EPFL

Physique Statistique PHYS 338
2024-2025

Série 9: Dynamique en Curie Weiss

Exercise 1 L'algorithme de Metropolis-Hastings

On considère à nouveau le modèle d'Ising de Curie-Weiss, dont l'Hamiltonien est donné par

$$\mathcal{H}_N(\vec{s}; h) = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} s_i s_j - h \sum_{i=1}^{N} s_i \tag{1}$$

Pour échantillonner des configurations de N spins selon la distribution de Gibbs

$$\mathbb{P}(\vec{S} = \vec{s}; \beta, h) = \frac{1}{Z_N(\beta, h)} \exp(-\beta \mathcal{H}_N(\vec{s}; h)) \tag{2}$$

on utilise la méthode de Monte-Carlo par chaîne de Markov (MCMC), et en particulier l'algorithme de Metropolis-Hastings qui fonctionne comme suit :

1. Choisir une configuration initiale des N spins avec des valeurs $s_i = \pm 1$ pour $i = 1, \ldots, N$.
2. Choisir un spin i au hasard. Calculer l'énergie actuelle E_{now} et l'énergie E_{flip} si le spin i est retourné (c'est-à-dire si $S_i^{\text{nouveau}} = -S_i^{\text{ancien}}$).
3. Tirer un nombre r uniformément dans $[0, 1]$ et, si $r < e^{\beta(E_{\text{now}} - E_{\text{flip}})}$, effectuer le retournement. Sinon, laisser le spin dans son état actuel.
4. Retourner à l'étape 2.

Si l'on exécute ce programme suffisamment longtemps, il est garanti que la configuration finale $\vec{S}$ aura été choisie avec la probabilité correcte.

Q1. Écrivez un code pour réaliser la dynamique MCMC en partant d'une configuration où tous les spins sont égaux à $S_i = 1$. Prenez $h = 0$, $\beta = 1.2$ et exécutez votre dynamique pendant un temps suffisamment long (disons, avec $t_{\max} = 100N$ tentatives de retournement de spins). Suivez l'évolution de l'aimantation par spin $m = \sum_i S_i/N$ en fonction du temps.
Tracez les résultats pour $N = 10, 50, 100, 200, 1000$ spins et comparez avec la solution exacte à $N = \infty$. Commentez vos observations.

Q2. Répétez l'expérience en partant d'une configuration où tous les spins sont égaux à 1 mais avec $h = -0.1$ et $\beta = 1.2$. Suivez à nouveau l'évolution de l'aimantation par spin $m = \sum_i s_i/N$ en fonction du temps.
Tracez les résultats pour $N = 10, 50, 100, 200, 1000$ spins et comparez avec la solution exacte à $N = \infty$. Quelles sont vos conclusions?

* Exercise 2 L'algorithme de Glauber

Une alternative aux algorithmes locaux pour échantillonner la mesure de probabilité de l'équation **??** est connue sous le nom d'algorithme de Glauber ou "heat bath". Au lieu de retourner un spin au hasard, l'idée est de thermaliser ce spin avec son environnement local.

Part I — Préliminaires analytiques

Q1. Écrivez une fonction Python qui, pour une valeur donnée de β, calcule le champ magnétique $h_s(\beta)$ correspondant à la transition spinodale. Tracez la ligne spinodale dans le plan (h, T) pour $\beta > \beta_c$.

Part II — L'algorithme

Q1. Soit $\bar{S} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} s_i$ l'aimantation totale d'un système de N spins. Montrez que pour tout $i = 1, \cdots, N$, la probabilité d'avoir un spin $S_i = \pm 1$ sachant que tous les autres spins sont fixés est donnée par :

$$\mathbb{P}\left(S_i = \pm 1 | \{S_j\}_{j \neq i}\right) \equiv P_{\pm} = \frac{1 \pm \tanh\big(\beta(\bar{S} + h)\big)}{2} \tag{7}$$

Q2. L'algorithme de Glauber est défini comme suit :

1. Choisir une configuration initiale pour les N spins. Calculer l'aimantation m_t et l'énergie E_t correspondant à la configuration.
2. Choisir un spin S_i au hasard. Tirer un nombre aléatoire uniforme $r \in [0, 1]$. Si $r < P_+$, fixer $S_i = +1$, sinon fixer $S_i = -1$. Mettre à jour l'énergie et l'aimantation.
3. Répéter l'étape 2 jusqu'à convergence.

