés  $i$  et  $j$ ;  $\delta(\sigma_i, \sigma_j)$  vaut 1 si  $\sigma_i = \sigma_j$ , et 0 si  $\sigma_i \neq \sigma_j$ ;  $J_{\text{Potts}}$  est la constante de couplage entre deux spins premiers voisins. Supposant qu'il y ait  $N_{q_0}$  spins dans l'état  $q_0$  où  $1 \leq q_0 \leq q$ , on définit alors la densité maximale d'états de spin pour une configuration donnée du système par :

$$\rho_{max} = \max \left\{ \frac{N_1}{N}, \dots, \frac{N_q}{N} \right\} \quad (5.0.2)$$

où  $N = N_1 + \dots + N_q$  est le nombre total de sites occupés du système. Le paramètre d'ordre de la transition est défini par :

$$m = \frac{q\rho_{max} - 1}{q - 1}. \quad (5.0.3)$$

Dans le cas des systèmes invariants par translation, l'ordre de la transition associée à un échange ferromagnétique dépend du nombre  $q$  d'états de spin en plus de la dimension  $d$  de l'espace : Elle est du premier ordre si  $q$  est plus grand qu'une valeur  $q_c(d)$ , du second ordre dans l'autre cas. On peut donc distinguer deux régions sur un réseau carré dans le

plan  $(d, q)$  (Fig. 5.1) ; on s'attend à ce que l'ordre de la transition change à des dimension non-entières. La question de l'interpolation entre des dimensions entières conduit naturellement à étudier les transitions de phase du modèle de Potts sur des structures fractales. Puisque les résultats obtenus dans le cadre du modèle d'Ising montrent que l'universalité est faible, on ne s'attend pas à ce que cela puisse se faire de manière univoque pour une dimension fractale donnée. Par ailleurs, dans certaines conditions, l'introduction d'un désordre aléatoire ou de fluctuations apériodiques [28][12] peut induire une transition du second ordre à partir de systèmes initialement invariants par translation où le diagramme de phase prévoit une transition du premier ordre. L'étude du modèle de Potts sur des fractals est donc particulièrement intéressante, puisque deux des paramètres qui gouvernent son comportement, à savoir le désordre fractal structurel et la dimensionalité ne sont pas indépendants.

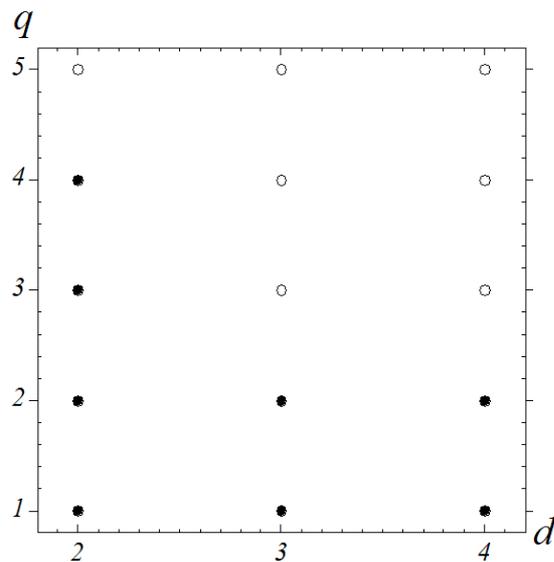


FIG. 5.1 – Ordre de la transition associée au modèle de Potts en fonction de la dimensionalité d'espace  $d$  et du nombre d'états de spins  $q$  ; les cercles noirs pleins correspondent à une transition du second ordre, les autres à une transition du premier ordre.

Peu de travaux relatifs au modèle de Potts sur des fractals sont disponibles. Les premiers ont été publiés par Bin [16] puis Lai [57], qui ont utilisé une procédure de renormalisation du type Migdal Kadanoff sur des tapis de Sierpinski. Menezes et ses collaborateurs [68] ont donné une solution exacte du modèle de Potts sur une famille très particulière de "tamis" de Sierpinski de degré de ramification infini. Enfin, des comportements plus inhabituels ont été trouvés sur des fractals de structure hiérarchique du type diamant par Y. Z. Wu et al. [111], puis Redinz et al. [90].

Pour ce qui concerne des simulations numériques, on s'attend à ce que l'augmentation du nombre d'états de spins amplifie les difficultés déjà rencontrées dans le cas du modèle d'Ising. Aucun résultat n'étant disponible (à ma connaissance) par des méthodes Monte-Carlo, j'ai tout d'abord décidé d'étudier un cas pour lequel les ressources nécessaires à une campagne de calcul semblaient raisonnables. C'est ainsi, qu'en collaboration avec Pai-Yi Hsiao, nous avons réalisé des simulations du modèle de Potts à 3 états sur le fractal de Sierpinski  $SP_a(3^2, 8)$ , où l'on attend une transition du second ordre. Comme on peut facilement prévoir que la taille moyenne des amas dans la région critique sera inférieure à ce qu'elle est pour le modèle d'Ising, nous avons utilisé l'algorithme de Swendsen-Wang en plus de celui de Wolff. On doit dans un premier temps être capable de déterminer sans ambiguïté l'ordre d'une transition à partir des résultats d'une analyse en tailles finies. Le comportement avec la taille de la susceptibilité du paramètre d'ordre permet de le faire grâce au critère de Meyer-Ortmanns and Reisz [69] : Dans le cas de transitions du second ordre, le profil des pics de susceptibilité  $\chi_L(T)$  rapportés à l'écart au point critique ne présente pas d'intersections dans les ailes lorsque la taille varie. Plus précisément, pour une taille  $L_1$  suffisamment grande, il existe toujours une taille  $L_2 > L_1$  telle que  $\chi_L(\delta + T_c^x(L)) > \chi_{L_1}(\delta + T_c^x(L_1))$  où  $L \geq L_2$ , and  $\delta$  est l'écart de la température à la position des pic. Une distribution Lorentzienne donne un meilleur "fit" de  $\chi_L(T)$  qu'une Gaussienne et l'aire sous la courbe dépend de la taille, alors que ce n'est pas le cas pour une transition du premier ordre. Les résultats des simulations que nous avons faites pour  $q = 3$  sur  $SP_a(3^2, 8)$  jusqu'à la septième étape d'itération permettent d'affirmer que la transition est du second ordre. De plus, les maxima de susceptibilité suivent une loi de puissance qui permet de calculer  $\gamma/\nu$  avec une bonne précision. On est donc capable de

distinguer la classe d'universalité d'Ising ( $\gamma/\nu = 1.732(4)$ ) de celle du modèle de Potts à trois états ( $\gamma/\nu = 1.701(3)$ ). Il s'avère que le cumulants de Binder et les maxima des dérivées logarithmiques du paramètre d'ordre sont affectés par des corrections d'échelle plus importantes que pour le modèle d'Ising; il est difficile de donner une estimation précise de la température critique. Cependant, les simulations réalisées dans la région critique permettent de montrer que la valeur de  $\gamma/\nu$  et la borne inférieure de  $\beta/\nu$  sont compatibles avec la relation d'hyperscaling faisant intervenir la dimension de Hausdorff. Les valeurs des exposants critiques que nous avons obtenus ne peuvent pas être comparées à celles obtenues par Bin, car les spins ne sont pas placés de la même façon.

Une meilleure compréhension du comportement du modèle de Potts sur les fractals nécessite l'étude de valeurs de  $q$  plus élevées pour des dimensions fractales inférieures à 2 et des cas où  $q \geq 3$  pour des dimensions fractales comprises entre 2 et 3. Aharony et Asikainen [3] ont récemment souligné l'effet des corrections d'échelle dans l'analyse des amas de Potts pour le cas bidimensionnel invariant par translation lorsque  $q$  s'approche de la valeur  $q_c(2) = 4$ . On s'attend aussi à une augmentation de l'effet des corrections d'échelle lorsque  $q$  augmente dans le cas des fractals; cela devrait rendre de plus en plus difficile une étude quantitative des transitions du second ordre pour de plus grandes valeurs de  $q$ . Par ailleurs, si la transition est du premier ordre, les méthodes de simulation se heurtent à de nouvelles difficultés liées au fait que la distribution de probabilité de l'énergie présente un double pic au voisinage de la transition : Dans ces conditions, un échantillonnage canonique des configurations selon le facteur de Boltzmann défavorise les configurations dans lesquelles les deux phases coexistent; cela est lié à l'existence d'une énergie libre d'interface entre la phase ordonnée et la phase désordonnée. Par ailleurs, les algorithmes de "clusters" n'échantillonnent pas correctement l'espace des phases dans ces conditions (l'existence de métastabilités peut conduire à des estimations fausses des moyennes canoniques). La simulation de telles transition sur des réseaux de taille finie  $L$  se heurte donc à des difficultés de nature totalement différente du ralentissement critique rencontré dans les transitions du second ordre : Le paramètre pertinent n'est pas ici un temps d'autocorrélation, mais le temps  $\tau^t$  nécessaire pour passer d'un pic à l'autre. Or  $\tau^t$  croît avec  $L$  au moins aussi vite que  $\exp(F^S L^{d-1})$ , où  $d$  est la dimension d'espace et  $F^S > 0$

l'énergie libre interfaciale par unité d'aire. Un algorithme, dit multicanonique, permettant d'échantillonner correctement les états où coexistent les deux phases a été proposé par Berg et Neuhaus [13] en 1992. Ne connaissant pas à priori l'ordre des transitions j'ai décidé en Septembre 2003 d'entreprendre une étude plus systématique de l'étude du modèle de Potts à  $q$  états sur des fractals en optant pour un algorithme proposé par Wang et Landau [104] en 2001 ; il permet de calculer directement la densité d'états ; on en trouvera une description dans l'annexe 3. Dans le cas où la transition s'avère être du second ordre, cet algorithme ne dispense cependant pas de simulations canoniques supplémentaires utilisant des algorithmes de clusters si on veut étudier précisément le comportement critique, car les très grandes tailles lui sont inaccessibles.

