

Simulation Monte Carlo

Exemple du système d'Ising 2D

Introduction

- Méthode introduite dès les années 1950
- Utilisée largement aujourd'hui :
 - Capacité des ordinateurs
 - Systèmes étudiés complexes
 - Théorie insuffisante
 - Préparation de l'expérimentation
- Illustration avec le système d'Ising 2D
Système en contact avec un thermostat à la température T

$$H = -g\mu B \sum_i S_i - J \sum_{ppv} S_i S_j$$

Principe

Objectifs :

- Évaluation de paramètres physiques (énergie moyenne, capacité calorifique, aimantation, susceptibilité magnétique)
- Le calcul se fait *en principe* par :

$$\langle A \rangle = \sum_{\alpha} A(\alpha) \exp(-E(\alpha) / kT) / Z$$

- Impossible en pratique !!!

Echantillonnage

- Il faut dans tous les cas réduire la taille du système
- Echantillonnage simple :
 - On génère C micro-états et on calcule :

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_{\alpha=1}^C A(\alpha) \exp(-E(\alpha) / kT)}{\sum_{\alpha=1}^C \exp(-E(\alpha) / kT)}$$

- **Problème** : les configurations utilisées ne représentent pas l'état d'équilibre ; échantillonnage peu efficace

Echantillonnage par importance

- On choisit les micro-états suivant leur probabilité d'importance à la température T , alors :

$$\langle A \rangle = \frac{1}{C} \sum_{\alpha=1}^C A(\alpha)$$

- Méthode : on génère une série d'états à partir d'un état initial arbitraire avec une probabilité de transition $w(\alpha_i \rightarrow \alpha_{i+1})$ entre deux états successifs qui respecte la loi de bilan détaillée de l'équilibre.

Algorithmes

- Après un nombre suffisant d'itérations, le système atteint l'état d'équilibre :

$$P(\alpha_i)w(\alpha_i \rightarrow \alpha_k) = P(\alpha_k)w(\alpha_k \rightarrow \alpha_i) \text{ soit :}$$

$$\frac{w(\alpha_i \rightarrow \alpha_k)}{w(\alpha_k \rightarrow \alpha_i)} = \exp(-\Delta E / kT) \text{ avec : } \Delta E = E(\alpha_k) - E(\alpha_i)$$

- Choix usuels :

– Bain thermique :

$$w(\alpha_i \rightarrow \alpha_k) = \frac{\exp(-\Delta E / 2kT)}{\exp(+\Delta E / 2kT) + \exp(-\Delta E / 2kT)}$$

– Metropolis ...

Algorithme de Metropolis

- Probabilité de transitions :

$$\begin{aligned} w(\alpha_i \rightarrow \alpha_k) &= \exp(-\Delta E / kT) && \text{si } \Delta E \geq 0 \\ &= 1 && \text{si } \Delta E < 0 \end{aligned}$$

- Programmation :

1. Choix de la taille du réseau $N \times N$ et de la température T
2. Tirage d'un état initial
3. Choix d'un site
4. Evolution du site
5. Itérations des opérations 3 et 4
6. Calcul des valeurs moyennes cherchées

on peut calculer ces valeurs moyennes à une fréquence donnée, l'équilibre est atteint quand celles-ci fluctuent autour d'une quantité fixe

Evolution des sites (thermalisation)

- Pour faire évoluer le spin (i,j) pris au hasard :
- On calcule l'énergie du spin par :

$$E_1 = -g\mu B \times S(i, j) - J \times S(i, j) \times \sum_{ppv(i, j)} S(ppv(i, j))$$

- On change le signe du spin et on obtient la nouvelle énergie :

$$E_2 = -E_1$$

- Si $E_2 < E_1$ on accepte la nouvelle orientation du spin
- sinon, la nouvelle orientation est acceptée si :

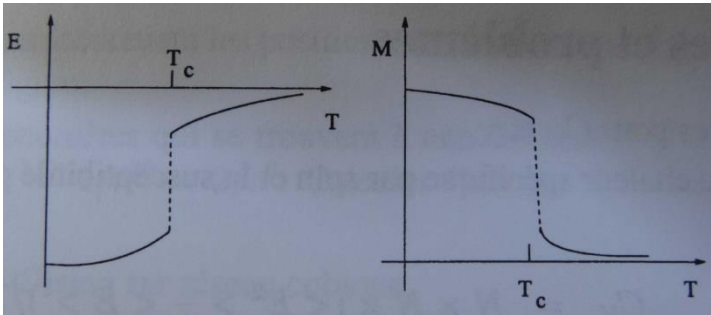
$$rndm < \exp\left(-\frac{E_2 - E_1}{kT}\right)$$

