

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE SAIDA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE



SIMULATION DE MONTE CARLO

COURS & EXERCICES

SAHABI TOUFIK

Cours donné aux Mastère 2 physique des matériaux

Janvier 2020

SIMULATION DE MONTE CARLO

COURS & EXERCICES

SAHABI TOUFIK

Avant-propos

Cette polycopie est destinée à la classe de Master 2 spécialité physique des matériaux. Elle représente un cours avec des exercices du module : Simulation Monte Carlo. Durant le premier semestre, et sous forme d'un cours et un TP par semaine, Ce module, donne une introduction aux Méthodes de simulation de Monte Carlo. L'étudiant doit avoir des prérequis dans : les probabilités, les notions des physiques statistiques, et le Maple ou d'autre programme informatique. Après des explications et descriptions de certains problèmes mathématiques, physiques, et même en gestion, on a construit des programmes complets en Maple sous forme de TP pour illustrer le comportement du phénomène en question.

Table des matières

Avant-propos	ii
1 INTRODUCTION GENERALE	1
1.1 Définition.....	2
1.2 Domaines d'applications.....	2
1.3 Exemple introductif.....	2
1.4 Ingrédients nécessaires.....	2
2 ELEMENTS DE PROBABILITE	4
2.1 Expérience aléatoire.....	5
2.2 Propriétés des évènements.....	5
2.3 Probabilité d'un évènement.....	6
2.3.1 Définition.....	6
2.3.2 Propriétés.....	6
2.4 Variable aléatoire.....	7
2.4.1 Définition.....	7
2.4.2 Loi de probabilité.....	7
2.5 Fonction de répartition.....	8
2.6 Densité de probabilité.....	8
2.7 L'espérance d'une variable aléatoire.....	8
2.8 Moment d'ordre n.....	9
2.9 Quelques lois de probabilité.....	9
2.9.1 Lois discrètes.....	9
(a) Loi uniforme discrète.....	9
(b) Loi de Bernoulli.....	10
(c) Loi Binomiale.....	10
(d) loi géométrique.....	10
(e) Loi de Poisson.....	11
2.9.2 Lois continues.....	11

(a) Loi uniforme continue $U(a, b)$	11
(b) La loi exponentielle.....	12
(c) La loi normale $N(\mu, \sigma)$	12
(d) La loi gamma.....	13
2.10 Plusieurs variables aléatoires.....	13
2.10.1 Décomposition d'une variable aléatoire.....	13
2.10.2 Composition de deux variables aléatoires.....	14
Exercices.....	14
3 QUELQUES NOTIONS DE PHYSIQUE STATISTIQUE.....	16
3.1 Introduction.....	17
3.2 État microscopique, état macroscopique.....	17
3.3 Ensembles statistiques.....	17
3.3.1 Ensemble micro-canonique.....	17
3.3.2 L'ensemble canonique.....	18
3.3.3 L'ensemble grand-canonique.....	19
3.4 Les grandeurs thermodynamiques dans l'ensemble canonique.....	19
3.4.1 Énergie interne.....	20
3.4.2 Capacité calorifique.....	20
3.4.3 L'entropie.....	20
3.4.4 Énergie libre.....	21
3.4.5 La pression.....	21
3.4.6 L'aimantation.....	21
3.4.7 La susceptibilité.....	22
3.5 L'hypothèse ergodique.....	22
3.6 Chaîne de Markov.....	23
3.7 Transition de phase et phénomènes critiques.....	23
3.7.1 Transitions du premier ordre.....	24
3.7.2 Transitions du deuxième ordre.....	24
3.8 Magnétisme des matériaux.....	24

3.8.1 Le paramagnétisme.....	24
3.8.2 Le ferromagnétisme.....	25
3.8.3 L'antiferromagnétisme.....	26
3.8.4 Le ferrimagnétisme.....	26
3.8.5 Le diamagnétisme.....	27
3.9 Influence de la température.....	28
4 LES NOMBRES ALEATOIRES.....	30
4.1 Introduction.....	31
4.2 Nombres pseudo-aléatoires.....	31
4.3 Quelques générateurs uniformes des nombres aléatoires.....	31
4.3.1 La méthode de congruence.....	31
4.3.2 Le générateur naturel π	32
4.4 La qualité des générateurs des nombres aléatoires.....	34
4.5 Générateurs non uniformes.....	34
4.5.1 Transformation d'une variable aléatoire.....	34
4.5.2 Transformation inverse.....	35
Exercices.....	37
5 METHODES DE MONTE CARLO EXEMPLES D'APPLICATION.....	39
5.1 Introduction.....	40
5.2 Estimation d'une aire par la méthode de rejet.....	40
5.2.1 Etapes à suivre.....	40
5.2.2 Algorithme (TP 04)	40
5.3 Estimation d'une intégrale bornée.....	43
5.3.1 Méthode de rejet.....	43
5.3.2 Méthode de la valeur moyenne.....	43
5.3.3 Algorithme (TP 05)	44
5.4 Statistique d'un aéroport.....	46
5.4.1 Description.....	47

5.4.2 Algorithme (TP 06)	47
5.5 Gestion d'un stock.....	49
5.6 Le modèle d'Ising.....	50
5.6.1 Définition.....	50
5.6.2 Algorithme de Metropolis.....	51
Etape (1) : Chain de Markov.....	51
Etape (2) : Thermalisation.....	51
Etape (3) : Etude en fonction de la température.....	52
5.6.3 Quelques remarques.....	52
5.6.4 Résultats.....	52
Exercices.....	57
A LA LOI NORMALE.....	59
B LES DECIMALE DE π.....	60
C REPONSES AUX EXERCICES.....	61
Bibliographie.....	63