# Chapitre 6

## Percolation

Le cas  $q = 1$  du modèle de Potts présente un intérêt particulier pour étudier l'effet du désordre fractal structurel sur les phénomènes critiques, puisque seul subsiste l'aspect géométrique ; le paramètre de contrôle n'est plus la température mais la probabilité d'occupation  $p$ , et le problème à résoudre est celui de la percolation. La grandeur fondamentale à laquelle on s'intéresse est donc la distribution de taille des amas, définie comme le nombre moyen par site  $n_s(p)$  d'amas comportant  $s$  sites. Dans la théorie standard de la percolation [94], le comportement de la longueur de corrélation  $\xi$  et celui de  $n_s(p)$  sont étroitement liés, puisque  $\xi$  peut être défini à partir d'une moyenne des carrés des rayons de giration des amas sur toutes les tailles  $s$ . Dans l'hypothèse d'une transition de percolation à une valeur  $p_c$  de la probabilité d'occupation, la longueur de corrélation diverge comme  $\xi \sim |p - p_c|^{-\nu}$ . Le paramètre d'ordre habituel de la transition est la probabilité  $P(p)$  qu'un site appartienne à l'amas de percolation ; on désigne par  $\Pi(p)$  la probabilité d'apparition d'un amas de percolation et le moment d'ordre  $j$  de la distribution de taille des amas est  $m_j(p) = \sum_s s^j n_s(p)$ , où les amas de percolation sont exclus de la somme.

Désignant par  $M_j(L, p)$  les moments d'ordre  $j$  de la distribution de taille des amas sur un réseau fini de taille  $L$  occupé avec une probabilité  $p$ , l'analyse en tailles finie des moments repose sur l'hypothèse que leur comportement dans la région critique dépend du rapport  $L/\xi$  entre la taille du système et la longueur de corrélation via des fonctions d'échelles notées  $\mathcal{F}_j$  :

$$M_j(L, p) = L^{-y_j/\nu} \mathcal{F}_j(|p - p_c| L^{1/\nu}) \quad (6.0.1)$$

Si le moment dans la limite infinie  $m_j(p)$  diverge comme  $m_j \sim |p - p_c|^{y_j}$ , la fonction  $\mathcal{F}_j$  présente un maximum lorsque son argument prend une valeur fixe notée  $x_j^*$ . Les maxima des moments suivent donc des lois de puissance de la forme  $M_j^{\max}(L) \sim L^{-y_j/\nu}$ , et les positions des pics sont données par la relation  $p_c^j(L) = p_c + x_j^* L^{-1/\nu}$ . Une étude statistique de la distribution de taille des amas nécessite tout d'abord l'identification des amas construits sur un tapis de Sierpinski  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$  où les sites sont occupés au hasard avec une probabilité  $p$ ; cela peut être fait de manière très efficace par un balayage unique du réseau, à l'aide de l'algorithme de Hoshen-Kopelman [50]. Comme les seuils de percolation ne sont pas connus dans le cas des fractals, il est indispensable de pouvoir calculer le comportement des grandeurs  $M_j(L, p)$ ,  $P(p)$ , et  $\Pi(p)$  sur un intervalle de probabilité d'occupation de largeur suffisante. Aucun équivalent de la méthode des histogrammes ne peut être utilisé dans le cas de la percolation, puisque une simulation faite selon un échantillonnage simple pour une probabilité d'occupation  $p$  fixée ne donne aucun accès à ce qui se passe au voisinage de  $p$ . J'ai donc adapté un algorithme proposé par Newman et Ziff [79] qui permet de modifier l'identification initiale des amas réalisée par la méthode de Hoshen-Kopelman sans rebalayer le réseau lorsqu'on rajoute aléatoirement des sites; cet algorithme, décrit dans l'annexe 4, permet une économie de temps de calcul considérable, grâce à laquelle j'ai pu étudier  $SP_a(3^2, 8, k)$  jusqu'à la septième étape d'itération et  $SP_a(4^2, 12, k)$  jusqu'à la cinquième. Lorsque  $j > 2$ , les moments présentent un pic  $M_j^{\max}(L)$  pour une probabilité d'occupation  $p_c^j(L)$ . Les résultats des simulations (pour  $j$  égal à 2, 3 et 4) montrent que les corrections d'échelle n'affectent pas le comportement de  $M_j^{\max}(L)$  avec la taille, puisqu'il suit des lois de la forme  $M_j^{\max}(L) \sim L^{-y_j/\nu}$  sur plusieurs ordres de grandeur avec une très bonne fiabilité. Par ailleurs, pour un fractal donné, les valeurs des exposants  $y_j/\nu$  suivent une loi d'échelle de type "gap constant" dans laquelle la dimension d'espace est remplacée par la dimension de Hausdorff; cela confirme que la dimension  $d_f$  intervient dans la relation d'hyperscaling. On peut définir une nouvelle

dimension fractale  $d_{fp}$  liée à la transition de percolation :

$$\frac{y_j}{\nu} = d_f - j d_{fp} \quad (6.0.2)$$

$d_{fp}$  n'est autre que la dimension fractale de l'amas de percolation au point critique ; elle vaut 1.8958 dans le cas bidimensionnel standard [94]. Pour  $SP_a(3^2, 8)$  et  $SP_a(4^2, 12)$ , on trouve respectivement  $d_{fp} = 1.828(6)$  et  $d_{fp} = 1.766(6)$ . La différence entre  $d_f$  et  $d_{fp}$  diminue avec  $d_f$ , ce qui montre que la densité de l'amas de percolation augmente lorsqu'on diminue la dimension fractale. Un phénomène analogue a été observé pour la dimension fractale  $d_{fW}$  des amas de Wolff lorsque  $d_f$ , diminue.

Le passage d'une étape d'itération  $k$  du fractal à la précédente peut être considéré comme une renormalisation dans l'espace réel au cours de laquelle l'unité de longueur subit le changement  $L \rightarrow L/l$ . L'hypothèse 6.0.1 impose que les moments se comportent selon les relations suivantes :

$$M_j(L, p) = l^{-y_j/\nu} M_j(L/l, p^*) \quad (6.0.3)$$

$$p - p_c^j(L) = l^{-1/\nu} (p^* - p_c^j(L/l)) \quad (6.0.4)$$

La figure 6.1 montre les invariances d'échelle des moments  $M_2$  obtenues selon les relations ci dessus pour  $SP_a(3^2, 8)$  aux cinquième, sixième et septième étapes de la structure. L'optimisation des collapsés dans la région critique donne  $1/\nu = 0.56(1)$  pour  $SP_a(3^2, 8)$ , alors qu'on a obtenu  $1/\nu = 0.40(1)$  pour  $SP_a(4^2, 12)$  entre les quatrième et cinquième étape d'itération. Les petites tailles sont sujettes à des corrections d'échelle d'autant plus importantes qu'on s'éloigne des pics. On retiendra que les valeurs de  $\nu$  montrent que la transition de percolation, dont la largeur se comporte comme  $L^{-1/\nu}$ , devient de plus en plus étroite (pour cette famille de fractals) au fur et à mesure qu'on se rapproche de la dimension  $d = 1$ , comme dans le cas des transitions ferromagnétiques. Par ailleurs, lorsque  $d_f$  diminue, la singularité associée à la taille moyenne des amas  $\gamma = -y_2$  augmente, alors que la singularité du paramètre d'ordre  $\beta = y_1$  diminue.

Cependant, les positions des pics ne suivent pas la relation  $p_c^j(L) = p_c + x_j^* L^{-1/\nu}$  que prévoit l'analyse en tailles finies. Le fait que le seuil de percolation dépende du nombre de coordination dans le cas des réseaux invariants par translation, et que la convergence

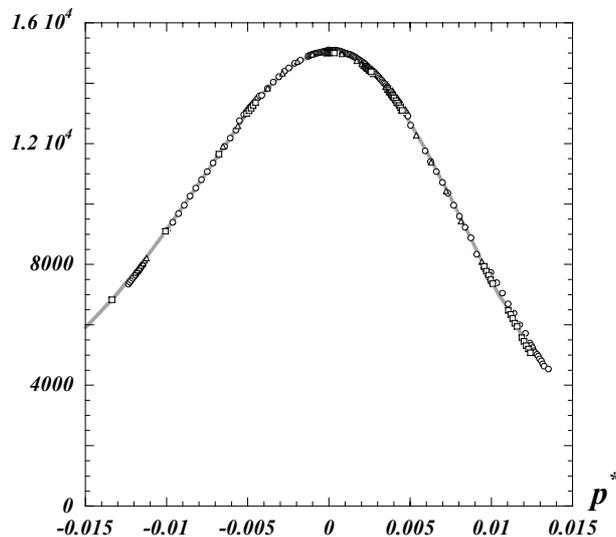


FIG. 6.1 – Invariance d'échelle des moments  $M_2(L, p)$  selon les relations 6.0.3 et 6.0.4 aux étapes 5, 6, et 7 de la structure  $SP_a(3^2, 8)$ , avec  $1/\nu = 0.56$ .

vers la limite thermodynamique s'accompagne dans le cas des fractals d'une convergence du nombre moyen de premiers voisins  $z_a(l^2, N_{oc}, k)$  suggère l'hypothèse suivante : La contribution topologique des corrections d'échelle, déjà évoquée pour les transitions ferromagnétiques, peut être incorporée dans l'argument des fonctions d'échelle via un seuil "effectif" ( $p_c + aL^{-\omega}$ ) (où  $\omega > 0$ ) qui remplace  $p_c$  dans les relations d'homogénéité. Dans ces conditions, le comportement de  $p_c^j(L)$  en fonction de  $L^{-1/\nu}$  présente une courbure (pourvu que  $\omega \neq 1/\nu$ ), puisque les positions des pics se comportent comme :

$$p_c^j(L) = (p_c + aL^{-\omega}) + x_j^* L^{-1/\nu} \quad (6.0.5)$$

On retrouve les lois d'échelle à la limite thermodynamique si et seulement si  $\omega > 1/\nu$ . Notons que les invariances d'échelle des moments décrits ci-dessus ne sont pas affectés lorsqu'on remplace  $p_c$  par  $(p_c + aL^{-\omega})$  dans la relation (6.0.1); le terme  $aL^{-\omega}$  disparaît car ce sont des écarts aux positions des pics qui interviennent. De plus, l'hypothèse 6.0.5

permet de décrire le comportement de  $\Pi_L(p)$  avec la taille que l'on peut observer sur la figure 6.2; notons qu'un comportement analogue a été observé par Michel Perreau et al. [87] dans le cas de tapis de Sierpinski aléatoires. Si  $\Pi_L(p)$  se comporte comme une fonction de  $(p - p_c + aL^{-\omega}) L^{1/\nu}$ , on comprend facilement que  $\Pi_L(p_c)$  dépende de  $L$ , contrairement à ce que prévoit l'analyse en tailles finies standard, et que les points d'intersection entre une étape et la suivante convergent à la manière des cumulants de Binder pour les transitions ferromagnétiques. Notons enfin que les bornes supérieures  $p_c < 0.7586$  et  $p_c < 0.8638$  qu'on peut donner aux seuils en percolation de sites pour  $SP_a(3^2, 8)$  et  $SP_a(4^2, 12)$  placent les fractals étudiés très loin de la loi de S. Galam et A. Mauger pour les réseaux invariants par translation [38, 39]. Les données dont je dispose à ce jour ne permettent pas la vérification numérique de la conjecture 6.0.5 ni un calcul fiable de l'exposant de corrections d'échelle  $\omega$ ; cela nécessiterait en effet des calculs sur au moins deux étapes d'itération supplémentaires. La vérification dans le cas des transitions magnétiques d'une hypothèse analogue à 6.0.5 mais avec la température comme paramètre de contrôle se heurte aux mêmes difficultés.

