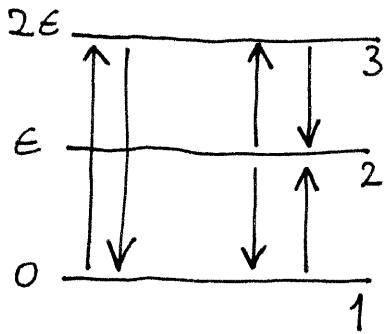
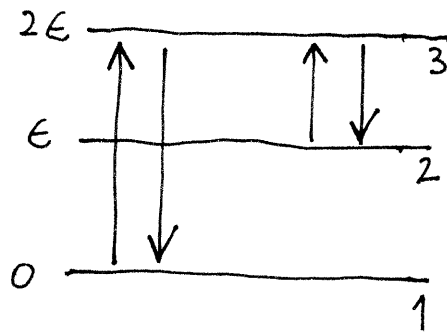
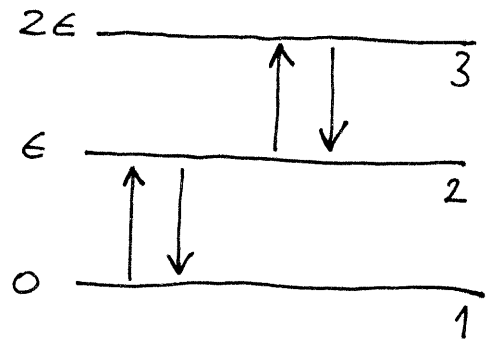

Serie 5 - Corrigés



Processus (1)



Processus (2)



Processus (3)

Les trois processus et les transitions qui sont possibles dans chaque cas sont montrés ci-dessus. Tout d'abord, calculons la matrice de transition dans les trois cas.

On a un certain nombre d'états parmi lesquels on choisit avec probabilité constante. En plus, on doit tenir compte des poids de Boltzmann.

Posons $z = e^{-\beta\epsilon}$. Il n'est pas difficile à démontrer qu'on a :

$$Q_1 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{(z+z^2)}{3} & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{z}{3} & \frac{2}{3} - \frac{z}{3} & \frac{1}{3} \\ \frac{z^2}{3} & \frac{z}{3} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

$$Q_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{3} \\ 0 & 1 - \frac{z}{2} & \frac{1}{3} \\ \frac{1}{2} & \frac{z}{2} & \frac{1}{3} \end{pmatrix}$$

$$Q_3 = \begin{pmatrix} 1 - \frac{z}{2} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{z}{2} & \frac{2}{3} - \frac{z}{3} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{z}{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Par exemple :

$$Q_{(3)}(2,1) = P_{(2)}(1 \rightarrow 2)$$

Par construction seulement les transitions avec $\Delta n = \pm 1$ sont permises. Donc, de l'état 1 on peut choisir l'état 1 lui-même ou l'état 2, chacun avec probabilité $1/2$. En plus il y a une différence d'énergie ϵ entre les états 1 et 2. Enfin on obtient

$$Q_{(3)}(2,1) = e^{-\beta\epsilon} \cdot \frac{1}{2} = \frac{z}{2}$$

Les éléments diagonaux sont calculés en imposant la condition de normalisation

$$\sum_{n=1}^3 Q_{(1)}(n,m) = 1 \quad \forall i,m$$

La matrice de transition est régulière en chaque cas (cela est évident pour le processus ①). Dans le cas des processus ② et ③, la matrice de transition a toutes les éléments différents de zéro depuis le deuxième pas temporel).

Les processus sont bien ergodiques. Comme d'habitude, le vecteur propre \vec{v}^R associé à la valeur propre $\lambda = 1$ nous donne les probabilités stationnaires.

En faisant les calculs, on trouve:

$$p_{\textcircled{1}}^s = \left(\frac{1}{Z_B}, \frac{z}{Z_B}, \frac{z^2}{Z_B} \right) \equiv P_{\text{Boltzmann}}^s$$

$$p_{\textcircled{2}}^s = \left(\frac{z}{Z_{\textcircled{2}}}, \frac{1}{Z_{\textcircled{2}}}, \frac{3z/2}{Z_{\textcircled{2}}} \right)$$

$$p_{\textcircled{3}}^s = \left(\frac{1}{Z_{\textcircled{3}}}, \frac{3z/2}{Z_{\textcircled{3}}}, \frac{z^2}{Z_{\textcircled{3}}} \right)$$

où $Z_B = 1 + z + z^2$ est la
 fonction de partition et les autres facteurs
 de normalisation sont

$$Z_{(2)} = z + 1 + \frac{3}{2}z$$

$$Z_{(3)} = 1 + \frac{3}{2}z + z^2$$

On conclut que le processus (1)
 donne la bonne probabilité asymptotique,
 alors que les processus (2) et (3) n'ont
 pas les probabilités de Boltzmann comme
 état asymptotique. La raison pour cela
 est que dans ces derniers cas l'équilibre
détaillé n'est pas vérifié. Donc on obtient
 le bon état asymptotique seulement si

$$\frac{Q_{ij}}{Q_{ji}} = \frac{P^s(i)}{P^s(j)} = e^{-\beta(E_i - E_j)} \quad (1)$$

Vous pouvez vérifier que la condition (1) est

satisfaite par la matrice $Q_{(1)}$.

