

Série 8: Dynamique en Curie Weiss

Exercice 1 L'algorithme de Metropolis-Hastings

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

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

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

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

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 $i = 1, \dots, N$.
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 $t_{\text{max}} = 100N$ 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?

- Q1.** Pour implémenter l'algorithme de Metropolis-Hastings, nous devons d'abord calculer la différence d'énergie $\Delta E = E_{\text{flip}} - E_{\text{now}}$ lorsqu'un spin est retourné. Pour le modèle de Curie-Weiss, cette différence est donnée par

$$\Delta E = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} (s_i^{\text{new}} s_j^{\text{new}} - s_i^{\text{old}} s_j^{\text{old}}) - h \sum_i (s_i^{\text{new}} - s_i^{\text{old}}) \quad (3)$$

$$= \frac{2J}{N} s_k \sum_{j \neq k} s_j + 2h s_k \quad (4)$$

où k est l'indice du spin que nous tentons de retourner.

Voir le notebook pour l'implémentation.

Pour N fini, nous observons des fluctuations autour de la valeur moyenne. L'amplitude de ces fluctuations diminue comme $1/\sqrt{N}$, conformément au théorème central limite.

Pour $\beta = 1.2 > \beta_c = 1$, le système est dans la phase ferromagnétique. La solution exacte à $N = \infty$ présente une aimantation spontanée non nulle $m = \pm m^*(\beta)$, où $m^*(\beta)$ est solution de l'équation d'auto-cohérence

$$m = \tanh(\beta J m) \quad (5)$$

Les simulations montrent que le système reste piégé dans l'un des deux états d'aimantation $\pm m^*$ pendant des temps très longs pour N grand. Ce phénomène est une manifestation de la métastabilité : le temps nécessaire pour passer d'un état à l'autre croît exponentiellement avec N .

- Q2.** L'ajout d'un champ magnétique $h < 0$ brise la symétrie entre les états d'aimantation positive et négative. La solution exacte à $N = \infty$ est maintenant donnée par l'équation

$$m = \tanh(\beta J m + \beta h) \quad (6)$$

qui n'admet qu'une seule solution stable.

Pour $h = -0.1$ et $\beta = 1.2$, nous observons que le système relaxe vers cette solution unique, avec des fluctuations d'amplitude $\sim 1/\sqrt{N}$. Le temps de relaxation augmente avec N mais reste polynomial en N , contrairement au cas $h = 0$ où il était exponentiel.

Cette différence de comportement illustre le phénomène de transition de phase du premier ordre : en l'absence de champ, les deux phases peuvent coexister, tandis qu'un champ magnétique, même faible, sélectionne une unique phase d'équilibre.

Voir le notebook pour les simulations numériques et les graphiques correspondants.

* Exercice 2 L'algorithme de Glauber

Une alternative aux algorithmes locaux pour échantillonner la mesure de probabilité de l'équation 2 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 $i = 1, \dots, N$, la probabilité d'avoir un spin $S_i = \pm 1$ sachant que tous les autres spins sont fixés est donnée par :

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

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 :

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

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

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

$$\langle m(t) \rangle = \int dm \, m \, P_{t,m} \quad (9)$$

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

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

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

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

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.

Solution of Exercise 2

Part I — Préliminaires analytiques

- Q1.** La ligne spinodale correspond à la limite de stabilité de la phase métastable. Pour le modèle de Curie-Weiss avec champ magnétique, l'aimantation satisfait l'équation de champ moyen

$$m = \tanh(\beta J m + \beta h) \quad (12)$$

La limite de stabilité est atteinte lorsque la dérivée de la fonction à l'équilibre s'annule. En dérivant l'équation ci-dessus par rapport à m , nous obtenons

$$1 = \beta J \operatorname{sech}^2(\beta J m + \beta h) \frac{\partial m}{\partial m} \quad (13)$$

À la spinodale, la susceptibilité diverge, ce qui correspond à

$$\frac{\partial}{\partial m} [\tanh(\beta J m + \beta h)] = 1 \quad (14)$$

Cette condition s'écrit

$$\beta J \operatorname{sech}^2(\beta J m_s + \beta h) = 1 \quad (15)$$

où m_s est l'aimantation à la spinodale. En résolvant pour le champ magnétique, nous trouvons

$$h_s(\beta, m_s) = \frac{1}{\beta} \operatorname{arctanh}(m_s) - J m_s \quad (16)$$

Pour tracer la ligne spinodale dans le plan (h, T) , nous varions m_s et calculons h_s pour différentes valeurs de $\beta > \beta_c = 1/J$. Voir le notebook pour l'implémentation et le tracé.

