

Physique Statistique, Amphi 6

J.P. Bouchaud

Plan du cours

- I. **Systemes hors d'équilibre**
 - Equation Maître
 - Relaxation vers l'équilibre
 - Croissance de l'Entropie

- II. **Méthode Monte-Carlo**
 - Algorithme de Metropolis
 - Illustrations et limitations

I. Systèmes à l'équilibre – Rappels

- **Equilibre mécanique** : plus rien ne bouge \neq **Equilibre thermodynamique** : tout bouge tout le temps au niveau microscopique
- **L'équilibre thermodynamique** est une notion statistique: la probabilité d'observer une certaine microconfiguration \mathcal{C} ne change pas dans le temps
- Microconfigurations
 - Particules dans une boîte: $\mathcal{C} = \{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \vec{p}_2, \dots, \vec{p}_N\}$:
6N variables
 - Spins d'Ising sur un réseau: $\mathcal{C} = \{S_1, S_2, \dots, S_N\}$ – 2^N microconfigurations

I. Systèmes à l'équilibre – Rappels

- Equilibre statistique:

$$P(\mathcal{C}, t) = P_{eq}(\mathcal{C}), \quad \langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{\mathcal{C}} P_{eq}(\mathcal{C}) \mathcal{O}(\mathcal{C})$$

I. Systèmes hors équilibre

- **Equilibre statistique**: contrainte *a priori* très forte
- La majorité des systèmes qui nous entourent ne sont pas à l'équilibre (terre, êtres vivants, etc.)
- Intéressant de décrire des situations hors équilibre, ne fût-ce que pour comprendre comment, et en combien de temps, l'équilibre est atteint
- L'utilisation de notions d'équilibre est parfois injustifiée: certains systèmes, mêmes isolés, n'atteignent en pratique jamais l'équilibre de Boltzmann ! (ex: verres)

I. Systèmes hors équilibre

- La transposition brutale de ces notions à d'autres domaines est parfois délicate – ex: équilibre en économie (cf. Keynes: *In the long run, we are all dead*)
- L'équilibre, c'est bien – le hors-équilibre, c'est encore mieux !

I. Systèmes hors équilibre

- Outil pour décrire des systèmes hors-équilibre: équation d'évolution des probabilités
- On introduit la notion de *taux de transition* (par unité de temps) de \mathcal{C} à \mathcal{C}' :

$$W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')dt = \text{prob. de passer de } \mathcal{C} \text{ à } \mathcal{C}' \text{ entre } t \text{ et } t + dt$$

- Hypothèse: la nature chaotique de la dynamique microscopique justifie une description "markovienne" (sans mémoire du passé)
- En découle l'équation Maîtresse (flux entrant - flux sortant):

$$P(\mathcal{C}, t+dt) - P(\mathcal{C}, t) = + \underbrace{\sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} P(\mathcal{C}', t) W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) dt}_{\text{terme de gain}} - \underbrace{P(\mathcal{C}, t) \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') dt}_{\text{terme de perte}}$$

I. Système à deux niveaux

- Exemple simple: spin d'Ising dans un champ magnétique B :
 $S = \pm 1$
- Deux configurations \rightarrow deux probabilités $P(+, t)$ et $P(-, t)$,
avec $P(+, t) + P(-, t) = 1, \quad \forall t$
- Deux taux de transitions: $W(+ \rightarrow -)$ et $W(- \rightarrow +)$

- Deux équations:

$$\frac{dP(\pm, t)}{dt} = W(\mp \rightarrow \pm)P(\mp, t) - W(\pm \rightarrow \mp)P(\pm, t)$$

- On vérifie que $\frac{dP(+, t)}{dt} + \frac{dP(-, t)}{dt} \equiv 0$

I. Système à deux niveaux

- Eliminons $P(-, t)$:

$$\frac{dP(+, t)}{dt} = W(- \rightarrow +) [1 - P(+, t)] - W(+ \rightarrow -)P(+, t)$$

- ou encore:

$$\frac{dP(+, t)}{dt} = -W_0 P(+, t) + W(- \rightarrow +)$$

avec

$$W_0 = W(+ \rightarrow -) + W(- \rightarrow +)$$

I. Système à deux niveaux

- Solution:

$$P(+, t) = P(+, 0)e^{-W_0 t} + P_{eq}(+) [1 - e^{-W_0 t}]$$

avec:

$$P_{eq}(+) = \frac{W(- \rightarrow +)}{W(- \rightarrow +) + W(+ \rightarrow -)}$$

- Relaxation exponentielle vers l'équilibre, sur un temps W_0^{-1}
- Si $B > 0$, l'état $+$ est favorisé: $W(- \rightarrow +) > W(+ \rightarrow -)$ et $P_{eq}(+) > \frac{1}{2}$

I. Intermezzo 1 : le problème de l'ascenseur

- Un immeuble de 54 étages de bureaux
- Quelle est la probabilité $P(0)$ de trouver l'ascenseur au rez de chaussée ?
- a) $P(0) = 1/54$? b) $P(0) = 1/2$? c) $P(0) = 1/53$?

I. Intermezzo 1 : le problème de l'ascenseur

- Une approche par l'équation Maître
- $P(0, t)$: prob. de trouver l'ascenseur au rez de chaussée
- $1 - P(0, t)$: prob. de trouver l'ascenseur aux étages
- Flux d'arrivée dans l'immeuble : $\rho_{in}(t)$; flux de départ : $\rho_{out}(t)$
- Equation Maître (on suppose le temps de trajet négligeable)

$$\frac{dP(0, t)}{dt} = + \underbrace{\rho_{out}(t) [1 - P(0, t)]}_{\text{terme de gain}} - \underbrace{\rho_{in}(t) P(0, t)}_{\text{terme de perte}}$$

I. Intermezzo 1 : le problème de l'ascenseur

-

$$\frac{dP(0, t)}{dt} = \rho_{out}(t) - \rho_0(t)P(0, t) \quad \rho_0(t) = \rho_{out}(t) + \rho_{in}(t)$$