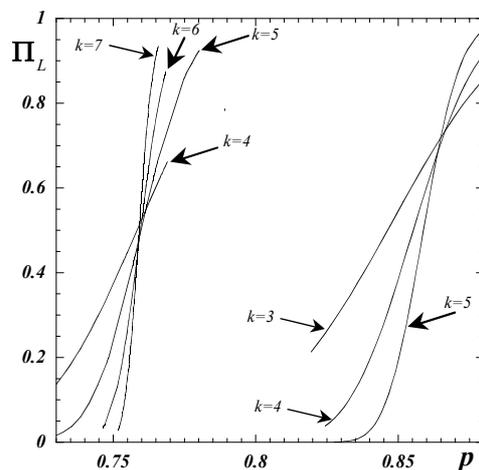


FIG. 6.2 – Probabilité  $\Pi_L(p)$  d'apparition d'un amas de percolation en fonction de la probabilité d'occupation  $p$ , pour  $SP_a(3^2, 8)$  (à gauche) et  $SP_a(4^2, 12)$ .

# Chapitre 7

## Désordre orientationnel dans les cristaux moléculaires

De 1996 à 1998, j'ai travaillé sur les propriétés structurales liées au désordre orientationnel dans les cristaux moléculaires en collaboration avec Daniel André, professeur à l'Université d'Evry, et Henri Szwarc directeur de recherche au Laboratoire de Chimie Physique des Matériaux Amorphes de l'Université d'Orsay. Dans la famille des composés hétérocycliques aromatiques à cinq sites (pyrrole, furanne, thiophène,..) le thiophène présente un diagramme de phase très riche sur lequel le groupe de H. Szwarc avait longuement travaillé, à l'aide des méthodes de diffraction des rayons X, RMN et calorimétrie [6, 7, 8]. On s'attend à ce que la géométrie de la molécule de thiophène, en particulier la possibilité de rotations autour d'un axe perpendiculaire à son plan et sa symétrie pseudo-pentagonale jouent un rôle important dans le désordre orientationnel et l'existence de phases incommensurables. Les questions plus fondamentales qui se posaient alors étaient de savoir comment des molécules qui ne présentent pas une symétrie compatible avec les symétries cristallographiques se réorientent aux sites d'un réseau cristallin, et quel rôle joue la dynamique réorientationnelle dans les transitions vers les phases incommensurables. Les méthodes de simulation numérique sont bien adaptées pour apporter des éléments de réponse à ces questions et permettre une compréhension des phénomènes mis en jeu. Nous avons commencé notre étude par la phase *I*, qui cristallise dans le système orthorhombique car le problème à résoudre pouvait être cerné de manière précise. Cette

phase est stable entre 170.7 K et 235.02 K sous la pression atmosphérique, et se trouve juste en-dessous de la phase liquide. Il s'agit d'une phase plastique à laquelle les résultats de diffraction des rayons X réalisés par André et al. [6] et Lee et al. [62] attribuent le groupe d'espace  $Cmca$  (4 molécules par maille élémentaire). La plasticité est attribuée aux mouvements de rotation rapide ( $\simeq 10^6 Hz$  d'après les données RMN) des molécules de thiophène autour de leur axe de pseudo symétrie d'ordre 5 et au désordre orientationnel qui en résulte. La molécule de thiophène se trouvant dans un site de symétrie  $2/m$ , le nombre d'orientations moléculaires possibles doit être un multiple de 4. La dynamique du désordre orientationnel est liée à des sauts des molécules entre ces différentes orientations. La première question à laquelle la simulation numérique devait apporter une réponse est de savoir si le nombre d'orientations différentes est 8 (d'après Lee) ou si la pseudo-symétrie d'ordre 5 joue un rôle portant ce nombre à 20 (selon André et al.). L'énergie cinétique moyenne de rotation des molécules étant  $10^9$  fois plus faible que l'énergie moyenne de cohésion par molécule ( $6.2 \times 10^{-20} J$ ), nous avons décidé d'opter pour une méthode de simulation de type Monte-Carlo. J'ai donc écrit dans un premier temps un code de calcul Monte-Carlo selon l'algorithme de Métropolis dans l'ensemble canonique  $NVT$ . Les mouvements intramoléculaires sont négligés (approximation des molécules rigides) et le champ de forces intermoléculaire est décrit par un modèle atome-atome dû à Jorgensen [5],[47] : Chaque atome d'une molécule donnée interagit avec tous les atomes des autres molécules de la boîte de simulation (et ceux de leurs images par des conditions aux limites périodiques) via un champ de forces décrit par un potentiel isotrope à deux corps. La portée de ces potentiels doit être tronquée à la moitié de la plus petite taille de la boîte de simulation. Partant d'une configuration d'énergie  $E_i$ , la transition vers un état d'énergie  $E_f$ , se fait selon la probabilité  $\min(1, \exp((E_i - E_f)/k_B T))$  où la configuration d'énergie  $E_f$  est construite soit par une translation de la molécule tirée au sort, soit par une rotation. J'ai tout d'abord validé ce code de calcul en retrouvant les résultats que Rolland Pellenq avait obtenus pour la métatoluidine par la même méthode, puis une partie de ceux qu'Anne Boutin avait obtenus par dynamique moléculaire dans le cas de la phase plastique de l'hexafluorure de soufre [24, 25] ; dans ce dernier cas, un potentiel très fiable a été proposé par G. S. Pawley [84]. Pendant l'année 1997, j'ai effec-

tué de nombreuses simulations sur le thiophène autour de 183 K (nettement au-dessous de la température de fusion) en partant de configurations de départ différentes et pour plusieurs champs de force disponibles dans la littérature [34, 70, 113, 85] (Lennard Jones, Buckingham,...); malgré des valeurs correctes des énergies de cohésion, les résultats de ces simulations n'étaient pas satisfaisants du point de vue structurel, car elles conduisaient à un effondrement du paramètre d'ordre translationnel indiquant une transition vers un état liquide. L'amélioration du champ de forces par la prise en compte du moment dipolaire de la molécule de thiophène semblait donc indispensable : Le moment dipolaire était traité comme deux charges fictives opposées placées l'une sur l'atome de soufre, l'autre au milieu de la liaison  $C - C$  par laquelle passe le plan de symétrie de la molécule. Puisque la taille finie de la boîte de simulation impose de tronquer la portée des potentiels, on doit traiter les interactions coulombiennes à l'aide d'une méthode permettant de s'affranchir (au moins en partie) de cette troncature. J'ai donc repris le code de calcul afin d'y intégrer la procédure des sommations d'Ewald [5]. Après validation de ce nouveau code dans un cas connu, j'ai réalisé pendant l'année 1998 de nombreuses simulations, sans observer d'amélioration nette du point de vue des grandeurs structurales par rapport au cas où on néglige le moment dipolaire.

L'ensemble des résultats des simulations Monte-Carlo que j'ai menées sur les cristaux moléculaires suggère fortement que ce sont les champs de forces que j'ai utilisés pour décrire le thiophène en phase condensée qui sont en cause. Nous avons donc pris contact avec des spécialistes des méthodes ab initio de chimie quantique afin de calculer ces champs de forces de manière précise; cela nécessite un travail d'une grande ampleur qui n'a pas abouti. J'ai donc décidé de suspendre l'étude des propriétés structurales du thiophène cristallin par simulation Monte-Carlo au début de l'année 1999 sans avoir rien publié sur ce sujet. Aucun article relatif à la structure du thiophène cristallin n'est à ma connaissance paru depuis, ce qui laisse ouvertes les questions posées au début de ce chapitre.

# Perspectives

Bien qu'il y ait de grandes différences entre les phénomènes critiques sur des fractals et sur des réseaux invariants par translation, la renormalisation et l'hypothèse d'homogénéité restent pertinents pour les décrire. Il faut souligner que l'amélioration des méthodes numériques utilisées dans l'étude des transitions de phase, encore plus que l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, a été déterminante dans le calcul précis des exposants critiques, la compréhension de la convergence vers la limite thermodynamique et l'obtention de l'ensemble des résultats nouveaux que j'ai présentés dans ce mémoire.

Un des axes de recherche les plus intéressants qui soit en continuité directe avec les transitions de phase dans les fractals est l'étude du diagramme de phase du modèle de Potts à  $q$  états; je poursuis actuellement son étude par une méthode de type multi-canonique, avec l'algorithme de Wang-Landau (décrit dans l'annexe 3).

