UNIVERSITÉ DE GENÈVE — FACULTÉ DES SCIENCES

Sections d'Informatique et de Physique — Profs. B. Chopard et M. Droz

Outils, modélisation et simulation en calcul numérique – Série 10

24 mai 2005

Exercice 1.
Modèle de Glauber en une dimension.
Soit $p(\sigma_1, \ldots, \sigma_N, t)$ la distribution de probabilité des spins $\sigma_1, \ldots, \sigma_N$ au temps t. Définissons la moyenne $\langle F \rangle$ d'une fonction $F(\sigma_1, \ldots, \sigma_N)$ par

$$\langle F \rangle = \sum_{\{\sigma\}} F(\sigma_1, \ldots, \sigma_N) p(\sigma_1, \ldots, \sigma_N),$$

où la somme sur $\{\sigma\}$ est une somme sur toutes les configurations de spins $\sigma_1, \ldots, \sigma_N$.

Partant de l'équation maîtresse

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} p(\sigma_1, \ldots, \sigma_N, t) &= \sum_{j=1}^{N} \omega(-\sigma_j) p(\sigma_1, \ldots, \sigma_{j-1}, -\sigma_j, \sigma_{j+1}, \ldots, \sigma_N, t) \\ &\quad - \sum_{j=1}^{N} \omega(\sigma_j) p(\sigma_1, \ldots, \sigma_{j-1}, \sigma_j, \sigma_{j+1}, \ldots, \sigma_N, t), \end{aligned}$$

montrer que les fonctions de corrélation à 1 et 2 points

$$\begin{aligned} q_i(t) &= \langle \sigma_i(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i p(\sigma_1, \ldots, \sigma_N, t), \\ \sigma_{ik}(t) &= \langle \sigma_i(t) \sigma_k(t) \rangle = \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_k p(\sigma_1, \ldots, \sigma_N, t), \end{aligned}$$

satisfont les équations

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} q_i(t) &= -2 \left\langle \sigma_i \omega_i(\sigma_i) \right\rangle, \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \sigma_{ik}(t) &= -2 \left\langle \sigma_i \sigma_k \left[\omega_i(\sigma_i) + \omega_k(\sigma_k) \right] \right\rangle. \end{aligned}$$

Exercice 2.
Taux de transition de Glauber.
Soit $\beta = (k_B T)^{-1}$, k_B la constante de Boltzmann, T la température, et E_μ l'énergie associée à l'état μ. Montrer que l'expression générale des taux de transition de Glauber

$$\omega(\mu \to \nu) = \frac{\exp(-\beta E_\nu)}{\exp(-\beta E_\nu) + \exp(-\beta E_\mu)}$$

redonne bien en une dimension le résultat de Glauber

$$\omega(s_i \to -s_i) = \frac{1}{2} \left[1 - \frac{1}{2} s_i (s_{i-1} + s_{i+1}) \gamma \right], \qquad \gamma = \tanh(2\beta J).$$

— **Tourner la page** —

Exercice 3.

La dynamique de Monte Carlo du modèle d'Ising en 2 dimensions

i) Ecrire un programme Monte Carlo pour le modèle d'Ising à 2 simensions pour les dynamiques de Glauber et/ou de Metropolis.

ii) Etudier qualitativement le comportement à l'équilibre de l'aimantation m en fonction de la température T, et de la taille du système L.

iii) Représenter graphiquement la distribution de probabilité $P(m)$ de l'aimantation m. En particulier, regarder les hautes et basses températures.

Indications :

- la température critique est donnée par $\beta_c = 0.44069\ldots$.
- la distribution étant symétrique, il suffit d'étudier les valeurs de $m \in [0, 1]$.
- considérer des valeurs décorrélées de l'aimantation.