Liste des tables & figures

<i>Table 2.1 Quelques propriétés des probabilités.....</i>	<i>7</i>
<i>Table 3.1 Température de Curie pour certains matériaux.....</i>	<i>28</i>
<i>Table 5.1 La loi de d'arriver/mn des avions.....</i>	<i>47</i>
<i>Table 5.2 La loi de départs/mn des avions.....</i>	<i>47</i>
<i>Table 5.3 Transformation d'une loi uniforme à la loi de probabilité de X.....</i>	<i>47</i>
<i>Table 5.4 Transformation d'une loi uniforme à la loi de probabilité de Y.....</i>	<i>47</i>
<i>Table 5.5 La distribution de la quantité de voiture demandée.....</i>	<i>49</i>
<i>Table 5.6 La distribution de délai de livraison.....</i>	<i>49</i>
<i>Table 5.7 Simulation de Gestion pendant 10 jours.....</i>	<i>50</i>
<i>Figure (2.1) La loi uniforme.....</i>	<i>12</i>
<i>Figure (2.2) Fonction de répartition de la loi uniforme.....</i>	<i>12</i>
<i>Figure (2.3) La loi exponentielle.....</i>	<i>12</i>
<i>Figure (2.4) Fonction de répartition de la loi exponentielle.....</i>	<i>12</i>
<i>Figure (2.5) La loi normale.....</i>	<i>13</i>
<i>Figure (2.6) Fonction de répartition de la loi normale.....</i>	<i>13</i>
<i>Figure (3.1) Transitions de phase du premier ordre en thermodynamique.....</i>	<i>23</i>
<i>Figure (3.2) Diagramme (pression, température) montrant les domaines d'existence de trois phases (solide, liquide, gaz)</i>	<i>24</i>
<i>Figure (3.3) Alignement des électrons en présence d'un champ magnétique dans le cas d'un matériau paramagnétique.....</i>	<i>25</i>
<i>Figure (3.4) Orientation des électrons lors d'une application d'un champ magnétique pour un matériau antiferromagnétique.....</i>	<i>26</i>
<i>Figure (3.5) Le moment magnétique total de l'échantillon n'est pas nul dans le cas d'un matériau ferrimagnétique.....</i>	<i>27</i>
<i>Figure (3.6) Matériau diamagnétique.....</i>	<i>28</i>

<i>Figure (3.7) Diagramme (champ magnétique, température) pour un corps qui présente une transition ferromagnétique.....</i>	<i>29</i>
<i>Figure (3.8) Courbe d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique à différentes températures.....</i>	<i>29</i>
<i>Figure (3.9) Diagramme de phase montre un point tri critique pour un matériau antiferromagnétique.....</i>	<i>29</i>
<i>Figure (5.1) Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches hautes et basses représentent des spins positifs et négatifs respectivement.....</i>	<i>50</i>

Chapitre 1
INTRODUCTION GENERALE

1.1 Définition

Les méthodes de simulation sont des méthodes servant à reconstruire le système à étudier de façon fictif et pareille à l'original et par conséquent faire une approche qui nous servent de résoudre les problèmes liés à ce système.

Parmi les simulations les plus puissantes aujourd'hui, on cite les simulations de Monte-Carlo qui sont des méthodes numériques basées sur des procédés aléatoires ont pour objectifs trouver –particulièrement- des solutions pour les systèmes comportement aléatoire et non aléatoire également, ainsi que vérifier les résultats analytiques de tels systèmes. Cette méthode devient plus efficace après l'évolution énorme des ordinateurs.

1.2 Domaines d'applications

La méthode de Monte-Carlo et la simulation en général trouvent des applications dans

- La physique
- Mathématique
- L'économie
- La médecine
- Sociologie

Et plusieurs d'autres domaines.

1.3 Exemple introductif

On peut simuler la radioactivité d'un nombre N_0 suffisamment grand de noyaux pour un élément radioactif (par exemple $^{14}\text{C}^*$ qui devient ^{14}N) par lancement de N_0 dés ou on fait la correspondance entre un chiffre (ou plus) et la désintégration de noyau. Si on choisit par exemple le chiffre 1 pour représenter un noyau stable qui était instable, et les autres chiffres de 2 à 6 représentent des noyaux encore instables, alors on a après le premier lancement $N_0/6$ des noyaux deviennent stables, et restent $5N_0/6$ instables. Après le deuxième lancement, on a $1/6(\frac{5N_0}{6})$ noyaux stables, et ainsi de suite. Cela nous ramène à une loi exponentielle de la forme

$$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t) \quad (1.1)$$

où $N(t)$ étant le nombre des noyaux instable à lancement t . λ est une constante dépend de notre choix concernant le chiffre représentant les noyau désintégrés. T représente le nombre de lancers (ou le pas de Monte-Carlo).

1.4 Ingrédients nécessaires

Pour la simulation de Monte-Carlo, on doit avoir des bonnes prérequis dans

- La probabilité

- La physique statistique
- Langage informatique. (Dans ce cours on va utiliser le Maple)

Chapitre 2
ELEMENTS DE PROBABILITE

2.1 Expérience aléatoire

Une expérience aléatoire est une expérience dont le résultat est soumis au hasard. On appelle ce résultat un évènement aléatoire.