A très court terme, mon intégration au Pôle "Matière et Systèmes Complexes" dans le cadre de la restructuration de la recherche à l'Université Paris 7 me donne l'occasion d'élargir mon champ de recherche et de développer des collaborations à la fois avec des expérimentateurs et des théoriciens. Il ne s'agira plus d'étudier les fractals en tant qu'objets, mais d'utiliser l'expérience théorique que j'ai acquise dans l'étude des milieux désordonnés, des fractals, des lois d'échelle, ainsi que mon expérience de la simulation numérique pour développer les thématiques suivantes :

- a) Transport anormal et chaos et (avec M. Courbage, S. Métens, et P. Nédellec)

L'application de la théorie des systèmes non linéaires à l'étude de la matière condensée s'avère efficace pour décrire les phénomènes de transport et la thermodynamique hors d'équilibre. Parmi les découvertes les plus récentes, on peut citer la fractalité de la distribution de probabilité de l'espace des phases pour une classe de systèmes, la localisation

spatiale de la perturbation associée à l'exposant de Lyapounov maximal, ou l'existence de modes de Lyapounov pour des systèmes de sphères dures. Par ailleurs, dans certaines conditions, le transport anormal peut être relié à l'existence de pièges dynamiques dans l'espace des phases entre lesquels les trajectoires semblent obéir à des processus de Lévy. Des lois d'échelle ont été observées reliant la longueur des vols à la surface de ces pièges. La détermination analytique des exposants associés étant hors de portée, une approche numérique est indispensable. La dynamique chaotique constitue une base microscopique aux phénomènes macroscopiques, et c'est sur le lien entre ces deux aspects que nous allons nous focaliser. La mise en oeuvre de simulations de dynamique moléculaire pour des systèmes de sphères dures est déjà opérationnelle ; c'est à partir des trajectoires obtenues par dynamique moléculaire qu'on calculera les spectres de Lyapounov et les coefficients de transport.

b) Vieillissement d'une particule Brownienne (avec B. Abou, F. Gallet, et N. Pottier)

L'expérience mise au point par B. Abou et F. Gallet permet de mesurer la diffusion et la mobilité d'une particule Brownienne placée sur un verre colloïdal (suspension de laponite). Il s'agit d'une expérience dont l'intérêt est relié aux aspects fondamentaux de la thermodynamique hors d'équilibre, puisqu'un tel système relaxe lentement vers l'équilibre à des échelles de temps qui permettent d'étudier les effets du vieillissement. Du point de vue théorique, plusieurs classes de modèles ont été proposés pour donner une description microscopique des phénomènes liés au vieillissement : Les plus courants sont les modèles de type "verres de spin" (Edwards-Anderson) et les modèles de "pièges". La modélisation de cette expérience permettra de comprendre les mécanismes microscopiques qui en déterminent les caractéristiques.

# Remerciements

J'exprime ma gratitude à Jean-Claude Lévy, actuel directeur du Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée (LPTMC), où j'ai accompli mon travail de recherche depuis 1991.

Je remercie Frédéric Hébert, Michel Perreau et Pai-Yi Hsiao qui ont directement collaboré avec moi lors de ces travaux de recherche.

Je remercie les chercheurs qui ont contribué à stimuler mes réflexions : Bertrand Berche, The Hung Diep, Abdelwhahab Ghazali, Denis Ledue, Bernard Sapoval,...

Je remercie par ailleurs Jacques le Bourlot, The Hung Diep, Jean-François Gouyet, Jean-Claude Lévy et Pierre Nédellec pour s'être intéressés de plus près à mon travail et avoir accepté de faire partie du jury.

Ce travail comporte des résultats numériques qui ont nécessité une puissance de calcul très importante ; il ont été obtenus en trois lieux :

a) Le Centre de Calcul Recherche du campus de Jussieu (CCR), où entre 10 000 et 20 000 heures de calcul par an ont été consacrées à ces travaux depuis 1996 sur la grappe IBM. Je remercie chaleureusement l'ensemble du personnel du CCR dont le professionnalisme, les compétences et la disponibilité nous ont permis, à moi et à mes étudiants, de mener des campagnes de calcul de façon efficace et sûre. Je remercie spécialement Michel Krawczyk avec lequel j'ai travaillé à optimiser mes codes de calcul.

b) L'Institut du Développement et des Ressources en Informatique Scientifique (IDRIS) du campus d'Orsay où entre 5 000 et 10 000 heures de calcul par an ont été allouées à ces travaux depuis 1998 (projet N° 1 186) sur la grappe IBM RS6000. Je remercie l'ensemble du personnel de l'IDRIS pour son efficacité et sa fiabilité dans le fonctionnement du centre et le soutien technique apporté.

c) Le Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée où des calculs sont effectués sous LINUX sur une machine de type biprocesseur (2X800 MHz) et deux stations de travail depuis 1999. Je remercie le LPTMC d'avoir mis ces moyens à la disposition de mon projet.

# Annexe 1 : Transformation de Fortuin-Kasteleyn et algorithme de Wolff

Lors de la transformation de Fortuin-Kasteleyn [37], on remplace chaque paire de spins en interaction  $\langle \sigma_i, \sigma_j \rangle$  dans le modèle de Potts par un lien du modèle de percolation qui ne peut alors se trouver que dans deux états possibles, l'un dit actif, l'autre dit inactif. L'état d'un lien est choisi aléatoirement, avec la probabilité pour qu'il soit actif égale à :

$$P(\sigma_i, \sigma_j) = 1 - \exp\left(\frac{-J_P \delta(\sigma_i, \sigma_j)}{k_B T}\right). \quad (1.1)$$

Les spins d'un amas au sens de Fortuin-Kasteleyn sont dans le même état, puisqu'il ne peut y avoir de liens actifs qu'entre ceux-ci. La fonction de partition pour le modèle de Potts à  $q$  états peut s'écrire :

$$Z = \text{Tr}_{\{\sigma\}} e^{-\beta_B \mathcal{H}}, \quad (1.2)$$

où  $\beta_B = 1/(k_B T)$  est l'inverse de la température et  $\mathcal{H} = -J_P \sum_{\langle i,j \rangle} (\delta(\sigma_i, \sigma_j) - 1)$  est le Hamiltonien de Potts à une constante additive près. En isolant une paire de spins  $\langle \sigma_l, \sigma_m \rangle$  en interaction, on définit alors un Hamiltonien  $\mathcal{H}_{\langle l,m \rangle}$  partiel du système duquel est exclue l'interaction entre les spins  $\sigma_l$  et  $\sigma_m$  :

$$\mathcal{H}_{\langle l,m \rangle} = -J_P \sum_{\langle i,j \rangle \neq \langle l,m \rangle} (\delta(\sigma_i, \sigma_j) - 1) = \mathcal{H} + J_P (\delta(\sigma_l, \sigma_m) - 1). \quad (1.3)$$

En appliquant l'identité  $e^{K(\delta(\sigma_l, \sigma_m) - 1)} = (1 - e^{-K})\delta(\sigma_l, \sigma_m) + e^{-K}$ , la fonction de partition  $Z$  peut être réécrite :

$$Z = (1 - e^{-\beta_B J_P}) \text{Tr}_{\{\sigma\}} [\delta(\sigma_l, \sigma_m) \exp(-\beta_B \mathcal{H}_{\langle l, m \rangle})] + e^{-\beta_B J_P} \text{Tr}_{\{\sigma\}} \exp(-\beta_B \mathcal{H}_{\langle l, m \rangle}) \quad (1.4)$$

$$Z = (1 - e^{-\beta_B J_P}) Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{mem}} + e^{-\beta_B J_P} Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{ind}} \quad (1.5)$$

avec

$$Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{mem}} = \text{Tr}_{\{\sigma\}} [\delta(\sigma_l, \sigma_m) \exp(-\beta_B \mathcal{H}_{\langle l, m \rangle})] , \quad (1.6)$$

$$Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{ind}} = \text{Tr}_{\{\sigma\}} \exp(-\beta_B \mathcal{H}_{\langle l, m \rangle}) . \quad (1.7)$$

$Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{ind}}$  est la fonction de partition de laquelle on a retiré l'interaction entre les spins  $\sigma_l$  et  $\sigma_m$  ;  $Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{mem}}$  est la fonction de partition sans considérer l'interaction entre les spins  $\sigma_l$  et  $\sigma_m$  avec, en même temps,  $\sigma_l$  et  $\sigma_m$  dans le même état de spin. On peut interpréter le terme  $(1 - e^{-\beta_B J_P}) Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{mem}}$  comme la fonction de partition d'un système mélangé où l'interaction du modèle de Potts entre les spins  $\sigma_l$  et  $\sigma_m$  de même état est remplacée par un lien actif du modèle de percolation avec la probabilité pour qu'un lien soit actif égale à  $1 - e^{-\beta_B J_P}$ . Le terme  $e^{-\beta_B J_P} Z_{\langle l, m \rangle}^{\text{ind}}$  peut être considéré comme la fonction de partition où l'interaction  $\langle \sigma_l, \sigma_m \rangle$  est remplacée par un lien inactif avec la probabilité égale à  $e^{-\beta_B J_P}$ . En continuant de remplacer toutes les autres paires de spins en interaction du modèle de Potts à  $q$  états par les liens du modèle de percolation, on peut écrire  $Z$  sous la même forme que la fonction de partition du modèle de percolation :

$$Z = \sum_{\{\text{liens}\}} p^{N_{\text{act}}} (1 - p)^{N_{\text{inact}}} q^{N_{\text{amas}}} , \quad (1.8)$$

où  $p = 1 - e^{-\beta_B J_P}$  est la probabilité pour qu'un lien soit actif. Etant donnée une configuration de liens,  $N_{\text{act}}$ ,  $N_{\text{inact}}$  et  $N_{\text{amas}}$  sont les nombres de liens actifs, de liens inactifs et d'amas de Fortuin-Kasteleyn, respectivement. La sommation est faite en parcourant toutes les configurations de liens  $\{\text{liens}\}$ . L'algorithme de Wolff [108] exploite la transformation de Fortuin-Kasteleyn, et s'écrit de la façon suivante pour le modèle de Potts à  $q$  états :

W.1 Un site occupé sur le réseau est choisi au hasard.

W.2 Selon la configuration de spins du réseau et à partir du site choisi, on construit un amas de Fortuin-Kasteleyn en assignant les états de lien entre le site choisi et ses premiers voisins avec la probabilité qu'un lien soit actif décrite par l'équation (1.1). Si l'état de lien est activé, le site voisin est inclus comme un nouveau site de l'amas. Ce processus de construction de l'amas, en lui ajoutant des sites de proche en proche, est poursuivi jusqu'à ce qu'aucun nouveau site ne puisse être inclus dans celui-ci.

W.3 On renouvelle la configuration de spins du modèle de Potts en assignant un nouvel état de spin (tiré au hasard entre 1 et  $q$ ) à tous les sites de l'amas construit dans l'étape W.2.

W.4 On retourne à l'étape W.1.

Dans le cas du modèle d'Ising, la probabilité pour qu'un lien soit actif est :

$$P(\sigma_i, \sigma_j) = 1 - \exp\left(\frac{-2J_{\text{Is}}\delta(\sigma_i, \sigma_j)}{k_B T}\right), \quad (1.9)$$

car un système d'Ising avec un couplage  $J_{\text{Is}}$  se comporte comme un système de Potts à 2 états avec un couplage  $J_{\text{P}} = 2J_{\text{Is}}$ .