où $rndm$ est un nombre pseudoaléatoire entre 0 et 1

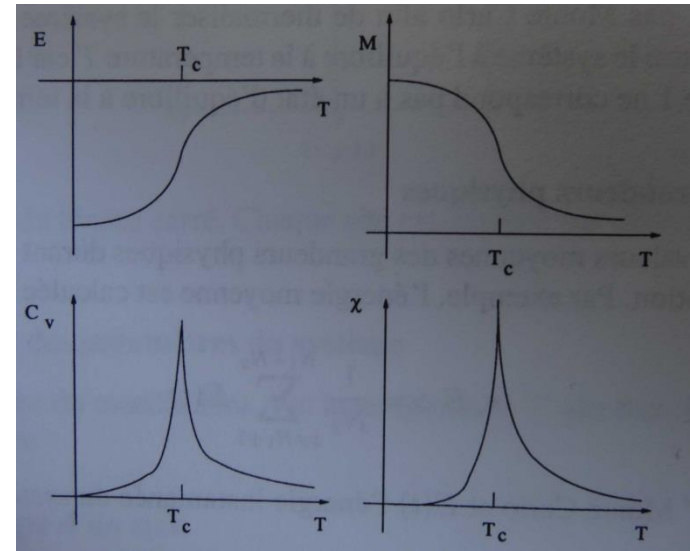
Résultats

- On peut observer la variation des quantités physiques en fonction du temps et trouver les valeurs d'équilibre
- On peut faire des simulations à différentes températures et chercher un point critique
- Difficultés :
 - Temps calcul
 - Estimation des effets de taille du réseau

Illustrations



**Transition de phase du premier ordre
vue dans une simulation de taille N fixée**



**Transition de phase du second ordre
vue dans une simulation de taille N fixée**

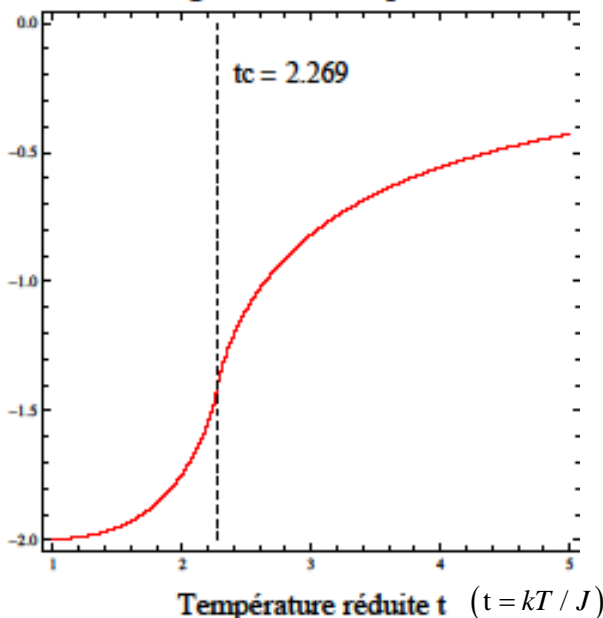
Rappels Ising 2D solution exacte

$$H_i = -g\mu_B B S_i - J \sum_{j=ppv} S_i S_j$$

$$U = -2NJ \left(\tanh \frac{2J}{kT} + \left[\frac{\sinh^2(2J/kT) - 1}{\sinh(4J/kT)} \right] \times \left[\frac{2}{\pi} K(x) - 1 \right] \right)$$

$$\text{avec : } x = \frac{2 \sinh(2J/kT)}{\cosh^2(2J/kT)} \text{ et } K(x) \equiv \int_0^{\pi/2} d\varphi \frac{1}{\sqrt{1 - x^2 \sin^2 \varphi}}$$