Exemple : Le lancement de deux pièces de monnaie.

L'ensemble des évènements est représenté par l'ensemble Ω

$$\Omega = \{pp, pf, fp, ff\} \quad (2.1)$$

Un évènement A est représenté par l'ensemble ω une partie de Ω .

2.2 Propriétés des évènements

- a) A chaque évènement A, on associe son contraire \bar{A} représenté par ensemble complémentaire de ω dans Ω .

Exemple : L'évènement contraire de l'évènement A : "Obtenir ou moins une pile" est l'évènement \bar{A} : "n'obtenir aucun pile" tels que

$$\begin{aligned} \omega &= \{pp, pf, fp\} \\ \bar{\omega} &= \{ff\} \end{aligned} \quad (2.2)$$

- b) La réalisation des deux évènements A_1 et A_2 en même temps se traduit par l'intersection de leurs ensembles respectivement : $\omega_1 \cap \omega_2$

Exemple :

- Obtenir au moins une pile se traduit par

$$\omega_1 = \{pp, pf, fp\} \quad (2.3)$$

- Obtenir une face se traduit par

$$\omega_2 = \{pf, fp\} \quad (2.4)$$

La réalisation de deux évènements se traduit par

$$\omega_1 \cap \omega_2 = \{pf, fp\} = \omega_2 \quad (2.5)$$

- c) La réalisation de l'un des évènements A_1 ou A_2 se traduit par l'ensemble : $\omega_1 \cup \omega_2$

Exemple : Dans l'ensemble précédent

$$\omega_1 \cup \omega_2 = \omega_1 \quad (2.6)$$

- d) L'évènement certain est réalisé quel que soit le résultat de l'expérience.

Exemple : Obtenir une pile ou une face.

- e) L'évènement impossible ne soit pas réaliser quel que soit le résultat.

Exemple : obtenir 3 faces.

f) Deux évènements A_1 , et A_2 sont incompatibles s'ils ne se réalisent pas en même temps

Exemple :

- Obtenir deux faces
- Obtenir une pile

et on a

$$\omega_1 \cap \omega_2 = \phi \quad (2.7)$$

g) Deux évènements A_1 , et A_2 sont indépendants si la réalisation de l'un n'affecte pas la réalisation de l'autre.

Exemple :

- Obtenir une pile sur la pièce 1
- Obtenir une face sur la pièce 2

Généralement, deux évènements associés aux deux expériences différentes sont indépendants.

2.3 Probabilité d'un évènement

2.3.1 Définition

La probabilité d'un évènement A représente sa chance de se réaliser lors d'un nombre N très grand de répétition d'une expérience aléatoire. Elle est définie par

$$p = \frac{\text{card}(\omega)}{\text{card}(\Omega)} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_\omega}{N} \quad (2.8)$$

où N_ω est le nombre d'observation de l'évènement ω pendant N répétitions.

Exemple :

La probabilité d'un évènement A : Obtenir au moins une pile est $p(A) = \frac{3}{4}$.

2.3.2 Propriétés

On résume les propriétés dans le tableau suivant

L'évènement	L'ensemble	Probabilité	Propriétés
Quelconque A	ω	$p(A)$	$0 \leq p(A) \leq 1$ $\sum_i p(A_i) = 1$

Contraire \bar{A}	$\bar{\omega}$	$p(\bar{A})$	$p(\bar{A}) = 1 - p(A)$
Impossible	ϕ	0	///
Certain	Ω	1	///
Réalisation des deux événements A_1 , et A_2	$\omega_1 \cap \omega_2$	$p(A_1 \text{ et } A_2)$	///
Réalisation de l'un des deux événements A_1 , ou A_2	$\omega_1 \cup \omega_2$	$p(A_1 \text{ ou } A_2)$	$p(A_1 \text{ ou } A_2) = p(A_1) + p(A_2) - p(A_1 \text{ et } A_2)$
Deux événements A_1 , et A_2 incompatibles	$\omega_1 \cap \omega_2 = 0$	0	///
Deux événements A_1 , et A_2 indépendants	///	$p(A_1 \text{ et } A_2)$	$p(A_1 \text{ et } A_2) = p(A_1) \cdot p(A_2)$
L'évènement A conditionnel B	///	$p(A/B)$	$p\left(\frac{A}{B}\right) = \frac{p(A_1 \text{ et } A_2)}{p(B)}$

Table 2.1 Quelques propriétés des probabilités

2.4 Variable aléatoire

2.4.1 Définition

Pour chaque résultat ω , d'une expérience aléatoire, on associe une application $\varnothing(\omega) = X$ appelée variable aléatoire pouvant prendre des valeurs réelles ou logiques (vrai, faux).

Exemple :

On jet deux dés dont les faces sont colorées différemment deux à deux. On définit les deux variables aléatoires :

X_1 : La somme des deux chiffres apparents (réel)

X_2 : Le couleur de la face supérieur (logique).

2.4.2 Loi de probabilité

Une loi de probabilité est une application qui relie chaque valeur de X par la probabilité correspondante. Si les valeurs de X sont continues, alors la loi est continue, et si elles sont discrètes, la loi est dite discrète.