- Solution:

$$P(0, t) = \int_{-\infty}^t dt' \rho_{out}(t') \exp \left[- \int_{t'}^t dt'' \rho_0(t'') \right]$$

- $\rho_{in}(t)$ plus grand le matin; $\rho_{out}(t)$ plus grand le soir – mais égaux en moyenne !
- Cas simple: $\rho_0(t) = \rho_0$, $\omega = 2\pi/24$

$$\rho_{in}(t) = \frac{1}{2}\rho_0 [1 + A \cos(\omega t)], \quad \rho_{out}(t) = \frac{1}{2}\rho_0 [1 - A \cos(\omega t)]$$

I. Intermezzo 1 : le problème de l'ascenseur

-

$$P(0, t) = \frac{1}{2} - \frac{A}{2} \left[\frac{\rho_0^2}{\rho_0^2 + \omega^2} \cos(\omega t) + \frac{\rho_0 \omega}{\rho_0^2 + \omega^2} \sin(\omega t) \right]$$

- La probabilité moyennée sur la journée vaut $\frac{1}{2}$
- En pratique: $\rho_0 \gg \omega$, et $P(0, t)$ suit “adiabatiquement” $\rho_{out}(t)$:

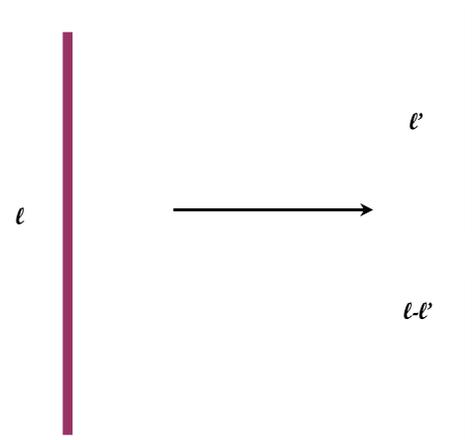
$$P(0, t) \approx \frac{1}{2} - \frac{A}{2} \cos(\omega t)$$

- Note: mêmes calculs pour un spin dans un champ magnétique oscillant
→ $\chi'(\omega) = \frac{1}{1+(\omega\tau)^2}$, $\chi''(\omega) = \frac{\omega\tau}{1+(\omega\tau)^2}$ (Debye)

I. Intermezzo 2 : le problème du café moulu

- Un grain de café de taille l a une probabilité par unité de temps αl d'être coupé par la lame en deux grains de taille

l' et $l - l'$, l' uniforme dans $[0, l]$,



- Equation Maîtresse sur le nombre de grains de taille l , $N(l, t)$:

$$\frac{dN(l, t)}{dt} = \underbrace{2 \int_l^\infty dl' N(l', t) \alpha l' \frac{1}{l'}}_{\text{terme de gain}} - \underbrace{N(l, t) \alpha l}_{\text{terme de perte}}$$

I. Intermezzo 2 : le problème du café moulu

- On vérifie facilement que:

$$\frac{dN}{dt} = \frac{d \int_0^\infty d\ell N(\ell, t)}{dt} = \int_0^\infty d\ell \alpha \ell N(\ell, t) = \alpha L$$

Création d'un grain supplémentaire par collision avec la lame

- Conservation de la longueur totale:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d \int_0^\infty d\ell \ell N(\ell, t)}{dt} = 0 \Rightarrow L(t) = L_0$$

- La solution à temps longs est de la forme d'échelle $N(\ell, t) = \alpha L_0 t f(\alpha t \ell)$.
Chercher l'équation différentielle à laquelle obéit $f(u)$.

I. Equation Maître : cas général

- $$\frac{dP(\mathcal{C},t)}{dt} = + \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} P(\mathcal{C}',t)W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - P(\mathcal{C},t) \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$$

- On vérifie explicitement en sommant sur \mathcal{C} que la probabilité est conservée:

$$\sum_{\mathcal{C}} \frac{dP(\mathcal{C},t)}{dt} \equiv 0, \quad \forall W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})$$

I. Equation Maître : cas microcanonique

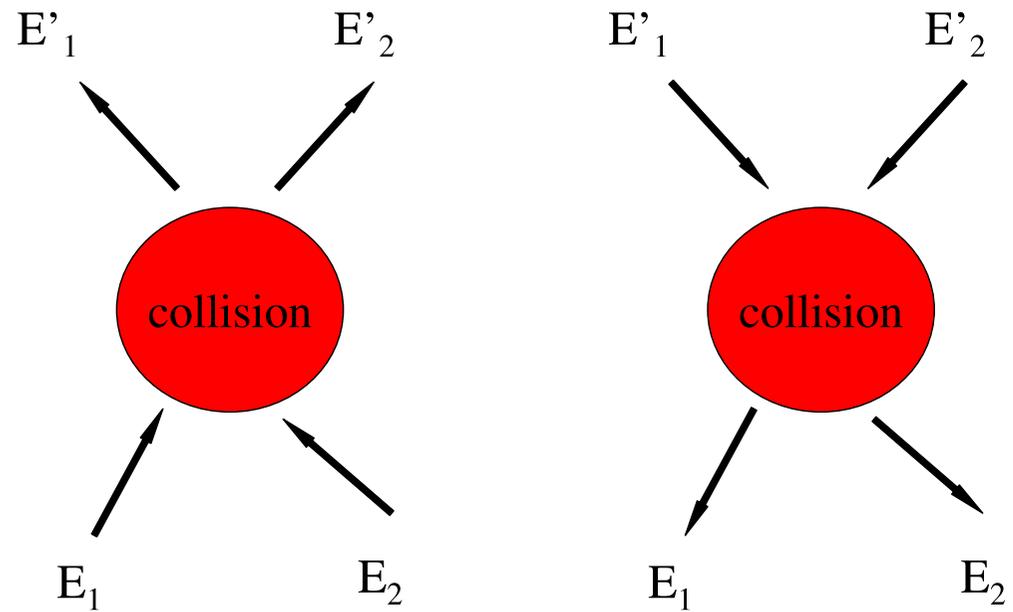
- Pour un système Hamiltonien isolé, l'énergie est conservée, et la dynamique est invariante en $t \rightarrow -t$
- On admet que ceci implique la “microreversibilité” des taux de transitions:

$$W(c' \rightarrow c) = W(c \rightarrow c')$$

- Note:

$$W(c' \rightarrow c) = 0 \quad \text{si} \quad E(c) \neq E(c')$$

Microreversibilité des transitions



$$W(E_1 E_2 \rightarrow E'_1 E'_2) = W(E'_1 E'_2 \rightarrow E_1 E_2)$$

I. Equation Maître : cas microcanonique

- “Microreversibilité” des taux de transitions:

$$W(c' \rightarrow c) = W(c \rightarrow c')$$

- L'équation Maître devient alors:

$$\frac{dP(c, t)}{dt} = \sum_{c' \neq c} W(c' \rightarrow c) [P(c', t) - P(c, t)]$$