La procédure de simulation Monte-Carlo dans l'ensemble canonique selon l'algorithme de Wolff va générer une chaîne markovienne de configurations, ce qui, en termes de probabilités de transition, permet de définir une cinétique stochastique. Ces probabilités de transition doivent satisfaire deux critères :

a) Le critère d'accessibilité, lié à l'ergodicité : Le système étant dans un état donné, il doit être possible de le faire évoluer vers n'importe lequel de ses états accessibles, pourvu que l'on confectionne une chaîne de Markov suffisamment longue.

b) Le critère de microréversibilité (ou bilan détaillé). Un chapitre entier de ce mémoire étant consacré aux aspects cinétiques et à la distribution de taille des amas, il est intéressant de se pencher plus en détail sur la manière dont ce critère est satisfait.

Soit  $\{\sigma'\}$  une configuration de spins générée à partir de la configuration précédente  $\{\sigma\}$  lors d'une étape (un pas Monte-Carlo) complète de l'algorithme de Wolff. On note  $C_{FK}$

l'amas de Fortuin-Kasteleyn construit pendant cette étape et  $\mathcal{L}_{C_{FK}}$  l'ensemble d'états de liens entre les sites de cet amas. Il est très important de remarquer qu'il existe en général plusieurs  $\mathcal{L}_{C_{FK}}$  qui correspondent au même amas  $C_{FK}$ . Les états de liens entre les sites de  $C_{FK}$  et les sites n'appartenant pas à  $C_{FK}$  sur ses frontières (internes ou externes) sont inactifs. Par contre, les états de liens entre les sites de  $C_{FK}$  n'ont pas forcément été activés au cours du processus de construction de cet amas (voir Fig. ??). La probabilité de transition de  $\{\sigma\}$  à  $\{\sigma'\}$  doit donc s'écrire en tenant compte de toutes ces possibilités, c'est-à-dire en sommant sur l'ensemble des ensembles de liens possibles, noté  $\{\mathcal{L}_{C_{FK}}\}$  :

$$W(\{\sigma\} \rightarrow \{\sigma'\}) = \sum_{\{\mathcal{L}_{C_{FK}}\}} \left[ \prod_{\zeta \in \mathcal{L}_{C_{FK}}} p(\zeta) \times \prod_{\langle i,j \rangle, i \in C_{FK}, j \notin C_{FK}} (1 - P(\sigma_i, \sigma_j)) \right], \quad (1.10)$$

où  $\zeta$  est un état de lien tel que  $p(\zeta)$  est égal à  $1 - \exp(-\beta_B J_P)$  si  $\zeta$  décrit un état actif. De la même manière, le processus inverse qui générerait  $\{\sigma\}$  à partir de  $\{\sigma'\}$  en exécutant une étape de l'algorithme de Wolff construisant le même amas  $C_{FK}$  serait associé à la probabilité de transition de  $\{\sigma'\}$  à  $\{\sigma\}$  suivante :

$$W(\{\sigma'\} \rightarrow \{\sigma\}) = \sum_{\{\mathcal{L}_{C_{FK}}\}} \left[ \prod_{\zeta \in \mathcal{L}_{C_{FK}}} p(\zeta) \times \prod_{\langle i,j \rangle, i \in C_{FK}, j \notin C_{FK}} (1 - P(\sigma'_i, \sigma'_j)) \right]. \quad (1.11)$$

On trouve que :

$$\frac{W(\{\sigma\} \rightarrow \{\sigma'\})}{W(\{\sigma'\} \rightarrow \{\sigma\})} = \prod_{\langle i,j \rangle, i \in C_{FK}, j \notin C_{FK}} \frac{1 - P(\sigma_i, \sigma_j)}{1 - P(\sigma'_i, \sigma'_j)} \quad (1.12)$$

en notant  $E_{\{\sigma\}}$  et  $E_{\{\sigma'\}}$  les énergies totales du système associées aux configurations de spins  $\{\sigma\}$  et  $\{\sigma'\}$ , le bilan détaillé s'écrit sous sa forme habituelle :

$$\frac{W(\{\sigma\} \rightarrow \{\sigma'\})}{W(\{\sigma'\} \rightarrow \{\sigma\})} = \exp\left(\frac{E_{\{\sigma\}} - E_{\{\sigma'\}}}{k_B T}\right) \quad (1.13)$$

# Annexe 2 : Méthode des histogrammes

On désigne par  $P_T(E, M)$  la probabilité pour qu'un système de  $N$  spins d'Ising à la température  $T$  et en champ extérieur nul ait à la fois une valeur de l'énergie totale égale à  $E$  et une valeur de l'aimantation totale égale à  $M$ . Elle s'écrit :

$$P_T(E, M) = \Omega(E, M) \frac{\exp(-E/(k_B T))}{Z(T)}, \quad (2.14)$$

$\Omega(E, M)$ , qui est indépendant de  $T$ , est un facteur de dégénérescence égal au nombre d'états du système d'énergie totale  $E$  et d'aimantation  $M$ . La fonction de partition est  $Z(T) = \sum_{(E', M')} \Omega(E', M') \exp(-\beta_B E')$ , où  $\beta_B = 1/(k_B T)$ . On note que  $P_T(E, M)$  est une densité d'états bidimensionnelle normalisée et pondérée par le facteur de Boltzmann. L'idée centrale de la méthode des histogrammes est que la connaissance complète de  $\Omega(E, M)$  permet de calculer  $P_T(E, M)$  quelle que soit la température. A partir d'une simulation Monte-Carlo de  $N_{MC}$  pas à la température  $T_0$  dans l'ensemble canonique, on construit un histogramme bidimensionnel  $\tilde{H}_{T_0}(E, M)$ . Lorsque  $N_{MC}$  tend vers l'infini, la valeur de  $\tilde{H}_{T_0}(E, M)/N_{MC}$  converge vers  $P_{T_0}(E, M)$ . A ce moment-là,  $\tilde{H}_{T_0}(E, M)$  contient la totalité de l'information sur la distribution d'états  $\{E, M\}$  du système et on le note :  $H_{T_0}(E, M)$ . Si  $N_{MC}$  est fini mais "assez grand",  $\tilde{P}_{T_0}(E, M) = \tilde{H}_{T_0}(E, M)/N_{MC}$  doit être très proche de  $P_{T_0}(E, M)$ .  $\Omega(E, M)$  peut donc être estimé par :

$$\Omega(E, M) \approx \frac{\tilde{H}_{T_0}(E, M)}{N_{MC}} Z(T_0) \exp(\beta_{B_0} E). \quad (2.15)$$

Où on a posé  $\beta_{B_0} = 1/(k_B T_0)$ .

Comme la distribution de probabilité à une température  $T$  différente de celle de la simulation peut s'écrire exactement en fonction de  $H_{T_0}(E, M)$ , on peut en donner une

estimation en fonction de  $\tilde{H}_{T_0}(E, M)$  :

$$\begin{aligned} P_T(E, M) &= \frac{H_{T_0}(E, M) \exp[(\beta_{B_0} - \beta_B)E]}{\sum_{(E', M')} H_{T_0}(E', M') \exp[(\beta_{B_0} - \beta_B)E']} \\ &\approx \frac{\tilde{H}_{T_0}(E, M) \exp[(\beta_{B_0} - \beta_B)E]}{\sum_{(E', M')} \tilde{H}_{T_0}(E', M') \exp[(\beta_{B_0} - \beta_B)E']} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Etant donnée une grandeur physique  $\mathcal{K}(E, M)$ , la moyenne thermodynamique de  $\mathcal{K}$  à la température  $T$  peut être calculée par :

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{K} \rangle_T &= \sum_{(E, M)} \mathcal{K}(E, M) P_T(E, M) \\ &\approx \frac{\sum_{(E, M)} \mathcal{K}(E, M) \tilde{H}_{T_0}(E, M) \exp[(\beta_{B_0} - \beta_B)E]}{\sum_{(E, M)} \tilde{H}_{T_0}(E, M) \exp[(\beta_{B_0} - \beta_B)E]} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Le calcul de  $\langle \mathcal{K} \rangle_T$  par cette méthode dans le cas le plus général se heurte à la nécessité de stocker l'histogramme bidimensionnel  $\tilde{H}_{T_0}(E, M)$ . Compte tenu du fait que le nombre d'états accessibles est  $2^N = \exp(L^{d_f} \ln 2)$  pour un réseau de Sierpinski de dimension fractale  $d_f$  et de côté  $L$ , la mémoire nécessaire devient très vite gigantesque. Cependant, lorsque  $\mathcal{K}(E, M)$  s'écrit sous la forme d'un produit  $\mathcal{K}(E, M) = \mathcal{F}(E) \mathcal{G}(M)$  où  $\mathcal{F}(E)$  est une fonction de  $E$  et  $\mathcal{G}(M)$  une fonction de  $M$ , la moyenne thermodynamique de  $\mathcal{K}$  à la température  $T$  peut être obtenue en sommant sur la seule variable  $E$  :

$$\langle \mathcal{K} \rangle_T = \frac{\sum_E \mathcal{F}(E) \cdot \langle \mathcal{G}(M) \rangle_{T_0}(E) \cdot H_{T_0}(E) \cdot \exp[(\beta_0 - \beta_B)E]}{\sum_E H_{T_0}(E) \exp[(\beta_0 - \beta_B)E]}, \quad (2.18)$$

où  $H_{T_0}(E)$  est l'histogramme monodimensionnel en énergie et  $\langle \mathcal{G}(M) \rangle_{T_0}(E)$  désigne la moyenne de la grandeur  $\mathcal{G}(M)$  lorsque l'énergie est égale à  $E$  et la température égale à  $T_0$  avec  $N_{MC}$  infini.

$$H_{T_0}(E) = \sum_M H_{T_0}(E, M), \quad (2.19)$$

$$\langle \mathcal{G}(M) \rangle_{T_0}(E) = \frac{\sum_M \mathcal{G}(M) H_{T_0}(E, M)}{\sum_M H_{T_0}(E, M)}. \quad (2.20)$$

Comme  $N_{MC}$  est fini, on assimile les estimations  $\tilde{H}_{T_0}(E)$  et  $\langle \widetilde{\mathcal{G}(M)} \rangle_{T_0}(E)$  construites par simulation Monte-Carlo à  $H_{T_0}(E)$  et  $\langle \mathcal{G}(M) \rangle_{T_0}(E)$  dans l'équation (2.18). Dans la pratique, le calcul des grandeurs impliquées dans une analyse en tailles finies impose de construire  $\langle \widetilde{M^n} \rangle_{T_0}(E)$ , pour  $n$  entier compris au sens large entre 1 et 4, en plus de  $\tilde{H}_{T_0}(E)$ .