Exemple : Dans l'exemple précédent, on trace le tableau de la variable aléatoire donnant la somme des deux chiffres apparents

X_i	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$p(X_i)$	1/36	2/36	3/36	4/36	5/36	6/36	7/36	8/36	9/36	10/36	11/36

2.5 Fonction de répartition

Pour une variable aléatoire réelle, on définit la fonction de répartition par la probabilité

$$F(x) = p(-\infty \leq X \leq x) \quad (2.9)$$

avec la propriété $\lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1$

2.6 Densité de probabilité

Pour une variable aléatoire continue, on définit la densité de probabilité sur l'intervalle $[a, b]$ par la fonction f qui doit être

- Continue sur $[a, b]$
- Positive sur $[a, b]$
- Normalisée sur $[a, b]$ ($\int_a^b f(t)dt = 1$)

Dans ce cas, on définit la probabilité

$$p(\alpha \leq x \leq \beta) = \int_{\alpha}^{\beta} f(t)dt \quad (2.10)$$

et sa version infinitésimale

$$dp(x \leq t \leq x + dx) = f(t)dt \quad (2.11)$$

Si $\alpha \rightarrow -\infty$, on obtient la fonction de répartition $F(\beta)$

2.7 L'espérance d'une variable aléatoire

Il représente la valeur moyenne de la variable aléatoire X parmi ses valeurs. On écrit alors pour une loi discrète et continue respectivement

$$E(X) = \langle X \rangle = \sum_i X_i p_i$$

$$E(X) = \langle X \rangle = \int_a^b t f(t) dt \quad (2.12)$$

2.8 Moment d'ordre n

Il est défini par la valeur moyenne de X^n

$$E(X^n) = \sum_i X_i^n p_i$$

$$E(X^n) = \int_a^b t^n f(t) dt \quad (2.13)$$

Le moment d'ordre « 2 » de $(X - E(X))$ est appelé variance. Il mesure la dispersion des valeurs de X autour de $E(X)$

$$\begin{aligned} \text{Var}(X) &= E \left[(X - E(x))^2 \right] \\ &= E(X^2) - E(X)^2 \end{aligned} \quad (2.14)$$

Ainsi, on définit l'écart-type par la relation

$$\sigma(X) = \sqrt{\text{Var}(X)} \quad (2.15)$$

Note :

La variable aléatoire $(X - E(X)) / \sigma$ a pour espérance « 0 » et un écart type « 1 ». On dit qu'elle est réduite.

Exemple : Soit le jeu de lancer des deux pièces. X la variable aléatoire donnant le nombre de faces à obtenir. Alors, on a la loi

X	0	1	2
$p(X)$	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{4}$

On a

$$\begin{aligned} E(X) &= 0 \left(\frac{1}{4} \right) + 1 \left(\frac{1}{2} \right) + 2 \left(\frac{1}{4} \right) \\ &= 1 \end{aligned} \quad (2.16)$$

et

$$\text{Var}(X) = \frac{1}{2} \quad (2.17)$$

2.9 Quelques lois de probabilité

2.9.1 Lois discrètes

(a) Loi uniforme discrète

Considérons un ensemble de N valeurs de la variable aléatoire $X : \Omega = \{1, 2, 3, \dots, N\}$. On dit qu'on a une loi uniforme si la probabilité d'avoir un nombre quelconque de Ω et la même quel que soit ce nombre. On dit que tous les nombres sont équiprobables d'être choisis

$$p(X = k) = \frac{1}{N} \quad (2.18)$$

La valeur moyenne, et la variance se donnent par

$$E(X) = \frac{N + 1}{2}$$

$$Var(X) = \frac{N^2 - 1}{12} \quad (2.19)$$

où on a utilisé le fait que $E(X^2) = \frac{(N+1)(2N+1)}{6}$

(b) Loi de Bernoulli

Elle est utilisée lorsqu'une expérience n'a que de résultats possibles de probabilités respectivement p et $1 - p$

X	0	1
P	p	$1 - p$

avec X représente le nombre de succès, $E(X) = p$, et $Var(X) = p(1 - p)$. Cette loi est utile dans l'étude d'une population (masculin-féminin) ou dans le contrôle des marchandises (bonne-défectueuse).

(c) Loi Binomiale

Elle est associée à n expérience de Bernoulli avec la loi

$$P(X = k) = C_n^k p^k (1 - p)^{n-k} \quad (2.20)$$

X représente la variable aléatoire donnant le nombre de succès, $E(X) = np$, et $Var(X) = np(1 - p)$.

Exemple :

On lance trois pièces de monnaie. La probabilité d'obtenir exactement deux faces est

$$P(X = 2) = C_3^2 p^2 (1 - p) = 3 \left(\frac{1}{2}\right)^2 \left(\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{8} \quad (2.21)$$

(d) loi géométrique

Elle s'applique pour n répétitions de l'expérience de Bernoulli ayant la variable aléatoire X : « Nombre d'observation jusqu'au premier succès (y inclus) ». Si p étant la probabilité d'avoir un succès et $1 - p$ la probabilité d'échouer, on a

$$P(X = i) = p(1 - p)^{i-1} \quad (2.22)$$

Elle s'applique notamment au problème de file d'attente.

