Simulations Monte-Carlo 1

Références

[1] W. Krauth, *Introduction to Monte-Carlo algorithms* (http ://www.lps.ens.fr/ krauth/)

[2] J. Talbot, G. Tarjus and P. Viot, *Optimum Monte Carlo simulations : some exact results*, J. Phys. A : Math. Gen. **36** (2003), 9009

1 Le jeu de Taquin [1]

La Taquin est une jeu composé de $N-1$ carrés disposés sur un réseau de N sites. Il est donc possible de déplacer la case vide dans le réseau. En supposant tous les carrés équivalents, une configuration du système est donnée par la position $i = 1, ..., N$ de la case vide (représentée en noir sur la figure)

1	2	3
4	5	6
7	8	

Le but de cet exercice est d'écrire un algorithme Monte-Carlo permettant d'explorer les configurations du système de manière *équiprobable*. La probabilité $P(i)$ que la case vide soit dans la position i est donc indépendante de i. Il reste à déterminer la probabilité de transfert $W(i \to j)$ que la case vide passe de la position i à la position adjacente j.

▷ **1-1** Que vaut cette probabilité lorsque la position de départ i n'est pas sur le bord du réseau ?

▷ **1-2** On considère le cas où la case vide est dans un coin du réseau (case 9 de la figure) à l'itération n. En énumérant les différentes configurations possibles à l'itération $n-1$, montrer que

$$P(9)(W(9 \to 8) + W(9 \to 6)) = P(6)W(6 \to 9) + P(8)W(8 \to 9)$$

En déduire une condition suffisante pour $W(i \to j)$.

▷ **1-3** Calculer la probabilité $W(9 \to 9)$ que la case vide reste dans le coin lors d'une itération.

▷ **1-4** Écrire l'algorithme de Monte-Carlo recherché.

2 Probabilité d'acceptation [2]

On considère une particule astreinte à se déplacer dans un potentiel unidimensionnel $v(x)$. A chaque itération n d'une simulation Monte-Carlo, on tente de déplacer la particule de x à $x+h$, où h est choisi aléatoirement et uniformément dans l'intervalle $[-\delta, \delta]$.

▷ **2-1** Écrire l'équation maîtresse de l'algorithme de Monte-Carlo pour la probabilité $P(x, n)$ de trouver la particule à l'abscisse x à l'itération n en fonction de $\Pi(x \to x+h)$, la probabilité que la nouvelle configuration, en $x+h$, soit acceptée.

▷ **2-2** Quelle condition doit on vérifier à l'équilibre ? En déduire la condition suffisante, mais pas nécessaire, du bilan détaillé.

▷ **2-3** Dans l'ensemble canonique, à la température T, la probabilité $P(x)$ est proportionnelle au facteur de Boltzmann : $P(x) \sim e^{-\beta v(x)}$. Montrer que les expressions suivantes de $W(x \to x+h)$ vérifient bien le bilan détaillé :

– Algorithme de Metropolis

$$\Pi(x \to x+h) = \min(1, e^{-\beta \Delta v}) \tag{1}$$

– Algorithme du 'Heat bath'

$$\Pi(x \to x+h) = \frac{e^{-\beta \Delta v}}{1 + e^{-\beta \Delta v}}, \tag{2}$$

où $\Delta v = v(x+h) - v(x)$. Quelles sont les différences entre ces deux algorithmes ? (On comparera l'acceptation entre deux configurations successives d'énergie supérieure ou inférieure.)

▷ **2-4** Soit un système de spins interagissant par une interaction plus proche voisin ferromagnétique sur un réseau où chaque site possède q plus proche voisins. Le Hamiltonien est donné par

$$H = -J \sum_{<i,j>} S_i S_j.$$

Écrire l'algorithme de Metropolis qui explore l'espace des configurations en retournant un spin choisi aléatoirement pour passer d'une configuration à une autre.

▷ **2-5** On appelle taux d'acceptation le rapport entre le nombre de configurations modifiées sur l'ensemble des configurations. Justifier que ce rapport est donné par l'expression

$$P_{acc}(\delta) = \frac{1}{2\delta R} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta v(x)} \int_{-\delta}^{\delta} dh \Pi(x \to x+h) \tag{3}$$

où $R = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta v(x)}$.

▷ **2-6** Montrer que l'équation précédente peut se réécrire sous la forme :

$$\frac{d}{d\delta}(\delta P_{acc}(\delta)) = \frac{1}{2R} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta v(x)} (\Pi(x \to x+\delta) + \Pi(x \to x-\delta)) \tag{4}$$

▷ **2-7** Dans la suite, on utilisera l'algorithme de Metropolis. On considère le potentiel suivant :

$$\begin{cases} v(x) = 0 \text{ si } |x| \le a, \\ v(x) = +\infty \text{ si } |x| > a \end{cases} \tag{5}$$

Montrer que

$$P_{acc}(\delta) = 1 - A\delta$$

où A est une constante que l'on déterminera. On se limitera au cas où $\delta < 2a$.

▷ **2-8** L'écart quadratique moyen de la position est donné par :

$$< (\Delta x)^2 > = \frac{1}{2\delta R} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\beta v(x)} \int_{-\delta}^{\delta} dh h^2 \Pi(x \to x+h)$$

Calculer $< (\Delta x)^2 >$ pour ce potentiel. En déduire la valeur de δ qui optimise l'algorithme.