- On voit donc de manière évidente que la distribution microcanonique $P_{eq}(c) = \frac{1}{\Omega}$ est bien stationnaire
- Est-ce la seule ? Y converge-t-on ?

I. Cas microcanonique : croissance de l'entropie

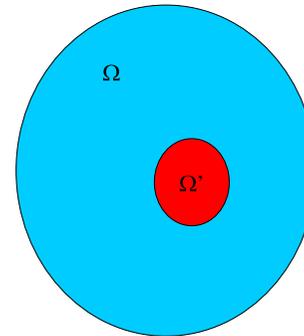
- On introduit l'entropie statistique de Boltzmann, dépendant du temps:

$$S(t) = -k \sum_{\mathcal{C}} P(\mathcal{C}, t) \ln P(\mathcal{C}, t)$$

- S mesure l'“étalement” de $P(\mathcal{C}, t)$ dans l'espace des phases.

$$P(\mathcal{C}, t) = \frac{1}{\Omega'}, \quad \mathcal{C} \in \Omega' \subset \Omega$$

$$P(\mathcal{C}, t) \approx 0, \quad \mathcal{C} \notin \Omega'$$



- Alors $S(t) \approx k \ln \Omega'$; fonction croissante du volume “exploré” :
 $S = 0$ si $\Omega' = 1$, $S = S_{\max}$ si $\Omega' = \Omega$

I. Cas microcanonique : croissance de l'entropie

- Calcul de l'évolution de l'entropie: $d(x \ln x) = (\ln x + 1)dx$

$$\frac{dS(t)}{dt} = -k \sum_{\mathcal{C}} \frac{dP(\mathcal{C}, t)}{dt} (\ln P(\mathcal{C}, t) + 1) = -k \sum_{\mathcal{C}} \ln P(\mathcal{C}, t) \frac{dP(\mathcal{C}, t)}{dt}$$

- On y injecte l'équation Maître microcanonique

$$\frac{dP(\mathcal{C}, t)}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) [P(\mathcal{C}', t) - P(\mathcal{C}, t)]$$

- Donc

$$\frac{dS}{dt} = -k \sum_{\mathcal{C}} \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) [P(\mathcal{C}', t) - P(\mathcal{C}, t)] \ln(P(\mathcal{C}, t))$$

I. Cas microcanonique : croissance de l'entropie

- Grosse astuce: on permute les sommes sur \mathcal{C} et \mathcal{C}' et on somme les résultats:

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} = & -\frac{k}{2} \sum_{\mathcal{C}} \sum_{\mathcal{C}'} \left[W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \left[P(\mathcal{C}', t) - P(\mathcal{C}, t) \right] \ln(P(\mathcal{C}, t)) \right] \\ & + \left[W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \left[P(\mathcal{C}, t) - P(\mathcal{C}', t) \right] \ln(P(\mathcal{C}', t)) \right] \end{aligned}$$

- On utilise la microreversibilité $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C})$:

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{k}{2} \sum_{\mathcal{C}} \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \left[\left[P(\mathcal{C}', t) - P(\mathcal{C}, t) \right] \left\{ \ln(P(\mathcal{C}, t)) - \ln(P(\mathcal{C}', t)) \right\} \right]$$

I. Cas microcanonique : croissance de l'entropie

- Ainsi

$$\frac{dS}{dt} = -\frac{k}{2} \sum_{\mathcal{C}} \sum_{\mathcal{C}'} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \left[[P(\mathcal{C}', t) - P(\mathcal{C}, t)] \left\{ \ln(P(\mathcal{C}, t)) - \ln(P(\mathcal{C}', t)) \right\} \right]$$

- Mais:

$$\left[P(\mathcal{C}) - P(\mathcal{C}') \right] \ln \left(\frac{P(\mathcal{C}')}{P(\mathcal{C})} \right) \leq 0, \quad \forall P(\mathcal{C}), P(\mathcal{C}')$$

- Donc $\frac{dS}{dt}$ est une somme de termes tous positifs ou nuls !
- Interprétation microscopique de la croissance de l'entropie en fonction du temps !

I. Cas microcanonique : équilibre

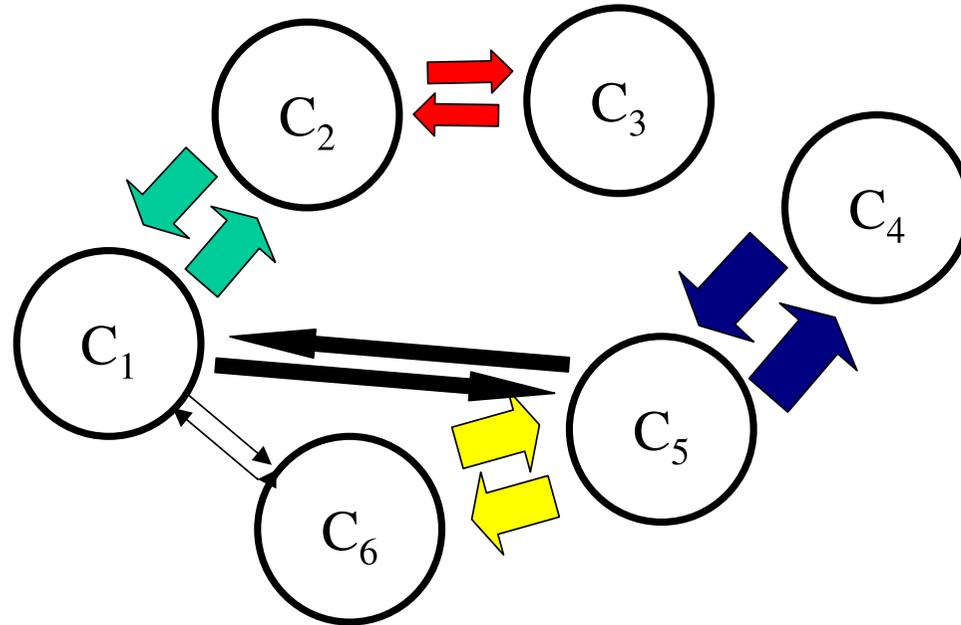
- A l'équilibre, on doit avoir : $\frac{dS}{dt} = 0$