Exemple : On fait le tirage d'un nombre entier entre 0, et 9. La probabilité que le premier zéro apparaisse au cinquième tirage est

$$P(X = 5) = \frac{1}{10} \left(\frac{9}{10}\right)^4 \quad (2.23)$$

La probabilité qu'un quatrième zéro apparaisse au sixième tirage est

$$P(4,6) = C_{6-1}^{4-1} \left(\frac{1}{10}\right)^4 \left(\frac{9}{10}\right)^{6-4} \quad (2.24)$$

Cette probabilité représente le temps d'attente jusqu'au quatrième zéro apparaisse.

(e) Loi de Poisson

Elle est représentée par la probabilité de paramètre λ

$$P(X = k) = \frac{\lambda^k e^{-\lambda}}{k!} \quad (2.25)$$

On trouve que $E(X) = Var(X) = \lambda$

Exemple : Si le nombre moyen d'arriver de client à un guichet par heure est égale à 15, la probabilité d'observer 20 arrivées dans une heure donnée est donnée par une loi de Poisson de paramètre $\lambda = 15$, avec $k = 20$

$$P(X = 20) = \frac{15^{20} e^{-15}}{20!} = 4.2\% \quad (2.26)$$

2.9.2 Loïs continues

(a) Loi uniforme continue $U(a, b)$

Elle est définie par la densité de probabilité (Fig. 2.1)

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & \text{si } x \in [a, b] \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.27)$$

La fonction de répartition s'écrit (Fig. 2.2)

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \frac{1}{b-a} dt = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{si } a \leq x \leq b \\ 1 & \text{si } x \geq b \end{cases} \quad (2.28)$$

On peut avoir $E(X) = \frac{a+b}{2}$, et $Var(X) = \frac{(b-a)^2}{12}$

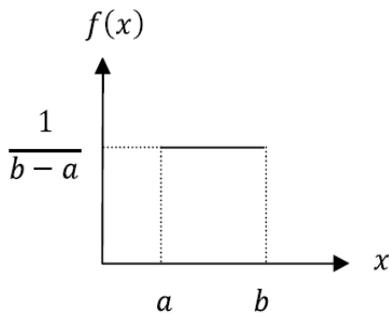


Fig. 2.1 La loi uniforme

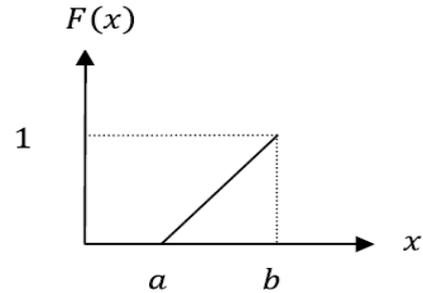


Fig. 2.1 Fonction de répartition de la loi uniforme

Exemple : On tire un nombre au hasard de l'intervalle $[0, 1]$. La probabilité d'avoir un nombre dans $[0, x]$ est x .

(b) La loi exponentielle

Elle est définie par la densité de probabilité (Fig. 2.3)

$$f(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & \text{si } x \in [0, +\infty[\\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.29)$$

λ est une constante positive. La fonction de répartition (Fig. 2.4) s'écrit

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq 0 \\ 1 - e^{-\lambda x} & \text{si } x \geq 0 \end{cases} \quad (2.30)$$

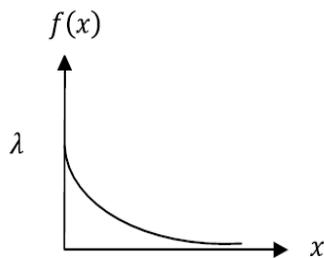


Fig. 2.3 La loi exponentielle

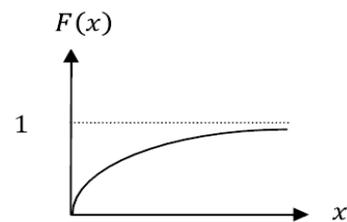


Fig. 2.4 Fonction de répartition de la loi exponentielle

Ainsi, on trouve $E(X) = \frac{1}{\lambda}$, et $Var(X) = \frac{1}{\lambda^2}$.

(c) La loi normale $N(\mu, \sigma)$:

Elle est définie sur tous l'espace par la densité de probabilité (Fig. 2.5)

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (2.31)$$

μ étant la valeur moyenne, et σ l'écart-type. La fonction de répartition est la fonction erreur représentée par la figure 2.6

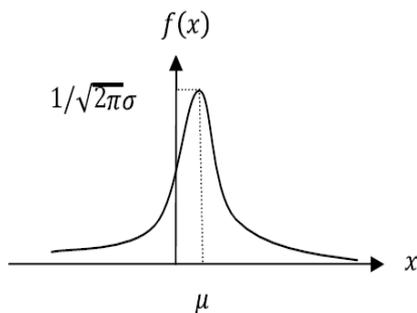


Fig. 2.5 La loi normale

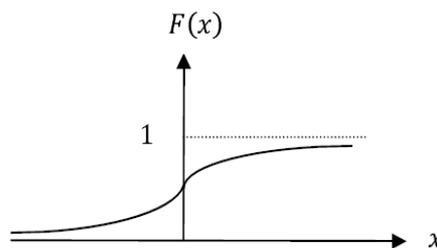


Fig. 2.6 Fonction de répartition de la loi normale

Si $\mu = 0$, et $\sigma = 1$, la loi est dite centrée et réduite. Voir l'annexe A pour certaines valeurs de la fonction de répartition.