La largeur de la plage de température  $\Delta T$  autour de  $T_0$  où les estimations sont fiables dépend de la grandeur physique  $\mathcal{K}$ , mais surtout de la taille du système simulé. La raison pour laquelle  $\Delta T$  dépend de la grandeur  $\mathcal{K}$  est la présence du terme  $\langle \mathcal{G}(M) \rangle_{T_0}(E)$  au numérateur de l'équation (2.18), qui déforme les erreurs causées par l'utilisation de  $\langle \widetilde{\mathcal{G}}(M) \rangle_{T_0}(E)$  et  $\widetilde{H}_{T_0}(E)$  à la place de  $\langle \mathcal{G}(M) \rangle_{T_0}(E)$  et  $H_{T_0}(E)$ . Ces erreurs peuvent être considérablement amplifiées par le facteur  $\exp[(\beta_0 - \beta)E]$  lorsque la taille  $L$  du système est grande car l'énergie totale  $E$  augmente avec  $L$ . Une seconde cause de la dépendance de  $\Delta T$  avec la taille  $L$  du système est liée au fait que la distribution d'énergie  $P_{T_0}(E) \simeq \widetilde{H}_{T_0}(E)/N_{MC} \equiv \widetilde{P}_{T_0}(E)$  est d'autant plus piquée que  $L$  augmente.  $P_{T_0}(E)$  présente un pic autour de  $\langle E \rangle_{T_0}$  et décroît exponentiellement des deux côtés. Les erreurs statistiques sur la mesure  $\widetilde{P}_{T_0}(E)$  sont plus grandes dans les queues exponentielles. En fin de compte, la largeur  $\Delta T$  de la plage de fiabilité entourant  $T_0$  décroît lorsque la taille  $L$  du réseau augmente.

# Annexe 3 : Algorithme de Wang-Landau

Cet algorithme est basé sur le fait qu'une marche aléatoire dans l'espace des configurations selon une probabilité proportionnelle à l'inverse de la densité d'états  $g(E)$  ( $g(E)$  désigne en fait le nombre d'états d'énergie  $E$  donnée) produit un histogramme en énergie "plat"; le terme "plat" doit s'entendre au sens où chaque énergie est visitée en moyenne le même nombre de fois, pourvu que la marche aléatoire soit suffisamment longue. Comme  $g(E)$  est à priori inconnu, on fixe son spectre de départ comme étant uniforme, et on l'ajuste itérativement jusqu'à convergence. Dans la pratique, lorsque la taille des réseaux est grande, on est obligé de procéder à plusieurs marches aléatoires limitées chacune à un intervalle d'énergie  $[E_i^0, E_i^0 + \Delta E]$  noté  $i$ ; la densité d'états sur la totalité de l'intervalle d'énergie  $[E_{\min}, E_{\max}]$  accessible au système est alors obtenue en joignant les densités obtenues pour chaque intervalle  $i$ . Il est pour cela nécessaire que deux intervalles successifs  $i$  et  $i + 1$  aient une plage d'énergie en commun afin que l'on puisse réaliser des lissages Gaussiens sur les parties où ils se recouvrent. Dans le cas d'un modèle de Potts à  $q$  états,  $g(E_{\min}) = q$  et la condition de normalisation pour un réseau fractal de taille  $L$ , de dimension fractale  $d_f$  s'écrit :

$$\sum_{E_{\min}}^{E_{\max}} g(E) = \exp(L^{d_f} \cdot \ln q). \quad (2.21)$$

J'ai implémenté l'algorithme de Wang-Landau [104] pour le modèle de Potts à  $q$  états de la manière suivante :

WL.1 On fixe  $\ln(g(E)) = 0$  pour toutes les valeurs de l'énergie accessibles comprises dans

l'intervalle  $[E_i^0, E_i^0 + \Delta E]$ . Les configurations dont l'énergie se trouve hors de cet intervalle seront toujours refusées.

**WL.2** Partant d'une configuration d'énergie  $E_1$ , on tire au hasard un site de spin  $q_1$ , et on génère une configuration d'énergie  $E_2$ , dans laquelle le spin  $q_2$  est tiré au hasard de manière équiprobable parmi les  $q - 1$  valeurs différentes de  $q_1$ . La probabilité de transition de la configuration d'énergie  $E_1$ , vers la configuration d'énergie  $E_2$  est :

$$W_{(1 \rightarrow 2)} = \min(\exp[\ln(g(E_1)) - \ln(g(E_2))], 1) \quad (2.22)$$

**WL.3** On multiplie la densité d'états du niveau  $j$  visité par un facteur de multiplication  $f > 1$ , et on incrémente le canal de l'histogramme associé à ce niveau :

$$\ln(g(E_j)) \rightarrow \ln(g(E_j)) + \ln f \quad (2.23)$$

$$\mathcal{V}(E_j) \rightarrow \mathcal{V}(E_j) + 1 \quad (2.24)$$

**WL.4** Pendant un nombre  $N_{test}$  fixé de pas, on retourne à l'étape WL.2, en prenant pour configuration (1) celle qui vient d'être visitée.

Après  $N_{test}$  pas, on regarde si l'histogramme  $\mathcal{V}$  est plat en calculant :

$$\eta = \frac{1}{\langle \mathcal{V}(E) \rangle} \sum_{E'=E_i^0}^{E'=E_i^0+\Delta E} |\mathcal{V}(E') - \langle \mathcal{V}(E') \rangle| \quad (2.25)$$

Tant que l'histogramme  $\mathcal{V}(E)$  n'est pas "plat" dans l'intervalle  $[E_i^0, E_i^0 + \Delta E]$ , c'est à dire  $\eta > \epsilon$ , on retourne à l'étape WL.2.

Dès que  $\eta \leq \epsilon$  on diminue  $f$ , on réinitialise  $\mathcal{V}(E)$ , et  $\langle \mathcal{V}(E) \rangle$ , puis on incrémente l'histogramme bilan  $\mathcal{V}_{TOT}$  :

$$\ln f \rightarrow \frac{1}{2} \ln f \quad (2.26)$$

$$\mathcal{V}_{TOT}(E) = \mathcal{V}_{TOT}(E) + \mathcal{V}(E), \quad E \in [E_i^0, E_i^0 + \Delta E] \quad (2.27)$$

$$\mathcal{V}(E) = 0, \quad E \in [E_i^0, E_i^0 + \Delta E] \quad (2.28)$$

$$\langle \mathcal{V}(E) \rangle = 0 \quad (2.29)$$

On repart à l'étape WL.2.

Après avoir modifié 25 fois le facteur  $f$ , selon la relation 2.26 on va en WL.5.

$g(E)$  est une densité d'états relative dans l'intervalle  $[E_i^0, E_i^0 + \Delta E]$ . Pratiquement on part d'un facteur de modification initial  $f = e$ . Dans ces conditions, le facteur de modification final (à la vingt cinquième étape) vaut alors  $1 + 3 \times 10^{-8}$ , et c'est pratiquement la différence d'entropie  $S(E_1) - S(E_2)$  qui intervient dans la probabilité de transition  $W_{(1 \rightarrow 2)}$  à la dernière étape. Avec  $\varepsilon = 0.01$ , la différence relative entre  $\ln(g(E))$  calculé par cette méthode et sa valeur exacte, calculée par la méthode de Beale [11] pour le cas  $q = 2$  avec un réseau plan invariant par translation de taille  $L = 32$  reste inférieure à  $10^{-4}$ , quel que soit la valeur de  $E$  accessible.

La distribution de probabilité  $\mathcal{P}_T(E)$ , et les moyennes canoniques de l'énergie, de l'entropie, ainsi que la chaleur spécifique se calculent alors à l'aide des relations suivantes pour toutes les valeurs de la température ( $\beta_B = 1/(k_B T)$ ).

$$\mathcal{Z}_T = \sum_{E_{\min}}^{E_{\max}} \exp(\ln g(E) - \beta_B E) \quad (2.30)$$

$$\mathcal{P}_T(E) = \frac{1}{\mathcal{Z}_T} \exp(\ln g(E) - \beta_B E) \quad (2.31)$$

$$\langle E^n \rangle_T = \frac{1}{\mathcal{Z}_T} \sum_{E_{\min}}^{E_{\max}} E^n \exp(\ln g(E) - \beta_B E) \quad (2.32)$$

# Annexe 4 : Algorithme de Newmann-Ziff

Cet algorithme permet d'identifier les amas construits sur un réseau de manière dynamique (en rajoutant des sites au fur et à mesure) sans perdre l'essentiel de l'algorithme de Hoshen-Kopelman, à savoir un balayage unique du réseau. On en trouvera une illustration dans un cas particulier sur la figure 7.1.

NZ.1 On occupe aléatoirement  $N_0$  sites parmi les  $N$  disponibles sur un réseau

NZ.2 On balaye le réseau une fois, de manière à identifier les amas (au sens d'un ensemble de sites occupés connectés par des liens entre premiers voisins) selon l'algorithme de Hoshen-Kopelman :

Lorsqu'on balaye un réseau  $SP_g(l^d, N_{oc}, k)$  de gauche à droite et de haut en bas, chaque site occupé se voit attribuer une étiquette  $m_t^\alpha$  ( $m_t^\alpha \in \mathbb{N}^*$ ) déterminée par la connectivité avec son voisin du dessus et son voisin de gauche (en cas de "conflit", on choisit le plus petit des deux entiers naturels) ; les sites d'un même amas peuvent ainsi se voir attribuer des étiquettes  $m_t^\alpha$  différentes, de sorte qu'il est nécessaire de garder en mémoire les connections entre deux sous-ensembles occupés appartenant au même amas  $\alpha$  dans une matrice  $NC()$ . Il en résulte un ensemble d'entiers naturels  $\{m_1^\alpha, m_2^\alpha, \dots, m_s^\alpha, \dots, m_t^\alpha, \dots\}$  associé à un amas  $\alpha$  ; l'étiquette propre de l'amas  $\alpha$ , noté  $m_s^\alpha$  est reliée aux autres par un ensemble de  $(n_\alpha - 1)$  relations :  $(m_1^\alpha = -NC(m_2^\alpha), \dots, m_s^\alpha = -NC(m_r^\alpha), \dots)$ .  $NC(m_s^\alpha)$  est égal au nombre de sites occupés de l'amas  $\alpha$  ; c'est donc le seul entier positif parmi les composantes de la matrice associée aux étiquettes de l'amas  $\alpha$ . Cette procédure définit pour chaque

amas un graphe connexe sans boucles, du type arbre dont les branches pointent vers la racine  $m_s^\alpha$ . Ces propriétés topologiques permettent de mettre à jour la matrice  $NC()$  lorsqu'on ajoute un nouveau site sans perdre aucune information sur l'étiquetage des amas.