- Ce qui entraîne :

$$W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) [P(\mathcal{C}) - P(\mathcal{C}')] \ln \left(\frac{P(\mathcal{C}')}{P(\mathcal{C})} \right) = 0, \quad \forall \mathcal{C}, \mathcal{C}'$$

- Si les états sont connectés, $W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) > 0$, alors $P(\mathcal{C}) = P(\mathcal{C}')$
- De proche en proche, s'il existe un chemin qui connecte \mathcal{C} à \mathcal{C}' , même faiblement, $P(\mathcal{C}) = P(\mathcal{C}')$

Evolution microcanonique



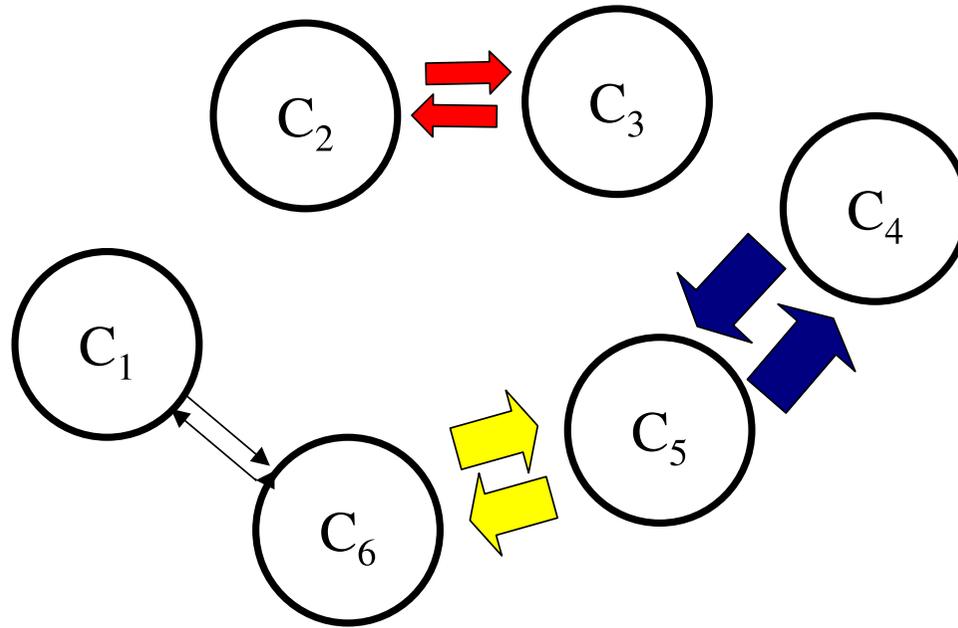
Equilibre uniforme même si $W(C' \rightarrow C) \rightarrow 0$

I. Cas microcanonique : équilibre

- Tous les états *accessibles* sont équiprobables (équilibre microcanonique)
- Il peut exister plusieurs composantes non connectées, l'équilibre s'établit alors indépendamment dans chacune d'entre elles – importance de la condition initiale
- Rq : Analogie électrique – Réseau de résistances

$$\frac{dQ(\mathcal{C}, t)}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} I(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} \sigma(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) [V(\mathcal{C}', t) - V(\mathcal{C}, t)]; \quad Q = CV$$

Evolution microcanonique



Plusieurs composantes "ergodiques"

I. Cas canonique : Bilan détaillé

- Pour l'ensemble Système (S) + Réservoir (R), on a “microreversibilité” :

$$\mathcal{W}(C'_R, C'_S \rightarrow C_R, C_S) = \mathcal{W}(C_R, C_S \rightarrow C'_R, C'_S)$$

- Mais les taux de transitions effectifs concernant le système seul sont modifiés par la différence du nombre d'états cibles du réservoir:

$$E(C'_S) > E(C_S) \implies S_R(E_T - E(C'_S)) < S_R(E_T - E(C_S))$$

La probabilité de passer de C_S à C'_S est réduite par la diminution des possibilités du réservoir: $S_R(E_T - E(C_S)) \approx S_R(E_T) - \frac{1}{kT} E(C_S)$

I. Cas canonique : Bilan détaillé

- Conséquence: Relation (dite) de Bilan Détaillé –

$$W(\mathcal{C}'_S \rightarrow \mathcal{C}_S) = W(\mathcal{C}_S \rightarrow \mathcal{C}'_S) \exp \left[\frac{E(\mathcal{C}'_S) - E(\mathcal{C}_S)}{kT} \right]$$

- Plus dur de remonter en énergie que de descendre – surtout à basse température
- $T \rightarrow \infty$: $W(\mathcal{C}'_S \rightarrow \mathcal{C}_S) = W(\mathcal{C}_S \rightarrow \mathcal{C}'_S)$

I. Cas canonique : approche de équilibre

- Equation Maître canonique:

$$\frac{dP(\mathcal{C}, t)}{dt} = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \left[P(\mathcal{C}', t) - P(\mathcal{C}, t) e^{\frac{E(\mathcal{C}) - E(\mathcal{C}')}{kT}} \right]$$

- On vérifie à vue que la distribution d'équilibre de Boltzmann

$$P_{eq}(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} e^{-E(\mathcal{C})/kT}$$

est bien stationnaire:

$$W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P_{eq}(\mathcal{C}') = W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') P_{eq}(\mathcal{C})$$

- Est-ce la seule ? Y converge-t-on ?