Part II — L'algorithme

- Q1.** Considérons la probabilité conditionnelle d'avoir un spin $S_i = \pm 1$ sachant que tous les autres spins $\{S_j\}_{j \neq i}$ sont fixés. Par définition de la distribution de Gibbs, cette probabilité est donnée par

$$\mathbb{P}(S_i = s_i | \{S_j\}_{j \neq i}) = \frac{\exp(-\beta \mathcal{H}_N(\vec{s}; h))}{\sum_{s_i = \pm 1} \exp(-\beta \mathcal{H}_N(\vec{s}; h))} \quad (17)$$

Pour le modèle de Curie-Weiss, l'Hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H}_N(\vec{s}; h) = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j=1}^N s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i \quad (18)$$

Nous pouvons réécrire cet Hamiltonien en isolant la contribution du spin i :

$$\mathcal{H}_N(\vec{s}; h) = -\frac{J}{2N} s_i \sum_{j=1}^N s_j - \frac{J}{2N} \sum_{j \neq i} s_j \sum_{k \neq i} s_k - h s_i - h \sum_{j \neq i} s_j \quad (19)$$

En remarquant que $\sum_{j=1}^N s_j = N \bar{S}$ où $\bar{S} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N s_j$ est l'aimantation moyenne, nous pouvons simplifier le premier terme. De plus, puisque $\sum_{j=1}^N s_j = s_i + \sum_{j \neq i} s_j$, nous avons $\sum_{j \neq i} s_j = N \bar{S} - s_i$. L'Hamiltonien conditionnel (c'est-à-dire la partie qui dépend de s_i) est donc

$$\mathcal{H}_N^{(i)}(s_i) = -\frac{J}{2N} s_i \cdot N \bar{S} - h s_i - \frac{J}{2N} s_i (N \bar{S} - s_i) = -J \bar{S} s_i - h s_i + \frac{J}{2N} s_i^2 \quad (20)$$

Comme $s_i^2 = 1$, le dernier terme est une constante qui disparaît dans le calcul des probabilités conditionnelles. Nous obtenons donc

$$\mathbb{P}(S_i = s_i | \{S_j\}_{j \neq i}) = \frac{\exp(\beta s_i (J\bar{S} + h))}{\sum_{s_i = \pm 1} \exp(\beta s_i (J\bar{S} + h))} \quad (21)$$

Pour $s_i = +1$, nous avons

$$P_+ = \frac{\exp(\beta(J\bar{S} + h))}{\exp(\beta(J\bar{S} + h)) + \exp(-\beta(J\bar{S} + h))} = \frac{1}{1 + \exp(-2\beta(J\bar{S} + h))} \quad (22)$$

En utilisant l'identité $\tanh(x) = \frac{e^{2x}-1}{e^{2x}+1} = \frac{1-e^{-2x}}{1+e^{-2x}}$, nous pouvons réécrire

$$P_+ = \frac{1 + \tanh(\beta(J\bar{S} + h))}{2} \quad (23)$$

De manière similaire, pour $s_i = -1$, nous trouvons

$$P_- = \frac{1 - \tanh(\beta(J\bar{S} + h))}{2} \quad (24)$$

En posant $J = 1$ (ce qui correspond au choix d'unités naturelles), nous obtenons finalement

$$P_{\pm} = \frac{1 \pm \tanh(\beta(\bar{S} + h))}{2} \quad (25)$$

ce qui démontre le résultat demandé.

- Q2.** Voir le notebook pour l'implémentation de l'algorithme de Glauber et la comparaison avec la dynamique de Metropolis-Hastings.