**NZ.3** On occupe un site vide du réseau de manière aléatoire; selon sa position sur le réseau, on se trouve alors dans l'une des situations suivantes :

*i)* Si le site ajouté est isolé, on crée un nouvel amas;  $m^{\max}$  désignant la valeur maximale de l'entier utilisé à l'étape précédente, l'étiquette  $(m^{\max} + 1)$  est attribuée à ce nouvel amas, et la valeur 1 est assignée à  $NC(m^{\max} + 1)$ .

*ii)* Si le site ajouté a un seul premier voisin dont l'étiquette est  $m_t^\alpha$ , on lui attribue la même; on garde trace du fait qu'un site supplémentaire a rejoint l'amas  $\alpha$  en incrémentant l'élément de matrice associé au label propre de l'amas  $\alpha$  :  $NC(m_s^\alpha) = NC(m_s^\alpha) + 1$ . Une procédure  $R$  capable de descendre depuis n'importe quel noeud de l'arbre vers sa racine a déjà été mise en place lors de l'étape NZ.2.  $m_s^\alpha = R(m_t^\alpha)$ .

*iii)* Si le site ajouté a deux premiers voisins dont les étiquettes sont  $l_1$ , and  $l_2$ , on lui attribue la valeur la plus petite  $\min(l_1, l_2)$ . On doit alors considérer deux cas, selon les valeurs de  $R(l_1)$  et  $R(l_2)$  :

Si  $R(l_1) = R(l_2) = m_s^\alpha$ , les deux voisins du site ajouté sont dans le même amas, et il suffit d'incrémenter  $NC(m_s^\alpha)$  d'une unité.

Si  $R(l_1) = m_s^\alpha$ , et  $R(l_2) = m_s^\beta$ , avec  $m_s^\alpha \neq m_s^\beta$ , les amas  $\alpha$  and  $\beta$  coalescent. On construit un nouvel amas  $\gamma$  dont le label propre est  $m_s^\gamma = \min(m_s^\alpha, m_s^\beta)$ , et on met à jour sa taille :  $NC(m_s^\gamma) = NC(m_s^\alpha) + NC(m_s^\beta) + 1$ . Enfin, on relie les deux sous ensembles d'entiers liés aux amas  $\alpha$  et  $\beta$  : Supposant par exemple que  $m_s^\gamma = m_s^\alpha$ , il suffit de modifier  $NC(m_s^\beta) = -m_s^\alpha$  pour greffer l'arbre associé à l'amas  $\beta$ .

*iv)* Si le site ajouté a plus de deux voisins, il est facile d'extrapoler la procédure décrite en *iii)* ; il suffit pour cela de considérer tout les cas de coalescence susceptibles de se produire.

**NZ.4** On calcule éventuellement les grandeurs dont on a besoin, c'est à dire les moments de la distribution de taille des amas, puis on retourne à l'étape NZ.3.

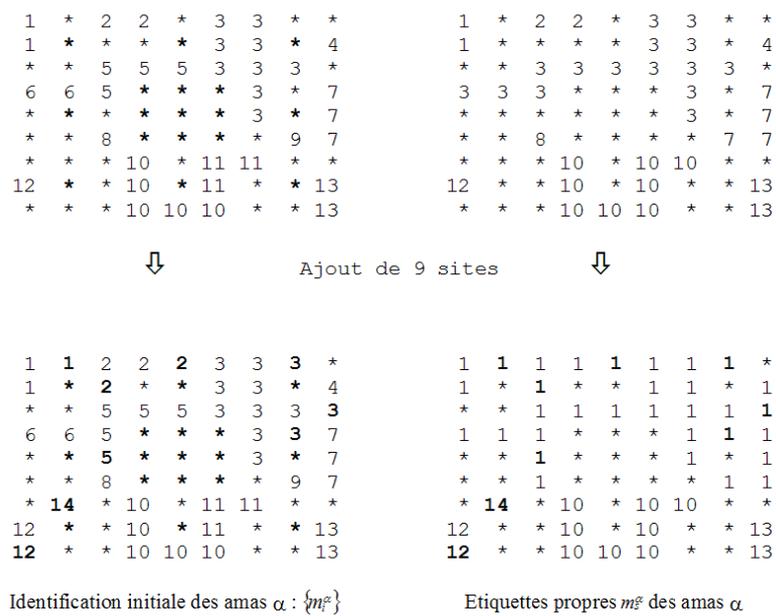


FIG. 7.1 – Identification des amas par l’algorithme de Hoshen-Kopelman et ajout de sites selon l’algorithme de Newman-Ziff.

# Bibliographie

- [1] F. D. A. Aarao Reis and R. Riera, Phys. Rev. E **49**, 2579 (1994).
- [2] D. A. F. Aarao Reis and R. Riera, J. Phys. A : Math. Gen., **27**, 1827, (1994).
- [3] A. Aharony and J. Asikainen, Fractals **11**, (Suppl.),3 ,(2003).
- [4] C. Allain and M. Cloitre, Phys. Rev. A **44**, 3552 (1991).
- [5] M. P. Allen and D. J. Tildesley in *Computer Simulations of Liquids*, (Oxford University Press, 1994).
- [6] D. André, P. Figuière, R. Fourme, M. Ghelfenstein, D. Labarre and H. Szwarc, J. Phys. Chem. Solids **45**, 299 (1984).
- [7] D. André and H. Szwarc, J. Phys. **47**, 61 (1986).
- [8] D. André and H. Szwarc, Phase Transitions **31**, 59 (1991).
- [9] J. C. Angles d'Auriac and R. Rammal, J. Phys. A **19**, L655 (1986).
- [10] C. F. Baillie, R. Gupta, K. A. Hawick, and G. S.Pawley, Phys. Rev. B **45**, 10438 (1992).
- [11] P. D. Beale, Phys. Rev. Lett. **76**, 78 (1996).
- [12] P. E. Berche, C. Chatelain and B. Berche, Phys. Rev. Lett. **80**, 297 (1998).
- [13] B. A. Berg and T. Neuhaus, Phys. Rev. Lett. **68**, 9 (1992).
- [14] G. Bhanot, H. Neuberger and J. A. Shapiro, Phys. Rev. Lett. **53**, 2277 (1984).
- [15] G. Bhanot, D. Duke and R. Salvador, Phys. Lett. **165B**, 355 (1985).
- [16] L. Bin, J. Phys. A : Math. Gen. **19**, 3449 (1986).
- [17] K. Binder and D. W. Heermann in *Monte-Carlo Simulation in Statistical Physics*, (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York, 1988).

- [18] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher and M. E. J. Newmann in *The Theory of Critical Phenomena*, (Oxford University Press, 1992).
- [19] H. W. J. Blöte, A. Compagner, J. H. Croockewit, Y. T. J. C. Fonk, J. R. Heringa, A. Hoogland, T. S. Smit, and A. L. van Willigen, *Physica A* **161**, 1 (1989).
- [20] H. W. J. Blöte, J. R. Heringa, A. Hoogland, E. W. Meyer and T. S. Smit, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2613 (1996).
- [21] B. Bonnier, Y. Leroyer and C. Meyers, *J. Phys. (Paris)* **48**, 553 (1987).
- [22] B. Bonnier, Y. Leroyer and C. Meyers, *Phys. Rev. B* **37**, 5205 (1988).
- [23] B. Bonnier, Y. Leroyer et C. Meyers, *Phys. Rev. B* **40**, 8961 (1989).
- [24] A. Boutin in *La fusion d'un cristal moléculaire ; une étude par simulation numérique de la dynamique moléculaire*, thèse de l'Université Paris XI Orsay, non publié.
- [25] A. Boutin, J. M. Simon and A. H. Fuchs, *Mol. Phys.* **81**, 1165 (1994).
- [26] E. Brézin, J. C. Le Guillou, and J. Zinn-Justin, in *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 6, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic, London, 1976).
- [27] J. Carmona, U. M. B. Marconi, J. J. Ruiz-Lorenzo, A. Tarancón, *Phys. Rev. B*, **58**, 14387(1998).
- [28] S. Chen, A. M. Ferrenberg, and D. P. Landau, *Phys. Rev. E* **52**, 1377 (1995).
- [29] P. D. Coddington and C. F. Baillie, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 962 (1992).
- [30] *Encyclopedic Dictionary of Mathematics*, edited by Shōkichi Iyanaga and Yuki-yoshi Kawada, M. I. T Press, Cambridge Massachusetts and London England, (1977).
- [31] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2635 (1988).
- [32] A. M. Ferrenberg and R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1195 (1989).
- [33] A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, *Phys. Rev. B* **44**, 5081 (1991).
- [34] G. Filippini and A. Gavezzotti, *Acta Cryst.* **B49**, 868 (1993).
- [35] M. E. Fisher, *Physics* **3**, 255 (1967).
- [36] M. E. Fisher and M. N. Barber, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 1516 (1972).
- [37] C. M. Fortuin and P. W. Kasteleyn, *Physica A* **57**, 536 (1972).