Si nous voulons écrire les bonnes matrices de transition dans le cas (2) et (3), on doit imposer la condition (1).

En faisant cela on obtient les nouvelles matrices suivantes

$$Q'_{(2)} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2^2}{3} & 0 & 1/3 \\ 0 & 1 - \frac{2}{3} & 1/3 \\ \frac{2^2}{3} & \frac{2}{3} & 1/3 \end{pmatrix}$$

$$Q'_{(3)} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{3} & 1/3 & 0 \\ \frac{2}{3} & \frac{2}{3} - \frac{2}{3} & 1/3 \\ 0 & \frac{2}{3} & \frac{2}{3} \end{pmatrix}$$

maintenant on a que $\frac{Q_{nm}}{Q_{mn}} = \frac{P^S(n)}{P^S(m)}$.

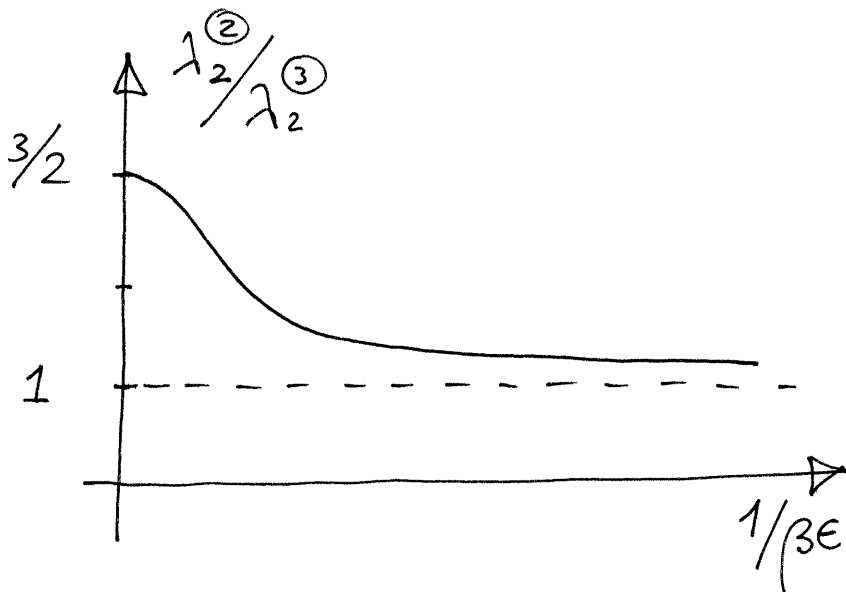
On peut facilement vérifier que les matrices $A_{(2)}$ et $A_{(3)}$ sont encore régulières. Pourtant, si on calcule les vecteurs propres de droite associés à la valeur propre $\lambda = 1$, cette fois on obtient Badtomme:

$$p_{(2)}^s = p_{(3)}^s = \left(\frac{1}{Z_B}, \frac{z}{Z_B}, \frac{z^2}{Z_B} \right)$$

Pour établir quel est le processus le plus rapide à atteindre l'équilibre entre processus (2) et (3), il faut comparer les deuxièmes valeurs propres plus grandes λ_2 . Le processus avec λ_2 le plus grand serait le plus lent. En faisant le calcul, on a :

$$\begin{cases} \lambda_2^{(2)} = \frac{2}{3} - \left(\frac{z^2+z}{6} \right) + \frac{1}{6} \sqrt{4 + z^4 - 2z^3 + z^2} \\ \lambda_2^{(3)} = \frac{2 - z + \sqrt{z}}{3} \end{cases}$$

On peut faire le graphique du rapport $\lambda_2^{(2)} / \lambda_2^{(3)}$.



On conclut que le processus (3) est toujours le plus vite.

Évidemment, on trouve que les deux processus approchent l'équilibre de plus en plus au même moment à températures de plus en plus hautes :

$$\lim_{\beta E \rightarrow 0} \frac{\lambda_2^{(2)}}{\lambda_2^{(3)}} = 1$$

En particulier, on a :

• LIMITE DE HAUTES TEMPÉRATURES

$$kT \gg \epsilon \quad , \quad \beta\epsilon \ll 1$$

$$\bullet \lambda_2^{(2)} = \frac{2}{3} + \frac{\beta\epsilon}{2} + \mathcal{O}([\beta\epsilon]^2)$$

$$\bullet \lambda_2^{(3)} = \frac{2}{3} + \frac{\beta\epsilon}{6} + \mathcal{O}([\beta\epsilon]^2)$$

• LIMITE DE BASSE TEMPÉRATURES

$$kT \ll \epsilon \quad , \quad \beta\epsilon \gg 1$$

$$\bullet \lambda_2^{(2)} = 1 - \frac{e^{-\beta\epsilon}}{6} + \mathcal{O}([e^{-\beta\epsilon}]^2)$$

$$\bullet \lambda_2^{(3)} = \frac{2}{3} - \frac{1}{3}e^{-\beta\epsilon} + \frac{1}{3}e^{-\beta\epsilon/2} + \mathcal{O}([e^{-\beta\epsilon}]^2)$$

△ * * * * *