Part III — Équations de champ moyen à partir de Glauber

- Q1.** Considérons l'évolution de la probabilité $P_{t,m}$ que l'aimantation au temps t soit égale à m . À chaque pas de temps, nous choisissons un spin au hasard parmi les N spins. L'aimantation peut donc changer de $\pm 2/N$ ou rester constante. Pour que l'aimantation soit m au temps $t + \delta t$, trois événements mutuellement exclusifs peuvent se produire :

- L'aimantation était $m + 2/N$ au temps t , et un spin positif a été remplacé par un spin négatif.
- L'aimantation était $m - 2/N$ au temps t , et un spin négatif a été remplacé par un spin positif.
- L'aimantation était déjà m au temps t , et le spin choisi a conservé sa valeur.

Calculons la probabilité de chaque événement. Si l'aimantation est $m + 2/N$, alors $\sum_i s_i = N(m + 2/N)$. Le nombre de spins positifs est

$$N_+ = \frac{N + \sum_i s_i}{2} = \frac{N + N(m + 2/N)}{2} = \frac{N}{2}(1 + m + 2/N) \quad (26)$$

La probabilité de choisir un spin positif est donc $N_+/N = (1 + m + 2/N)/2$. Une fois ce spin choisi, la probabilité qu'il devienne négatif selon l'algorithme de Glauber est $P_- = (1 - \tanh(m + 2/N))/2$ (en prenant $\beta = 1$ et $h = 0$). La contribution du premier événement à $P_{t+\delta t, m}$ est donc

$$P_{t, m+2/N} \times \frac{1}{2}(1 + m + 2/N) \times \frac{1 - \tanh(m + 2/N)}{2} \quad (27)$$

De manière similaire, si l'aimantation est $m - 2/N$, le nombre de spins négatifs est

$$N_- = \frac{N - \sum_i s_i}{2} = \frac{N - N(m - 2/N)}{2} = \frac{N}{2}(1 - m + 2/N) \quad (28)$$

La probabilité de choisir un spin négatif est $(1 - m + 2/N)/2$, et la probabilité qu'il devienne positif est $P_+ = (1 + \tanh(m - 2/N))/2$. La contribution du deuxième événement est donc

$$P_{t, m-2/N} \times \frac{1}{2}(1 - m + 2/N) \times \frac{1 + \tanh(m - 2/N)}{2} \quad (29)$$

Enfin, pour que l'aimantation reste m , soit nous choisissons un spin positif qui reste positif, soit nous choisissons un spin négatif qui reste négatif. Si l'aimantation est m , nous avons $(1 + m)/2$ spins positifs et $(1 - m)/2$ spins négatifs. La probabilité qu'un spin positif reste positif est $(1 + \tanh(m))/2$, et la probabilité qu'un spin négatif reste négatif est $(1 - \tanh(m))/2$. La contribution du troisième événement est donc

$$P_{t, m} \times \left[\frac{1 + m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1 - m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} \right] \quad (30)$$

En sommant ces trois contributions, nous obtenons l'équation maîtresse demandée :

$$\begin{aligned} P_{t+\delta t, m} &= P_{t, m+\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 - \tanh(m + 2/N)}{2} \\ &+ P_{t, m-\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 - m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 + \tanh(m - 2/N)}{2} \\ &+ P_{t, m} \times \left\{ \frac{1 + m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1 - m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} \right\} \end{aligned} \quad (31)$$

Q2. Pour obtenir l'évolution de l'aimantation moyenne $\langle m(t) \rangle = \int m P_{t, m} dm$, nous multiplions l'équation maîtresse par m et intégrons sur toutes les valeurs possibles de m . Nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle m(t + \delta t) \rangle &= \int m P_{t+\delta t, m} dm \\ &= \int m P_{t, m+\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 - \tanh(m + 2/N)}{2} dm \\ &+ \int m P_{t, m-\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 - m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 + \tanh(m - 2/N)}{2} dm \\ &+ \int m P_{t, m} \times \left\{ \frac{1 + m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1 - m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} \right\} dm \end{aligned} \quad (32)$$

ce qui est exactement l'équation demandée.