(d) La loi gamma:

Considérons r variables aléatoires $X_{i=1,\dots,r}$ indépendantes identiquement distribuées selon la loi exponentielle de paramètre λ . La variable aléatoire $Y = \sum_{i=1}^r X_i$ est distribuée selon la loi gamma de paramètres (λ, r) avec la densité

$$f(y) = \begin{cases} \frac{\lambda^r}{\Gamma(r)} e^{-\lambda y} y^{r-1}, & \text{si } y \in [0, +\infty[\\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.32)$$

La fonction Γ est définie par

$$\Gamma(r) = \int_0^{\infty} x^{r-1} e^{-x} dx \quad (2.33)$$

On trouve $E(X) = \frac{r}{\lambda}$, et $Var(X) = \frac{r}{\lambda^2}$. Quelqu'un peut consulter la référence [1] pour plus de détail concernant d'autres lois.

2.10 Plusieurs variables aléatoires

2.10.1 Décomposition d'une variable aléatoire

Pour une expérience, on peut décomposer une variable aléatoire T en deux variables X , et Y ou plus de même loi tel que

$$E(T) = E(X + Y) = E(X) + E(Y) \quad (2.34)$$

Exemple : On jet deux dés et on cherche la valeur moyenne de la somme de deux chiffres apparents. On sait bien que $E(X) = 7$. Utilisant la propriété (2.34) tels que X est la variable aléatoire donnant le chiffre apparent et la même chose pour Y . On a

$$E(X) = E(Y) = 3.5 \quad (2.35)$$

On trouve

$$E(T) = 3.5 + 3.5 = 7 \quad (2.36)$$

2.10.2 Composition de deux variables aléatoires

Soit deux variables aléatoires X , et Y de lois de probabilités discrètes $p(X_i) = p_i$, et $p(Y_j) = p'_j$. On définit la probabilité du couple (X_i, Y_j) par

$$P(X_i, Y_j) = P_{ij} \quad (2.37)$$

qui est la probabilité d'avoir les deux valeurs X_i , et Y_j en même temps. L'espérance de ce couple se donne par

$$\langle XY \rangle = \sum_{i,j} X_i Y_j P_{ij} \quad (2.38)$$

Si X , et Y sont indépendantes, on a $P_{ij} = p_i p'_j$ et alors

$$\langle XY \rangle = \langle X \rangle \langle Y \rangle \quad (2.39)$$

On définit la covariance des deux variables qui mesure le degré de l'indépendance par

$$Cov(X, Y) = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle \quad (2.40)$$

Si les deux lois sont continues et les deux variables admettent des densités de probabilités respectivement $f(X)$, et $g(Y)$ sur les intervalles D_X , et D_Y , alors le couple admet une densité de probabilité $h(X, Y)$, et on écrit

$$\langle XY \rangle = \iint_{D_X D_Y} h(x, y) x y dx dy \quad (2.41)$$

$$\langle X \rangle \langle Y \rangle = \int_{D_X} x f(x) dx \int_{D_Y} y g(y) dy \quad (2.42)$$

Exercices

2.1 Trois machines A, B, et C produisent respectivement 50%, 30%, et 20% du nombre total de pièces fabriquées dans une usine. Les pourcentages des pièces défectueuses produites par ces machines sont respectivement 3%, 4%, et 5%. On prend au hasard une pièce dans la production. Déterminer la probabilité :

1. Que la pièce soit défectueuse.
2. Qu'elle provienne de la machine A si elle est défectueuse.
3. Qu'elle provienne de la machine B ou C si elle n'est pas défectueuse.

2.2 Loi multinomiale

Une urne contient deux boules noires et une boule blanche. On tire au hasard une boule quatre fois avec remise. Calculer les probabilités pour obtenir :

1. Une boule noire.
2. Deux boules blanches.
3. Une troisième boule noire au quatrième tirage.

On ajout trois boules vertes. Calculer les probabilités pour obtenir :

4. Une boule noire.
5. Une boule noire et une boule verte.

6. Une deuxième boule noire dans le quatrième tirage et une première boule verte dans le deuxième tirage.

2.3 Soit la loi de probabilité définie par la densité :

$$f(x) = \begin{cases} a \ln x & \text{si } x \in [1, e] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, a \text{ est une constante}$$

1. Calculer la valeur de a
2. Déterminer l'espérance $E(X)$ et la variance $Var(X)$
3. Calculer sa fonction de répartition $F(x)$, puis déduire la probabilité pour que la variable aléatoire X soit comprise entre 1 et 2
4. Déterminer la valeur médiane x_m (associée à la probabilité $P = 0.5$)

2.4 Soit deux variables aléatoires X et Y de lois de probabilité conjointe discrètes $P_{ij} = P(X = X_i, Y = Y_j)$ ou continue $h(x, y)$.

1. Démontrer pour une seule loi (de X) les propriétés suivantes :
 - a. $E(aX) = aE(X)$
 - b. $Var(aX) = a^2Var(X)$
2. Si les deux variables sont indépendantes, démontrer que :
 - a. $E(X + Y) = E(X) + E(Y)$,
 - b. $E(XY) = E(X)E(Y)$,
 - c. $Var(X + Y) = Var(X) + Var(Y)$, et
 - d. $Var(XY) = E(X^2)E(Y^2) - E(X)^2E(Y)^2$

2.5 Considérons que la variable aléatoire X « durée de vie (en heures) d'un composant électronique de type donné » suit une loi exponentielle de paramètre $\lambda = 1/100$

1. Ecrire la loi de X .
2. Quelle est la durée de vie moyenne du composant ?
3. Quelle est la probabilité pour que la durée de vie d'un composant soit inférieure à 200 heures ? Soit supérieur à 100 heures ?