I. Approche de équilibre : Energie libre

- Introduisons l'énergie libre dépendant du temps $F(t)$:

$$F(t) = \sum_{\mathcal{C}} E(\mathcal{C})P(\mathcal{C}, t) + k_B T \sum_{\mathcal{C}} P(\mathcal{C}, t) \ln(P(\mathcal{C}, t))$$

- On peut maintenant montrer (cf. PC) que l'équation Maître canonique implique:

$$\frac{dF}{dt} \leq 0$$

- $\frac{dF}{dt}$ est une somme de termes tous négatifs ou nuls
- Si l'espace des phases est connecté, la distribution de Boltzmann est la seule solution stationnaire, et tous les termes de la somme sont nuls (flux entrant = flux sortant)

I. Approche de équilibre : remarques

- L'équation Maître permet (en principe) de calculer le temps de relaxation vers l'équilibre (cf. PC)
- Système loin d'une transition de phase $\tau_{eq} \sim \tau_{micro}$ (collisions, retournements, etc.)
- τ_{eq} est beaucoup plus petit que le temps nécessaire à explorer les e^N configurations – heureusement ! (cf. PC):

Rq: $P(\mathcal{C}, t \gg \tau_{eq})$ ne varie plus dans le temps – même si \mathcal{C} n'a pas encore été observé

I. Approche de équilibre : remarques

- $\tau_{eq} \rightarrow \infty$ lorsque l'on se rapproche d'une transition du second ordre ($\xi \rightarrow \infty$) – exemple: transition Para-Ferro
- Une transition de phase est une fragmentation spontanée de l'espace des phases – le passage d'une “poche” à l'autre prend un temps infini (brisure d'ergodicité)

II. La Méthode Monte-Carlo – Idée générale

- Dans un très grand nombre de situations, il faut estimer une valeur moyenne de type:

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \sum_{\mathcal{C}} P(\mathcal{C}) \mathcal{O}(\mathcal{C})$$

où la somme porte sur un très grand nombre de termes.
Exemples:

- Observables thermodynamiques (e^N termes)
- Intégrales de grande dimension (ex: MQ à N particules)
- Solution de certaines EDP (Chaleur, Radiation, etc.)
- Risques et produits dérivés en finance: moyennes sur les histoires futures possibles des prix, etc. etc.

II. La Méthode Monte-Carlo – Idée générale

- Comment échantillonner de manière parcimonieuse et non biaisée la loi de probabilité $P(\mathcal{C})$?
- Idée générale du Monte-Carlo: inventer une dynamique fictive dans l'espace des configurations, i.e. un algorithme d'évolution

$$\mathcal{C}_0 \longrightarrow \mathcal{C}_1 \longrightarrow \dots \mathcal{C}_t \longrightarrow \mathcal{C}_{t+1} \longrightarrow \dots \mathcal{C}_M$$

tel que la probabilité stationnaire de cette dynamique soit précisément $P(\mathcal{C})$

- Cette dynamique fictive peut être réaliste ou totalement irréaliste, pourvu que le “bon” $P(\mathcal{C})$ soit engendré

II. La Méthode Monte-Carlo – Histoire

- Mesure de π en jetant des cailloux au hasard...



$$\pi = 4 \frac{P(\text{cercle})}{P(\text{carré})}$$

- Projet Manhattan: simuler des trajectoires de neutrons dans l'uranium, avec diffusion, prolifération et absorption



- Besoin d'un générateur de nombres aléatoires fiable (pas si facile...)

II. L'algorithme de Metropolis (1953)

- On suppose la configuration \mathcal{C}_t connue
- On définit un certain voisinage $\mathcal{V}(\mathcal{C}_t)$ qui regroupe l'ensemble des configurations accessibles à partir de \mathcal{C}_t

- Exemple: pour le problème d'échange des pièces de 1 Euro

$$\mathcal{C}_t = \{n_1, n_2, \dots, n_N\} \quad \sum_i n_i = N$$

et

$$\{n_1, n_2, \dots, n_i \pm 1, \dots, n_j \mp 1, \dots, n_N\} \in \mathcal{V}(\mathcal{C}_t)$$

- Autres exemples: retournement d'un spin dans le modèle d'Ising ; mouvement d'un atome dans un modèle de liquide

II. L'algorithme de Metropolis (1953)

- 1. On choisit une configuration cible \mathcal{C}_t^* dans $\mathcal{V}(\mathcal{C}_t)$
- 2. On calcule l'énergie de cette configuration cible, $E(\mathcal{C}_t^*)$
- 3. On compare cette énergie cible à l'énergie initiale:
 - Si l'énergie baisse, $E(\mathcal{C}_t^*) < E(\mathcal{C}_t)$, la configuration cible est acceptée et devient la nouvelle configuration: $\mathcal{C}_{t+1} = \mathcal{C}_t^*$
 - Si l'énergie remonte: $\Delta = E(\mathcal{C}_t^*) - E(\mathcal{C}_t) > 0$
 - * Avec prob. $p = e^{-\Delta/kT}$, on accepte cette configuration quand même $\mathcal{C}_{t+1} = \mathcal{C}_t^*$
 - * Avec prob $1 - p$, on refuse cette configuration et $\mathcal{C}_{t+1} = \mathcal{C}_t$

II. Monte-Carlo: équation Maître

- Ecrivons l'équation Maître correspondant à cette dynamique:

$$P(\mathcal{C}, t + 1) - P(\mathcal{C}, t) = - \sum_{\mathcal{C}' \in \mathcal{V}(\mathcal{C})} W_{MC}(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') P(\mathcal{C}, t) + \sum_{\mathcal{C}' \in \mathcal{V}(\mathcal{C})} W_{MC}(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', t)$$