Q3. Effectuons les changements de variables suggérés. Dans la première intégrale, nous posons $m' = m + 2/N$, donc $m = m' - 2/N$ et $dm = dm'$. Nous obtenons

$$\begin{aligned} &\int m P_{t, m+\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 + m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 - \tanh(m + 2/N)}{2} dm \\ &= \int \left(m' - \frac{2}{N} \right) P_{t, m'} \times \left\{ \frac{1}{2} (1 + m') \right\} \times \frac{1 - \tanh(m')}{2} dm' \end{aligned} \quad (33)$$

De manière similaire, dans la deuxième intégrale, nous posons $m' = m - 2/N$, donc $m = m' + 2/N$. Nous obtenons

$$\begin{aligned} &\int m P_{t, m-\frac{2}{N}} \times \left\{ \frac{1}{2} \left(1 - m + \frac{2}{N} \right) \right\} \times \frac{1 + \tanh(m - 2/N)}{2} dm \\ &= \int \left(m' + \frac{2}{N} \right) P_{t, m'} \times \left\{ \frac{1}{2} (1 - m') \right\} \times \frac{1 + \tanh(m')}{2} dm' \end{aligned} \quad (34)$$

En réécrivant l'équation pour $\langle m(t + \delta t) \rangle$ avec ces changements de variables (et en omettant les primes pour alléger la notation), nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle m(t + \delta t) \rangle &= \int \left(m - \frac{2}{N} \right) P_{t,m} \times \frac{1+m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} dm \\ &\quad + \int \left(m + \frac{2}{N} \right) P_{t,m} \times \frac{1-m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} dm \\ &\quad + \int m P_{t,m} \times \left\{ \frac{1+m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} \right\} dm \end{aligned} \quad (35)$$

Développons maintenant chaque terme. Le premier donne

$$\begin{aligned} &\int \left(m - \frac{2}{N} \right) P_{t,m} \times \frac{1+m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} dm \\ &= \int m P_{t,m} \times \frac{1+m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} dm - \frac{1}{N} \int P_{t,m} \times (1+m) \times (1 - \tanh(m)) dm \end{aligned} \quad (36)$$

Le deuxième terme donne

$$\begin{aligned} &\int \left(m + \frac{2}{N} \right) P_{t,m} \times \frac{1-m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} dm \\ &= \int m P_{t,m} \times \frac{1-m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} dm + \frac{1}{N} \int P_{t,m} \times (1-m) \times (1 + \tanh(m)) dm \end{aligned} \quad (37)$$

En regroupant tous les termes, nous avons

$$\begin{aligned} \langle m(t + \delta t) \rangle &= \int m P_{t,m} \left[\frac{1+m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1+m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} \right] dm \\ &\quad + \frac{1}{N} \int P_{t,m} [(1-m)(1 + \tanh(m)) - (1+m)(1 - \tanh(m))] dm \end{aligned} \quad (38)$$

Simplifions le terme entre crochets dans la première intégrale :

$$\begin{aligned} &\frac{1+m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1+m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m)}{2} \\ &= \frac{1+m}{2} \times \frac{1 - \tanh(m) + 1 + \tanh(m)}{2} + \frac{1-m}{2} \times \frac{1 + \tanh(m) + 1 - \tanh(m)}{2} \\ &= \frac{1+m}{2} + \frac{1-m}{2} = 1 \end{aligned} \quad (39)$$

Donc la première intégrale donne simplement $\langle m(t) \rangle$. Pour le second terme, développons :

$$\begin{aligned} &(1-m)(1 + \tanh(m)) - (1+m)(1 - \tanh(m)) \\ &= 1 + \tanh(m) - m - m \tanh(m) - 1 + \tanh(m) - m + m \tanh(m) \\ &= 2 \tanh(m) - 2m \end{aligned} \quad (40)$$

En choisissant $\delta t = 1/N$, nous obtenons

$$\langle m(t + \delta t) \rangle = \langle m(t) \rangle + \frac{1}{N} \int P_{t,m} \times 2(\tanh(m) - m) dm \quad (41)$$

ce qui peut se réécrire

$$\langle m(t + \delta t) \rangle = \langle m(t) \rangle + 2\delta t [\langle \tanh(m) \rangle_t - \langle m \rangle_t] \quad (42)$$