Energie versus température

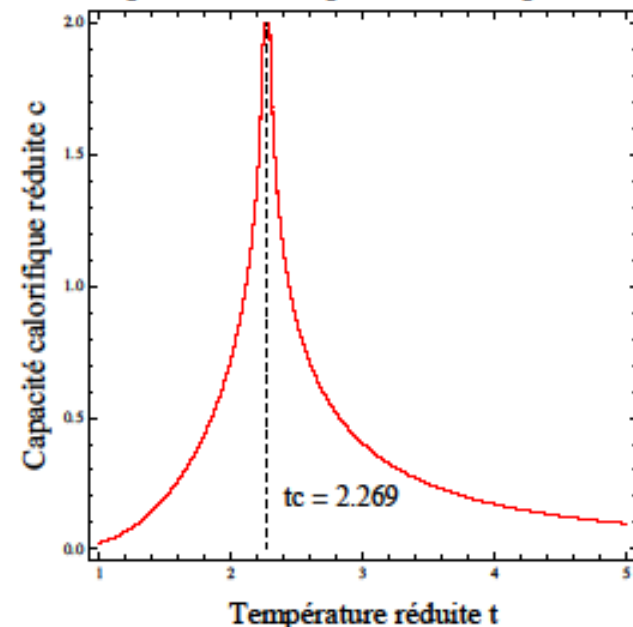


$$\sinh(2J/kT_c) = 1$$

$$\text{soit : } kT_c / J = 2,269$$

PA201 Simulation Monte Carlo

Capacité calorifique versus température



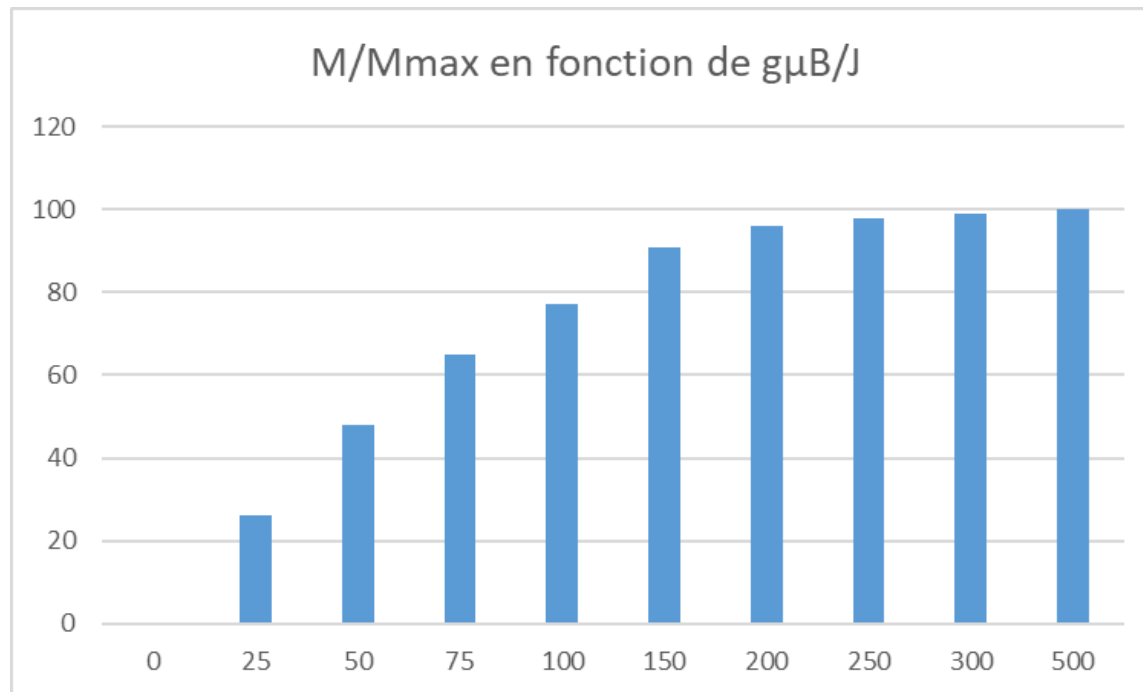
ANIMATION

- Réseau 100 x 100 cases
- Case : rouge $S=+1$; bleue $S=-1$
- M donnée en % de l'aimantation maximale
- E donnée en % de l'énergie maximale sans champ magnétique
- Une nouvelle image quand 10 % des spins ont pu évoluer

SEQUENCE 1 : paramagnétisme

- Paramagnétisme : $kT/J = 100 \gg 1$: $\rightarrow M$ vs B

| $g\mu B/J$ | 0 | 25 | 50 | 75 | 100 | 150 | 200 | 250 | 300 | 500 |
|--------------|---|----|----|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| M/M_{\max} | 0 | 26 | 48 | 65 | 77 | 91 | 96 | 98 | 99 | 100 |



SEQUENCE 2

Transition paramagnétisme → ferromagnétisme

$B = 0$

- $kT/J = 5$: $M = 0$; (rappel : $kT_c/J = 2,269$)
- $kT/J = 3$: $M = 0$ mais corrélations entre spins à plus longue distance
- $kT/J = 1$: apparition de domaines aimantés

$B = 1$: aimantation maximale

$B = -1$: variation brutale de l'énergie et retournement de l'aimantation

$B = 0 \rightarrow \sim 0,8$: l'aimantation persiste

$B > \sim 0,8$: l'aimantation se retourne

$B = 0$: l'aimantation persiste puis :

- $kT/J = 2.5$: disparition lente de l'aimantation
- $kT/J = 5$: disparition rapide de l'aimantation