- Assymétrie des taux de transitions: si $E(\mathcal{C}') < E(\mathcal{C})$

$$W_{MC}(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') = \frac{1}{\#\mathcal{V}(\mathcal{C})} \quad W_{MC}(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) = \frac{\exp\left[\frac{E(\mathcal{C}') - E(\mathcal{C})}{kT}\right]}{\#\mathcal{V}(\mathcal{C}')}$$

- Si les voisinages sont de même cardinal, Bilan Détaillé !

$$W_{MC}(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) = W_{MC}(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \exp\left[\frac{E(\mathcal{C}') - E(\mathcal{C})}{kT}\right]$$

II. Monte-Carlo: équation Maître

- On sait donc que si $\#\mathcal{C}$ est fini, et qu'il existe un "chemin" qui relie toutes les configurations entre elles, alors à temps longs:

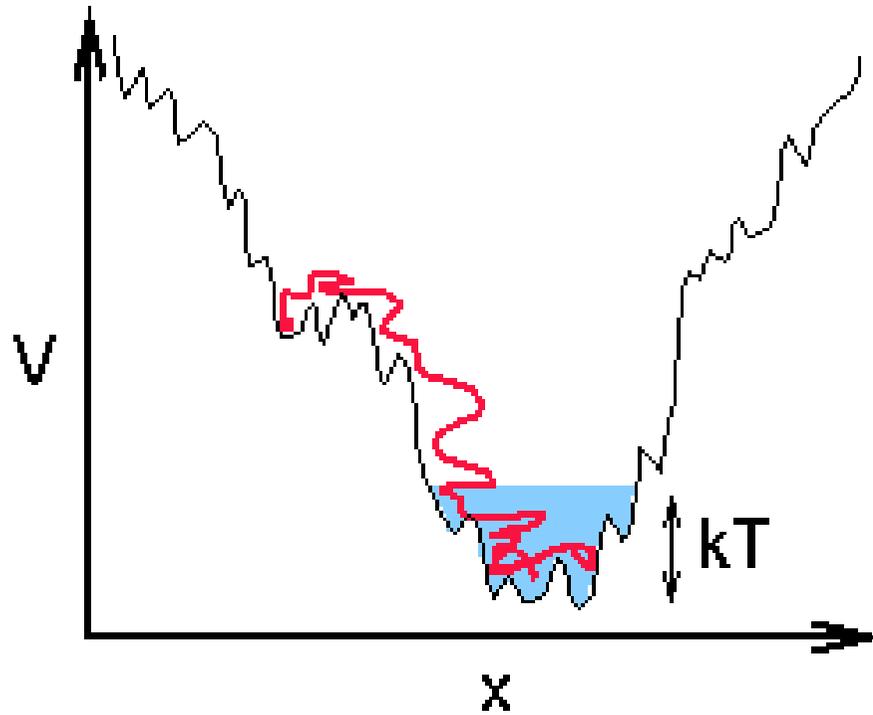
$$P(\mathcal{C}, t \rightarrow \infty) \rightarrow P_{eq}(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} \exp\left[-\frac{E(\mathcal{C})}{kT}\right]$$

- On peut donc calculer les moyennes thermodynamiques comme des moyennes sur de longues trajectoires Monte-Carlo :

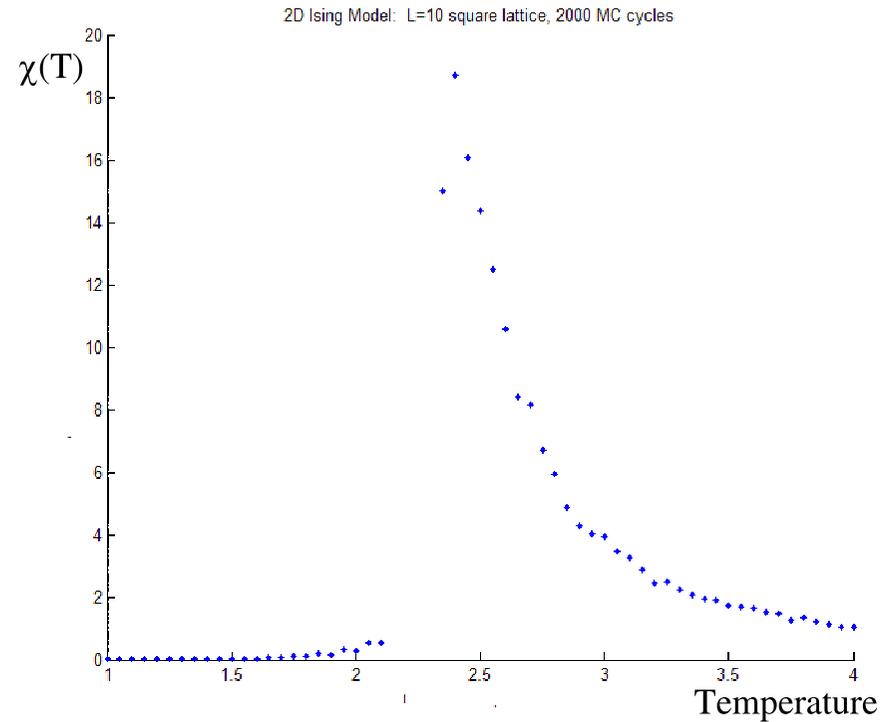
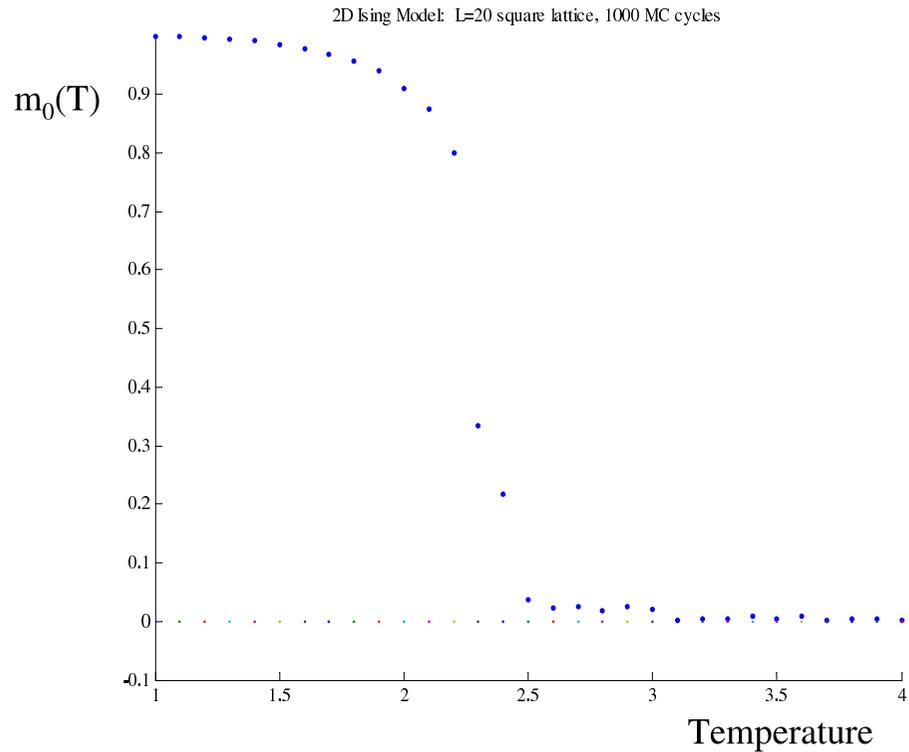
$$\langle \mathcal{O} \rangle \equiv \sum_{\mathcal{C}} P_{eq}(\mathcal{C}) \mathcal{O}(\mathcal{C}) \approx_{M \gg 1} \frac{1}{M} \sum_{t=\tau_{eq}}^{\tau_{eq}+M} \mathcal{O}(\mathcal{C}_t)$$

