

Dynamique et approche de l'équilibre dans le modèle d'Ising de la transition ferromagnétique

Nous avons passé beaucoup de temps jusqu'ici avec la physique statistique à l'équilibre, où chaque configuration apparaît avec une probabilité $e^{-\beta E}$. Dans ce tutorat nous allons discuter de l'approche vers cet équilibre en utilisant une dynamique Markovienne simple. Cela nous permettra de discuter, en autres, de la notion de "temps d'équilibration". Pour cela, nous allons considérer une fois encore le modèle d'Ising unidimensionnel avec la dynamique définie par Glauber (prix Nobel de Physique 2005) dans un article classique de 1963.

On rappelle que dans le modèle d'Ising unidimensionnel, on a N spins S_i, pouvant prendre les valeurs ± 1, avec le Hamiltonien $\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N} S_i S_{i+1}$. D'habitude, on considère que $J = 1$.

1 : La dynamique à l'aide des chaînes de Markov

Une chaîne de Markov est une séquence "sans mémoire" de variable aléatoires $X_1, X_2, \ldots, X_t, \ldots$. "Sans mémoire" signifie ici que la valeur X_{t+1} dépend seulement de la dernière valeur X_t, mais pas des précédentes X_s, $s < t$. Dans notre cas, notre variable est l'ensemble des orientation ± 1 des 2^N différents spins dans une configuration donné.

Une chaîne de Markov est définie complètement par sa matrice de transition $T(X_{t+1} = \{s'\}, X_t = \{s\})$, où $T(\{s'\},\{s\})$ est la probabilité que le système au temps $t+1$ est dans un état $\{s'\}$ sachant qu'il est dans l'état $\{s\}$ au temps t. Par conséquent $\sum_{\{s'\}} T(X_{t+1} = \{s'\}, X_t = \{s\}) = 1$. Si il existe une distribution de probabilité $\pi(\{s\})$ telle que

$$\pi(\{s\})T(\{s'\},\{s\}) = \pi(\{s'\})T(\{s\},\{s'\}) \tag{1}$$

on que la chaîne de Markov satisfait le *bilan détaillé* de la distribution de probabilité $\pi(\{s\})$.

On définit pour la suite $P^{eq}(\{s\})$ par

$$P^{eq}(\{s\}) = \sum_{\{s'\}} T(\{s\},\{s'\}) P^{eq}(\{s'\}) \tag{2}$$

a) Quel est l'interprétation physique de $P^{eq}(\{s\})$?

b) Montrez que si une chaîne de Markov satisfait le bilan détaillé de la distribution $\pi(\{s\})$, alors $\pi = P^{eq}$.

c) La dynamique que nous allons utiliser pour modèle d'Ising à une dimension le est la suivante : À chaque pas de temps $\delta t/N$, on choisit un spin au hasard par les N et on choisit une nouvelle valeur avec la loi suivante :

$$S_n(t) \to \left\{ \begin{array}{ll} +1 & \text{avec prob. } \frac{1+\tanh(\beta h_n(t))}{2}, \\ -1 & \text{avec prob. } \frac{1-\tanh(\beta h_n(t))}{2}, \end{array} \right\} \tag{3}$$

où $h_n(t) = J\left(S_{n-1} + S_{n+1}\right)$. Quelle est la distribution de probabilité à l'équilibre définie par ces taux de transition ?

2 : Aimantation moyenne au cours du temps dans le modèle d'Ising à 1D

On définit l'aimentation moyenne du spin n par $M_n =< S_n >$ ou $<>$ désigne la moyenne sur plusieurs réalisations de la dynamique (comme dans le premier tutorat sur le mouvement brownien).

a) Montrez que

$$\frac{dM_n(t)}{dt} = -M_n(t) + < \tanh(\beta h_n(t) > \tag{4}$$

b) En notant $\gamma = \tanh(2\beta)$ montrez que : $\tanh(\beta h_n(t) = \frac{\gamma}{2}(S_{n-1} + S_{n+1})$. En déduire que

$$\frac{dM_n(t)}{dt} = -M_n(t) + \frac{\gamma}{2}(M_{n-1}(t) + M_{n+1}(t)) \tag{5}$$

Pour résoudre un tel système d'équations couplées, il est commode d'introduire des transformés de Fourier et de Laplace. Ainsi, on utilisera

- La transformé de Laplace *en temps*

$$f_n^{\mathrm{L}}(p) = \int_0^\infty f_n(t)\, e^{-pt}\, dt, \qquad f_n(t) = \int_{x_0-i\infty}^{x_0+i\infty} \frac{dp}{2\pi i}\, f_n^{\mathrm{L}}(p)\, e^{pt}, \tag{6}$$

  pour $x_0 > \alpha$ (indice abscisse de sommabilité)
- La transformé de Fourier *en espace*

$$f^{\mathrm{F}}(q,t) = \sum_n f_n(t)\, e^{-inq}, \qquad f_n(t) = \int_0^{2\pi} \frac{dq}{2\pi}\, f^{\mathrm{F}}(q,t)\, e^{inq}, \tag{7}$$

c) Montrez que l'on a, en utilisant d'abord la transformé de Fourrier puis celle de Laplace

$$p\, M^{\mathrm{FL}}(q,p) = (\gamma \cos q - 1) M^{\mathrm{FL}}(q,p) + M^{\mathrm{F}}(q, t=0), \tag{8}$$

d) On considère que l'on part d'une configuration ou tous les spins sont ordonnés et dans la direction "up". En utilisant les propriétés de la transformation de Fourier, montrez alors que

$$M^{\mathrm{L}}(p) = \frac{1}{p + 1 - \gamma} \tag{9}$$

et en déduire, par intégration dans le plan complexe (ou plus simplement en consultant une table de transformés de Laplace), que

$$M(t) = e^{-t/\tau} \tag{10}$$

avec $\tau = \frac{1}{1-\gamma}$.

d) Comment évolue le temps d'équilibration avec la température ? Que se passe t-il à température nulle ?

3 : Dynamique en deux dimensions

Nous allons maintenant utiliser une simulation de la dynamique. Pour ce faire, utiliser l'applet java à l'adresse *http ://www.people.nnov.ru/fractal/perc/ising.htm*. Il s'agit tout simplement de l'implémentation numérique de la dynamique de l'exercice précédent (à peu de chose près).

a) En partant d'une configuration uniforme (init cold) ; comment le temps nécessaire pour obtenir une aimantation nulle évolue avec la température quand on passe d'une température très haute à une température plus proche du point critique ? Que se passe t-il en dessous du point critique ?

b) Partons d'une configuration aléatoire (init warm) ; En dessous du point critique, observez vous une convergence rapide vers un état uniforme ? Répétez l'expérience plusieurs fois. Qu'observez-vous ?