Écrire un code implémentant la dynamique de Glauber. Reproduire les points (a) et (b) de l'exercice 1 en utilisant les mêmes paramètres. Comparer les dynamiques. Commenter les différences observées.

Part III — Équations de champ moyen à partir de Glauber

Q1. Soit m_t l'aimantation totale au temps t, et définissons $P_{t,m} = \mathbb{P}(m_t = m)$. Pour simplifier, considérons $\beta = 1$ et $h = 0$. Montrez que pour $\delta \ll 1$ nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned} P_{t+\delta t,m} = {} & P_{t,m+\frac{2}{N}} \times \left\{\frac{1}{2}\left(1 + m + \frac{2}{N}\right)\right\} \times \frac{1 - \tanh(m + 2/N)}{2} \\ & + P_{t,m-\frac{2}{N}} \times \left\{\frac{1}{2}\left(1 - m + \frac{2}{N}\right)\right\} \frac{1}{2}\left(1 + \tanh(m - 2/N)\right) \\ & + P_{t,m}\left\{\frac{1}{2}(1+m)\frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1}{2}(1-m)\frac{1 - \tanh(m)}{2}\right\} \end{aligned} \tag{8}$$

Cette équation est connue sous le nom d'équation maîtresse.

Q2. En définissant l'aimantation moyenne par rapport à $P_{t,m}$

$$\langle m(t) \rangle = \int \mathrm{d}m \;\, m \; P_{t,m} \tag{9}$$

et en utilisant l'équation maîtresse ci-dessus, montrez que nous pouvons obtenir une équation pour l'aimantation attendue :

$$
\begin{aligned}
\langle m(t+\delta t)\rangle = & \int P_{t,m+\frac{2}{N}} \times \left\{\frac{1}{2}\left(1+m+\frac{2}{N}\right)\right\} \times \frac{1-\tanh\left(m+\frac{2}{N}\right)}{2} \times m\,\mathrm{d}m \\
& + \int P_{t,m-\frac{2}{N}} \left\{\frac{1}{2}(1-m+\frac{2}{N})\right\} \times \frac{1+\tanh\left(m-\frac{2}{N}\right)}{2} \times m\,\mathrm{d}m \\
& + \int P_{t,m} \times \left\{\frac{1+m}{2} \times \frac{1+\tanh(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \times \frac{1-\tanh(m)}{2}\right\} \times m\,\mathrm{d}m
\end{aligned} \tag{10}
$$

Q3. En effectuant le changement de variables $m \to m + 2/N$ dans la première intégrale et $m \to m - 2/N$ dans la seconde et en choisissant $\delta = \frac{1}{N}$, concluez que pour $N \to \infty$ nous pouvons écrire la dynamique continue suivante pour l'aimantation moyenne :

$$
\frac{d}{dt}\langle m(t)\rangle = -\langle m(t)\rangle + \tanh\langle m(t)\rangle \tag{11}
$$

Q4. Montrez que l'aimantation moyenne stationnaire satisfait l'équation de champ moyen de Curie-Weiss. Généralisez pour β et h arbitraires.

* **Q5.** Nous pouvons maintenant répéter l'expérience de l'exercice précédent, mais en utilisant l'équation différentielle théorique : partez d'une configuration où tous les spins sont égaux à 1 et prenez différentes valeurs de h et β. Pour quelles valeurs la chaîne de Monte-Carlo atteindra-t-elle la valeur d'équilibre ? Quand sera-t-elle piégée dans un maximum parasite de l'entropie libre $\phi(m)$? Comparez votre prédiction théorique avec des simulations numériques.