- La dynamique fait apparaître les configurations avec leur poids naturel: on n'engendre pas de configurations dont le poids est très faible

Monte-Carlo: représentation imagée



Exemple: modèle d'Ising 2d



Aimantation et susceptibilité du modèle d'Ising 2d

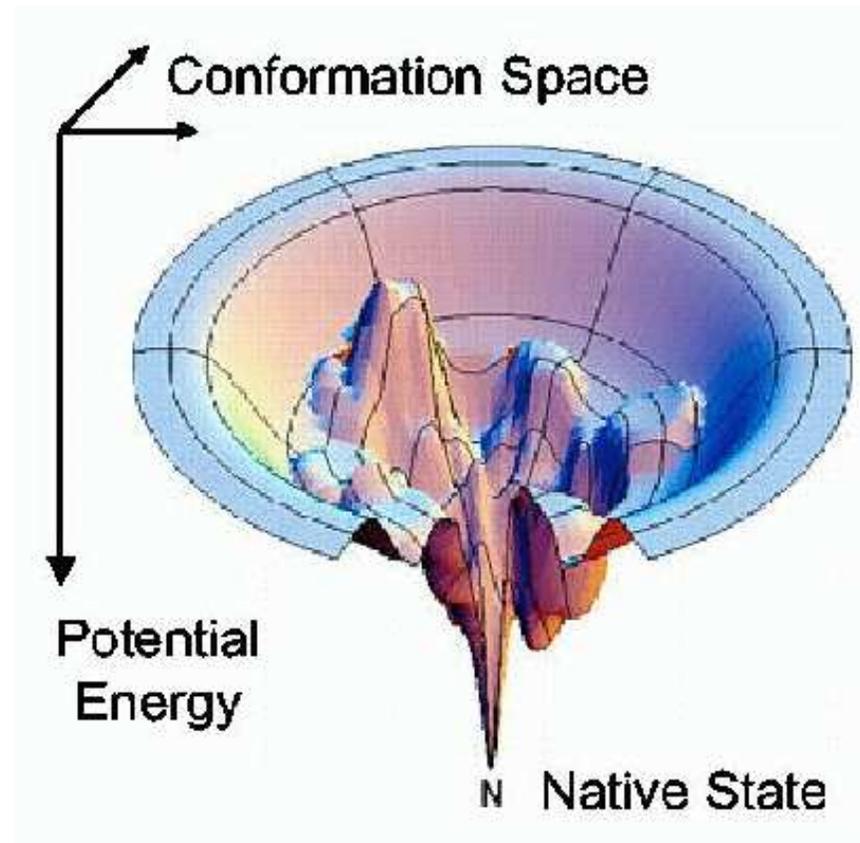
II. Monte-Carlo: convergence

- Convergence de l'algorithme:
 - $P(\mathcal{C}, t)$ doit atteindre l'équilibre: $M \gg \tau_{eq}$
 - Même si on partait de $P_{eq}(\mathcal{C})$, on s'attend à une erreur statistique de:

$$\varepsilon[\langle \mathcal{O} \rangle] \sim \sqrt{\frac{\langle \mathcal{O}^2 \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2}{M}}$$

- Difficulté: souvent τ_{eq} est très grand, lorsque le paysage d'énergie est accidenté et que la température est basse

Paysages d'énergie



Paysage "rugueux" (protéines, verres, etc.)