Pour $N \rightarrow \infty$, la distribution $P_{t,m}$ devient de plus en plus piquée autour de sa valeur moyenne, de sorte que $\langle \tanh(m) \rangle_t \rightarrow \tanh(\langle m \rangle_t)$. En passant à la limite continue, nous obtenons

$$\frac{d\langle m(t) \rangle}{dt} = 2 [\tanh(\langle m(t) \rangle) - \langle m(t) \rangle] \quad (43)$$

En redéfinissant le temps par un facteur 2 (c'est-à-dire en posant $t' = 2t$), nous obtenons finalement

$$\frac{d}{dt} \langle m(t) \rangle = -\langle m(t) \rangle + \tanh(\langle m(t) \rangle) \quad (44)$$

ce qui est exactement l'équation demandée.

- Q4.** Les points fixes de l'équation dynamique $\frac{d}{dt} \langle m(t) \rangle = -\langle m(t) \rangle + \tanh(\langle m(t) \rangle)$ sont obtenus en posant la dérivée temporelle égale à zéro :

$$-\langle m \rangle_{\text{stat}} + \tanh(\langle m \rangle_{\text{stat}}) = 0 \quad (45)$$

ce qui donne immédiatement

$$\langle m \rangle_{\text{stat}} = \tanh(\langle m \rangle_{\text{stat}}) \quad (46)$$

Cette équation est exactement l'équation de champ moyen de Curie-Weiss pour $\beta = J = 1$ et $h = 0$. Pour généraliser à des valeurs arbitraires de β et h , nous devons reprendre la dérivation en conservant ces paramètres. L'argument de la tangente hyperbolique dans la probabilité conditionnelle devient $\beta(JS + h)$. En suivant la même procédure, nous obtenons l'équation dynamique générale

$$\frac{d}{dt} \langle m(t) \rangle = -\langle m(t) \rangle + \tanh(\beta J \langle m(t) \rangle + \beta h) \quad (47)$$

dont les points fixes satisfont l'équation de champ moyen générale

$$m = \tanh(\beta J m + \beta h) \quad (48)$$

Cette équation détermine l'aimantation d'équilibre du modèle de Curie-Weiss pour toute température et tout champ magnétique.

- Q5.** Voir le notebook pour les simulations numériques et la comparaison entre les prédictions théoriques de l'équation différentielle et les résultats des simulations Monte-Carlo. L'analyse de stabilité de l'équation dynamique permet de déterminer quand la chaîne de Markov atteindra l'équilibre thermodynamique et quand elle restera piégée dans un état métastable. La fonction d'entropie libre (ou énergie libre de Helmholtz) par spin est donnée par

$$\phi(m) = -\frac{\beta J m^2}{2} - \beta h m - s(m) \quad (49)$$

où $s(m) = -\frac{1+m}{2} \ln \frac{1+m}{2} - \frac{1-m}{2} \ln \frac{1-m}{2}$ est l'entropie par spin. Les maxima locaux de $\phi(m)$ correspondent à des états métastables où la dynamique peut rester piégée pendant des temps très longs. La condition de stabilité d'un point fixe m^* est donnée par

$$\left. \frac{d^2 \phi}{dm^2} \right|_{m=m^*} < 0 \quad \Leftrightarrow \quad \beta J < \frac{1}{1 - m^{*2}} \quad (50)$$

Pour $\beta > \beta_c = 1/J$ et $h = 0$, il existe deux points fixes stables symétriques $m = \pm m^*$ et un point fixe instable en $m = 0$. Si le système part d'une configuration avec $m(0) = 1$ et si nous sommes dans la région spinodale (c'est-à-dire si le champ magnétique est suffisamment faible), le système descendra vers le minimum local correspondant mais ne pourra pas franchir la barrière pour atteindre le minimum global opposé dans un temps polynomial. En revanche, si nous appliquons un champ magnétique suffisamment fort pour déstabiliser le minimum local initial, le système évoluera vers le minimum global unique.