- [38] S. Galam and A. Mauger. Phys. Rev. E **53**, 2177, (1996).
- [39] S. Galam and A. Mauger. Phys. Rev. E **55**, 1230, (1997).
- [40] Z. Gao and Z. R. Yang, Phys. Rev. E, **60**, 2741 (1999).
- [41] Y. Gefen, B. B. Mandelbrot and A. Aharony, Phys. Rev. Lett. **45**, 855 (1980).
- [42] Y. Gefen, A. Aharony, Y. Shapir and A. N. Berker, J. Phys. C : Solid State Phys. **15**, 801 (1982).
- [43] Y. Gefen, Y. Meir, B. B. Mandelbrot and A. Aharony, Phys. Rev. Lett. **50**, 145 (1983).
- [44] Y. Gefen, A. Aharony and B. B. Mandelbrot, J. Phys. A : Math. Gen. **16**, 1267 (1983).
- [45] Y. Gefen, A. Aharony, Y. Shapir and B. B. Mandelbrot, J. Phys. A : Math. Gen. **17**, 435 (1984).
- [46] Y. Gefen, A. Aharony and B. B. Mandelbrot, J. Phys. A : Math. Gen. **17**, 1277 (1984).
- [47] A. Gerschel , in *Liaisons intermoléculaires*, InterEditions / CNRS Editions, Paris, 1995.
- [48] R. Gupta and P. Tamayo, Int. J. Mod. Phys. C **7**, 305 (1996).
- [49] A. B. Harris, J. Phys. C **7**, 1671 (1974).
- [50] J. Hoshen and R. Kopelman, Phys. Rev. B **14**, 3438, (1976).
- [51] Pai-Yi Hsiao (Thèse de physique théorique de l'Université Paris VII Denis Diderot) "*I. comportement critique des modèles de spin classiques sur des fractals ; II. Magnétisme orbital d'un gaz d'électrons bidimensionnel confiné par un potentiel harmonique*" ; non publiée.
- [52] P. Y. Hsiao, P. Monceau and M. Perreau, Phys. Rev. B, **63**, 13856 (2000).
- [53] P. Y. Hsiao, and P. Monceau, Phys. Rev. B **65**, 184427 (2002).
- [54] P. Y. Hsiao, and P. Monceau, Phys. Rev. B, **67**, 172403 (2003).
- [55] P.-Y. Hsiao and P. Monceau, Phys. Rev. B **67**, 064411 (2003).

- [56] L. P. Kadanoff, *Physics* (Long Island City, N.Y.) **2**, 263 (1966).
- [57] P. Y Lai, and Goldschmidt, *J. Phys. A : Math. Gen.* **20**, (8), 2159-2178 (1987).
- [58] D. P. Landau and K. Binder, *A Guid to Monte-Carlo Simulations in Statistical Physics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2000.
- [59] J. C. Le Guillou and J. Zinn-Justin, *J. Phys.*, **48**, 19 (1987).
- [60] D. Ledue, D. P. Landau & J. Teillet, *Phys. Rev. B*, **51**, 12 523 (1995)
- [61] D. Ledue, *Phys. Rev. B*, **53**, 3312 (1996).
- [62] P. Lee, J. Boviatsis and P. Coppens, *ACA Abstracts, Series 2*, **17**, 2 (1989).
- [63] X.-J. Li and A. D. Sokal, *Phys, Rev. Lett.* **63**, 827 (1989).
- [64] B. Lin and Z. R. Yang, *J. phys. A : Math. Gen.* **19**, L49 (1986).
- [65] S. K. Ma, *Phys. Rev. Lett.* **37**, 461 (1976).
- [66] B. B. Mandelbrot, *The Fractal Geometry of Nature*, Freeman, San Francisco, (1982).
- [67] B. B. Mandelbrot, *Fractals and Multifractals : Noises, Turbulence and Galaxies*, Selecta, vol. 1, Springer Verlag, Berlin, (1990).
- [68] F. S. de Menezes and A. C. N. de Magalhaes, *Phys. Rev. B*, **46**, 11642, (1992).
- [69] H. Meyer-Ortmanns and T. Reisz, *J. Math. Phys.* **39**, 5316, (1998).
- [70] K. V. Mirsky in *Computing in Crystallography*, edited by H. Schenck, R. Olthof-Hazekamp, H. van Koningsveld and G. C. Bassi, Twente : Delft University Press (1978).
- [71] P. Monceau, J. C. S. Lévy and M. Perreau, *Phys. Lett A*, **171**, 167, (1992).
- [72] P. Monceau and J.C.S. Lévy, *Phys. Rev B* **49**, 1026, (Jan.1994).
- [73] P. Monceau, M. Perreau and F. Hébert, *Phys. Rev. B*, **58**, 6386 (1998).
- [74] P. Monceau and M. Perreau, *Phys. Rev. B* **63**, 184420, (2001).
- [75] P. Monceau and P. Y. Hsiao, *Phys. Lett A*, **300**, 687, (2002).
- [76] P. Monceau and P. Y. Hsiao, *Phys. Rev. B*, **66**, 104422, (2002).
- [77] P. Monceau and P. Y. Hsiao, *E.P.J.B*, **32**, 81, (2003).

- [78] P. Monceau and P. Y. Hsiao, *Physica A*, **331**, 1, (2004).
- [79] M. E. J. Newman and R. M. Ziff, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4104, (2000).
- [80] Th. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* **31**, 1411 (1973).
- [81] Th. Niemeijer and J. M. J. van Leeuwen, *Phase Transitions and Critical Phenomena*, vol. 6, edited by C. Domb and M. S. Green (Academic, London, 1976).
- [82] M. A. Novotny, *Phys. Rev. B*, **46**, 2939, (1992).
- [83] G. S. Pawley, R. H. Swendsen, D. J. Wallace, and K. G. Wilson, *Phys. Rev. B* **29**, 4030 (1984).
- [84] G. S. Pawley, *Mol. Phys.* **44**, 1321 (1981).
- [85] R. J. M. Pellenq and D. Nicholson, *Mol. Phys.* **95**, 549 (1998).
- [86] M. Perreau and J. C. S. Levy, *Phys. Rev. A*, **40**, 4690, (1989).
- [87] M. Perreau, J. Peiro and S. Berthier, *Phys. Rev. E*, **54**, 4590, (1996).
- [88] R. E. Plotnick, R. H. Gardner, W. W. Hargrove, K. Presteggaard, and M. Perlmutter, *Phys. Rev. E*, **53**, 5461, (1996).
- [89] G. Pruessner, D. Loison and K. D. Schotte, *phys. Rev. B* **64**, 134414 (2001).
- [90] J. A. Redinz, A. C. N. de Magalhães and E. M. F. Curado, *Phys. Phys. Rev. B*, **49**, 6689, (1994).
- [91] J. A. Redinz, *Phys. Phys. Rev. E*, **60**, 3399, (1999).
- [92] W. Sierpiński, *Matematicheskii Sbornik*, **30**, 267 (1916).
- [93] H. E. Stanley, *Rev. Mod. Phys.* **71**, S358, (1999).
- [94] D. Stauffer and A. Aharony, *Introduction to Percolation Theory* (Taylor & Francis, London, Washington, D.C., 1994).
- [95] M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **51**, 1992, (1974).
- [96] R. H. Swendsen, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 859 (1979).
- [97] R. H. Swendsen, *Phys. Rev. B* **20**, 2080 (1979).
- [98] R. H. Swendsen and J.-S. Wang, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 86 (1987).

- [99] R. H. Swendsen, in *Real-Space Renormalization*, edited by Th. W. Burkhardt and J. M. J. van Leeuwen (Springer, Berlin, 1982).
- [100] R. H. Swendsen, Phys. Rev. Lett. **52**, 1165 (1984).
- [101] R. H. Swendsen, J. Stat. Phys. **34**, 963 (1984).
- [102] Y. Taguchi, J. Phys. A : Math. Gen. **20**, 6611, (1987).
- [103] P. Tamayo, R. C. Brower, and W. Klein, J. Stat. Phys. **58**, 1083 (1990).
- [104] F. Wang and D. P. Landau, Phys. Rev. Lett. **86**, 2050 (2001).
- [105] K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3174 (1971).
- [106] K. G. Wilson, Phys. Rev. B **4**, 3184 (1971).
- [107] K. G. Wilson and M. E. Fisher, Phys. Rev. Lett. **28**, 240 (1972).
- [108] U. Wolff, Phys. Rev. Lett. **62**, 361 (1989).
- [109] F. Y. Wu, Rev. Mod. Phys. **54**, 235 (1982).
- [110] Y. K. Wu and B. Hu, Phys. Rev. A **35**, 1404 (1987).
- [111] Y. Z. Wu, Y. Qin and Z. R. Yang, Phys. Rev. B **48**, 3171 (1993).
- [112] Z. R. Yang, Phys. Rev. E, **49**, 2457 (1994).
- [113] K. Yokoi, Mol. Phys. **85**, 449 (1995).
- [114] G.P. Zheng and M. Li, Phys. Rev. E **62**, 6253, (2000).

# Articles joints en annexe

1. P. Monceau, J.C.S. Lévy and M. Perreau, Phys. Lett. A **171**, 167, (Dec.1992).  
*Statistics of local environments in fractals.*
2. P. Monceau, M. Perreau and F. Hébert, Phys. Rev. B **58**, 6386, (Sept. 1998).  
*Magnetic critical behavior of the Ising model on fractal structures.*
3. P. Y Hsiao, P. Monceau, and M. Perreau, Phys. Rev. B **62**, 13856, (Dec. 2000).  
*Magnetic critical behavior of fractals in dimensions between 2 and 3.*
4. P. Monceau and M. Perreau, Phys. Rev. B **63**, 184420, (Apr. 2001).  
*Critical behavior of the Ising model on fractals structures in dimensions between 1 and 2 : Finite-size scaling effects.*
5. P. Y. Hsiao and P. Monceau, Phys. Rev. B **65**, 184427, (May 2002).  
*Critical behavior of the three-state Potts model on the Sierpinski carpet.*
6. P. Monceau and P. Y. Hsiao, Phys. Lett. A **300**, 685, (Aug. 2002).  
*Anomalous dimension exponents on fractal structures for the Ising and three-state Potts model.*
7. P. Monceau and P. Y. Hsiao, Phys. Rev. B **66**, 104422, (Sep. 2002).  
*Cluster Monte-Carlo distributions in fractal dimension between two and three : Scaling properties and dynamical aspects for the Ising model.*
8. P. Y. Hsiao and P. Monceau, Phys. Rev. B, **67**, 064411 ( 2003).  
*Critical behavior of the ferromagnetic Ising model on a Sierpinski carpet : Monte-Carlo renormalization group study.*
9. P. Monceau and P. Y. Hsiao, E. P. J. B **32**, 81 (Mar. 2003).  
*Cluster Monte-Carlo dynamics for the Ising model on fractal structures in dimensions between one and two.*

10. P. Y. Hsiao and P. Monceau, Phys. Rev. B **67**, 172403, (May 2003). *Scaling law of Wolff cluster surface energy.*
11. P. Monceau and P. Y. Hsiao, Physica A **331**, 1, (Jan. 2004). *Direct evidence for weak universality on fractal structures.*