

# Simulations Monte-Carlo 2

## Références

- [1] H. W. Graben, *Energy states in the linear chain Ising model*, Am. J. Phys. **45** (1977), 211
- [2] F. Wang and D.P. Landau, *Efficient, Multiple-Range Random Walk Algorithm to calculate the density of states*, Phys. Rev. Lett. **86** (2001), 2050
- [3] B. Widom, *Potential-distribution theory and the statistical mechanics of fluids*, J. Phys. Chem. **86** (1982), 869

## 1 Introduction à l'algorithme de Wang-Landau

Dans l'ensemble canonique, la fonction de partition d'un système décrit par le Hamiltonien  $H$  peut s'écrire en sommant sur les états  $C$  d'énergie  $E_C$  ou bien directement sur les énergies  $E_n$  [1] :

$$Z = \sum_C e^{-\beta E_C} = \sum_n g(E_n) e^{-\beta E_n},$$

où  $\beta = 1/k_B T$  est l'inverse de la température  $T$  et  $g(E_n)$  la densité d'états du  $n^{eme}$  niveau d'énergie  $E_n$ .

Pour commencer, considérons le modèle d'Ising à une dimension de  $N$  (pair) spins avec des conditions aux limites périodiques [1], dont le Hamiltonien s'écrit :

$$H = -J \sum_i S_i S_{i+1},$$

où  $J > 0$  est l'interaction entre deux spins plus proches voisins.

- ▷ **1-1** Que vaut l'énergie  $E_0$  de l'état fondamental,  $g(E_0)$  et  $\sum_n g(E_n)$ ? Quelle est la relation entre  $g(E_n)$  et  $g(-E_n)$ ?
- ▷ **1-2** Quelle est l'énergie  $E_1$  et la dégénérescence  $g(E_1)$  du premier état excité?
- ▷ **1-3** En déduire  $E_n$  et  $g(E_n)$ .
- ▷ **1-4** Calculer la fonction de partition.

Wang et Landau [2] ont proposé un algorithme de type Monte-Carlo qui permet de calculer la densité d'état  $g(E)$ .

- ▷ **1-5** Connaissant la densité d'état  $g(E)$ , montrer comment on peut déduire les quantités thermodynamiques quelle que soit la température du système. Exprimer en particulier la valeur moyenne de l'énergie  $\langle E \rangle$ , la chaleur spécifique à volume constant  $C_v$ , l'énergie libre et l'entropie du système.

Avec l'algorithme de Wang et Landau, le système décrit une marche aléatoire dans l'espace des énergies avec une probabilité  $P(E)$  que le système soit dans un état d'énergie  $E$  : partant d'une configuration  $C$  d'énergie  $E$ , on propose une nouvelle configuration  $C'$  d'énergie  $E'$  en retournant un spin choisi aléatoirement (dans le cadre du modèle d'Ising). La nouvelle configuration est alors acceptée avec la probabilité :

$$\Pi(C \rightarrow C') = \min\left(1, \frac{g(E)}{g(E')}\right)$$

- ▷ **1-6** Montrer que cet algorithme vérifie une équation de bilan détaillé que l'on déterminera. En déduire la probabilité  $P(E)$ .

## 2 Méthode d'insertion de Widom

Considérons un fluide simple de  $N + 1$  particules dans l'ensemble canonique à la température  $T$  dans un volume  $V$ . Dans la suite, on va formellement distinguer la  $N + 1^{eme}$  particule des  $N$  premières.

▷ **2-1** Montrer que l'on peut décomposer l'énergie potentielle du système sous la forme

$$U_{N+1} = U_N + \Psi,$$

où  $U_{N+1}$  est l'énergie potentielle du système,  $U_N$  l'énergie potentielle des  $N$  premières particules et  $\Psi$  l'énergie d'interaction entre la  $N + 1^{eme}$  particule et les  $N$  premières particules.

▷ **2-2** Montrer que [3] :

$$\langle e^{-\beta\Psi} \rangle = (N + 1) \frac{Q_{N+1}}{Q_N} \frac{\lambda^3}{V},$$

où  $Q_N$  est la fonction de partition de  $N$  particules,  $\lambda$  la longueur d'onde thermique et  $\langle \dots \rangle$  une moyenne dont on précisera le sens.

▷ **2-3** En déduire l'expression du potentiel chimique  $\mu$  en fonction de  $\langle e^{-\beta\Psi} \rangle$  et du potentiel chimique du gaz parfait,  $\mu_{id} = kT \ln \rho \lambda^3$ .

▷ **2-4** Écrire un algorithme permettant de calculer  $\mu$  lors d'une simulation Monte-Carlo.