2.6 Dans un magasin, des pommes sont stockées avant d'être mises en vente. Les pommes ont des poids que l'on suppose distribués selon une loi normale de moyenne 200 et écart-type 20 (en grammes).

1. À l'aide des tables de la loi normale, déterminer la probabilité qu'une pomme ait un poids compris entre 210 et 220 grammes.
2. Quelle est la probabilité que le poids total de 2 pommes soit compris entre 420 et 440 grammes ? (*Attention : la probabilité n'est pas forcément la même que dans le point précédent !*).
3. Supplémentaire : Quelle est la probabilité pour la différence de poids de deux pommes soit inférieur à 10 grammes ?

Chapitre 3

QUELQUES NOTIONS DE PHYSIQUE STATISTIQUE

3.1 Introduction

La physique statistique est la branche de la physique qui traite le comportement d'une collection ou ensemble de systèmes de structure similaire au système d'intérêt réel, répartis sur une gamme d'états précis différents. Ces systèmes présentent alors un très grand nombre de degrés de liberté comme par exemple les molécules dans un gaz. L'étude de ces états nous permet de faire des prédictions sur ce qui peut être en moyenne pour le comportement global de système qui nous intéresse. Puisque la simulation de Monte Carlo trouve un domaine d'application très important dans la physique statistique, on va présenter ici ses éléments de base pour savoir comment décrire un système statistique moyennant les méthodes de Monte Carlo

3.2 État microscopique, état macroscopique

On distingue dans le domaine de physique statistique deux visions des systèmes. La première vision tient compte de l'état de chaque constituant dans le système (que ce soit particule, atome, molécule, ...etc.) et elle nous demande toute information intrinsèque comme par exemple l'énergie, la vitesse, spin de ce constituant. On appelle cette information état microscopique et l'étude description microscopique. Par contre si on s'intéresse à la vision globale en ne cherchant que les informations sur le groupe complet de ces constituants comme étant un seul objet, on dit qu'on a un état macroscopique et l'étude associée une description macroscopique.

La description macroscopique est l'objectif de la thermodynamique. En fin de l'étude, on peut avoir certains quantités importantes comme l'énergie, la pression, l'entropie, ...etc. La physique statistique essaye de trouver un lien entre les deux descriptions en partant de la description microscopique. On note que sous un état macroscopique, on trouve généralement plusieurs états microscopiques. En effet l'état microscopique d'un système physique fluctue en général au cours du temps, même si celui-ci est à l'équilibre. Sauf pour des systèmes très simples il est impossible de connaître exactement à tout instant ces fluctuations, ne serait ce qu'en raison du très grand nombre de degrés de liberté microscopiques du système.

3.3 Ensembles statistiques

L'outil théorique fondamental de la physique statistique est l'ensemble statistique. C'est une abstraction qui consiste à considérer une collection de copies virtuelles (ou répliques) d'un système physique dans l'ensemble des états accessibles où il est susceptible de se trouver, compte tenu des contraintes extérieures qui lui sont imposées, telles le volume, le nombre de particules, l'énergie et la température. Trois situations particulières pour un système donné sont généralement envisagées en physique statistique, et correspondent aux trois ensembles statistiques suivants

3.3.1 Ensemble micro-canonique

Il est défini dans le cas d'un système isolé thermodynamiquement, c'est-à-dire qui ne peut échanger ni énergie, ni particules avec l'extérieur. Pour un tel système, le volume V ,

l'énergie totale E et le nombre de particules N sont des paramètres extérieurs. À l'équilibre, les états accessibles du système sont équiprobables. Si Ω représente le nombre de ces états alors la probabilité p_l de trouver le système à un état microscopique noté « l » suit une loi uniforme discrète, et on a

$$p_l = \frac{1}{\Omega} = cste \quad (3.1)$$

Dans le cas général où on a un système quelconque, on définit l'entropie comme une grandeur statistique a été proposée par Gibbs

$$S = -K_B \sum_l p_l \ln p_l \ln \Omega \quad (3.2)$$

et il devient dans notre cas

$$S = K_B \ln \Omega \quad (3.3)$$

$K_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ SI étant la constante de Boltzmann.

L'entropie est une grandeur extensive. Pour deux systèmes de températures différentes, la partition la plus probable est celle qui rend les deux températures égales. Si le système n'est pas à l'équilibre, il va évoluer de manière à satisfaire au postulat d'équiprobabilité des états (3.1)

3.3.2 L'ensemble canonique

Dans ce cas le système considéré est supposé en contact avec un système beaucoup plus important, appelé réservoir avec qui il peut échanger librement de l'énergie mais pas de particules ni de volume (contact purement thermique), ces échanges étant considérés comme ne modifiant pas de façon appréciable l'état du réservoir. En pratique, le réservoir impose sa température T au système et devient une contrainte extérieure au même titre que le volume V et le nombre de particules N , l'énergie E pouvant librement fluctuer. La distribution de probabilité prend la forme :

$$p_l = \frac{e^{\beta E_l}}{Z} \quad (3.4)$$

E_l Étant l'énergie du micro-état (l) et

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l} \quad (3.5)$$

représente la fonction de partition du système, avec : $\beta = \frac{1}{k_B T}$. Il n'est qu'une mesure de la température du système, alors que les niveaux d'énergie sont les caractéristiques du système lui-même. Si le nombre de micro-états d'énergie E_l est g_l , on appelle ça une dégénérescence de niveau E_l et on peut écrire.