II. Monte-Carlo et optimisation

- Une remarque fondamentale:

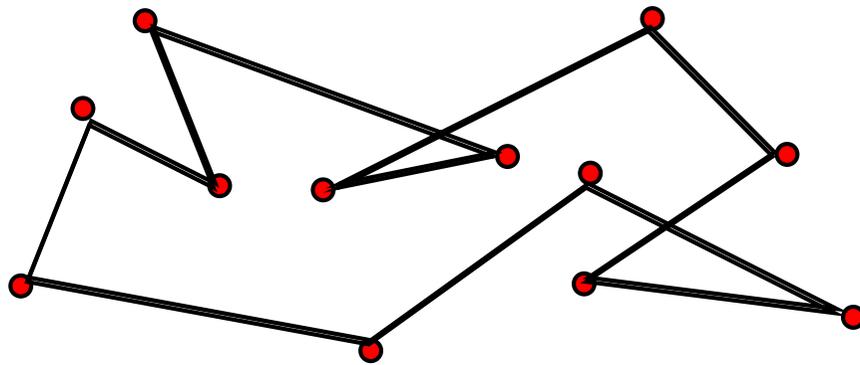
$$P_{eq}(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} \exp\left[-\frac{E(\mathcal{C})}{kT}\right] \xrightarrow{T \rightarrow 0} \delta_{\mathcal{C}, \mathcal{C}_{\min}}$$

où \mathcal{C}_{\min} est la configuration qui minimise l'énergie

- De façon plus générale, on peut faire la mécanique statistique de problèmes d'optimisation, où $E(\mathcal{C})$ est une fonction "coût"

II. Monte-Carlo et optimisation

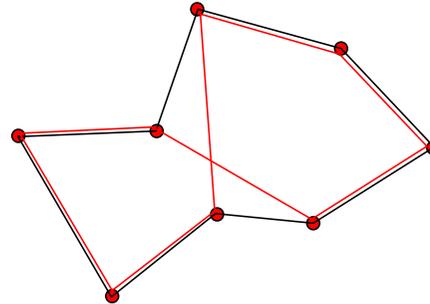
- Exemples: voyageur de commerce, portefeuille de risque minimum, etc.



N points
 $\mathcal{C} =$ tournée; $(N - 1)!/2$
 $E(\mathcal{C}) =$ longueur

II. Monte-Carlo et optimisation: recuit simulé

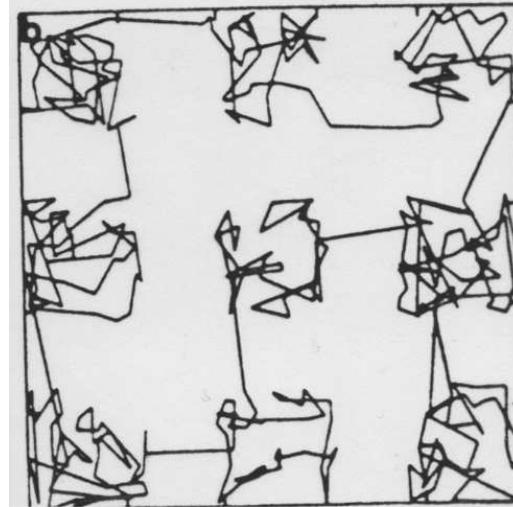
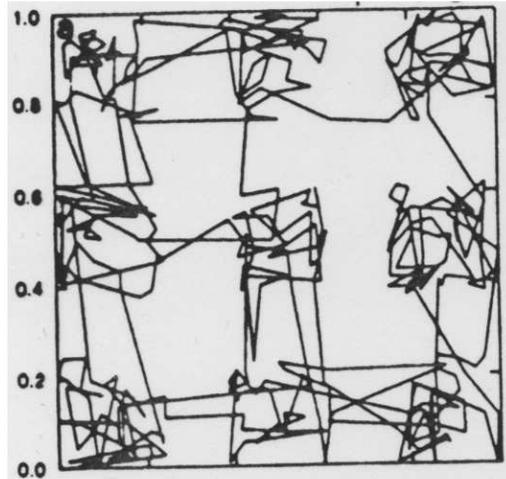
Mouvement élémentaire
= échange de deux liens:



Mouvement proposé = échange de deux liens choisis au hasard.
Accepté ou refusé: Metropolis à la température T .

Recuit simulé = Monte Carlo en diminuant graduellement T .

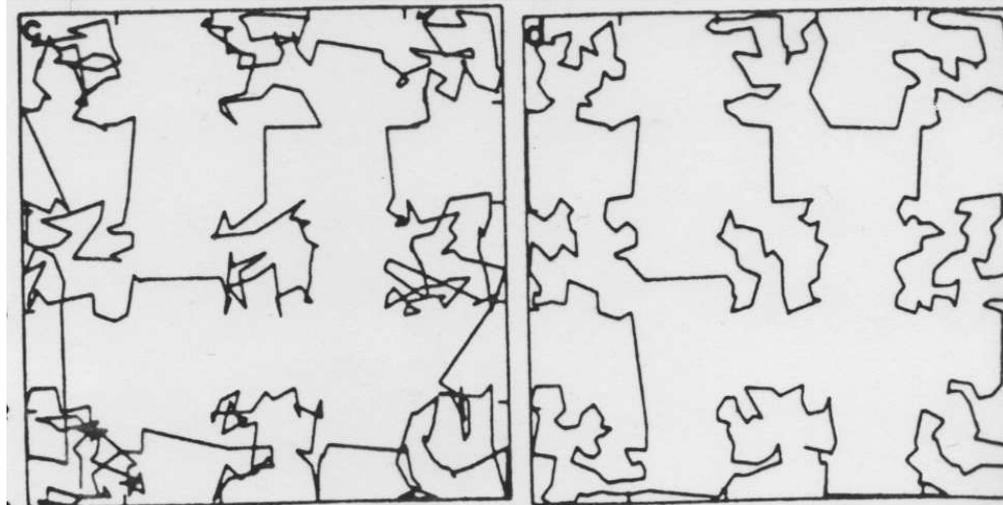
Voyageur de commerce et recuit simulé



$T = 1.2$ et $T = .8$

Voyageur de commerce et recuit simulé

On “refroidit”



$T = 0.4$ et $T = 0$: tournée optimale !

II. La Méthode Monte-Carlo

- Une des dix découvertes majeures du XXème siècle en sciences de l'ingénieur
- Méthode de simulation de modèles de physique statistique réalistes pour lesquels il n'y a pas de solutions exactes – science des matériaux (alliages, verres, aimants, etc.)
- Méthode de calcul d'intégrales de grande dimensions – physique quantique: atomique, électronique, superconductivité, etc.
- Méthode versatile d'optimisation (ex. optimisation de l'irradiation de tumeurs cérébrales)
- Méthode de génération rationnelle de scénarios (Risques, produits dérivés, etc.)