$$Z = \sum_l g_l e^{-\beta E_l} \quad (3.6)$$

La signification de la fonction de partition Z peut être comprise comme suit : En utilisant la définition (3.6) pour la fonction de partition, la loi de répartition nous donne la probabilité p_l de trouver le système à l'état d'énergie E_l

$$p_l = \frac{n_l}{N} = \frac{e^{-\beta E_l}}{Z} \quad (3.7)$$

Si E_0 désigne l'état d'énergie le plus bas, alors (3.7) devient

$$\frac{n_0}{N} = \frac{A}{Z} \quad (3.8)$$

avec $A = e^{-\beta E_0}$

On peut définir la fonction de partition comme un inverse de la fraction de particules occupant l'état d'énergie la plus basse. En variante, il peut être défini comme le rapport entre le nombre total de particules dans un système et le nombre de particules dans l'état d'énergie la plus basse, à partir de ce point suivant autour de Z émergent:

- Elle indique le mode de distribution des particules dans différents niveaux d'énergie.
- C'est un nombre pur, donc une quantité sans dimension.
- Elle ne peut jamais être nulle, la valeur la plus basse serait 1, au zéro absolu (0 K) où toutes les particules occupent l'état d'énergie la plus basse à une température plus élevée, la valeur de Z est beaucoup plus grande que 1.

3.3.3 L'ensemble grand-canonique

Dans cette situation, le système peut non seulement échanger de l'énergie mais également des particules avec le réservoir, le volume V étant fixe. En pratique, non seulement le réservoir impose sa température T , mais également son potentiel chimique μ qui est l'énergie nécessaire pour ajouter une particule au système, en maintenant le volume et l'entropie constante. La distribution de probabilité prend la forme :

$$p_l = \frac{e^{-\beta(E_l + \mu N_l)}}{\mathcal{Z}} \quad (3.9)$$

N_l étant le nombre de particule du système dans le micro-état l et

$$\mathcal{Z} = \sum_{(l)} e^{-\beta(E_l + \mu N_l)} \quad (3.10)$$

étant la grande fonction de partition du système. La répartition la plus probable de l'énergie et du nombre de particule entre deux sous systèmes ouverts mis en contact est celle qui fait égaliser à la fois les deux températures et les potentiels chimiques, en gardant à l'esprit la signification physique du potentiel chimique, cette dernière condition indique que les deux systèmes n'ont aucun intérêt énergétique, à l'équilibre pour déplacer une particule d'un système à l'autre.

3.4 Les grandeurs thermodynamiques dans l'ensemble canonique

À un instant donné, il est possible de dénombrer N_l les répliques qui au sein des N constituant l'ensemble sont dans un micro-état donné, noté (l) . À la limite où N devient très élevé, la fréquence $\frac{N_l}{N}$ tend vers la probabilité p_l de trouver le système dans ce micro-état au sein de l'ensemble. À l'équilibre, cette probabilité sera indépendante du temps. La détermination de la distribution de probabilité p_l des micro-états du système au sein de cet ensemble permet alors de calculer une grandeur physique donnée Q comme une moyenne d'ensemble. Sous la version discrète cette moyenne s'écrit

$$\langle Q \rangle = \sum_{(l)} p_l Q_l \quad (3.11)$$

où la sommation portant sur tous les micro-états (l) accessibles du système, pour lesquels la grandeur considérée prend la valeur Q_l

3.4.1 Énergie interne

L'énergie moyenne du système est déterminée à partir de

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_l E_l e^{-\beta E_l}}{Z} \quad (3.12)$$

En différenciant Z , nous trouvons que :

$$\langle E \rangle = K_B T^2 \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right) \quad (3.13)$$

3.4.2 Capacité calorifique

De la thermodynamique, la capacité calorifique est définie comme

$$C_v = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V \quad (3.14)$$

Donc en substituant E à partir de (3.13), et en simplifiant le différentiel, on obtient

$$C_v = \frac{\partial}{\partial T} \left(K_B T^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right)_V \quad (3.15)$$

Finalement

$$C_v = \frac{K}{T^2} \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \left(\frac{1}{T} \right)^2} \right)_V \quad (3.16)$$

et en fonction de l'énergie, on peut avoir la relation

$$C_v = K_B \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (3.17)$$

3.4.3 L'entropie

De la thermodynamique, l'entropie est définie comme

$$s_T - s_0 = \int_0^T \frac{C_v}{T} dt \quad (3.18)$$

En utilisant (3.15) pour Cv en (3.18) on obtient

$$s_T - s_0 = \int_0^T \frac{1}{T} \frac{\partial}{\partial T} (KT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T}) dt \quad (3.19)$$

En le différenciant par parties, il devient

$$s_T - s_0 = \frac{E}{T} + K \ln Z - |K \ln Z|_{T=0} \quad (3.20)$$

Dans l'expression (3.20), comparer le terme indépendant de la température à la constante S_0 qui est l'entropie à $t = 0$

$$s_0 = |K \ln Z|_{T=0} \quad (3.21)$$

De (3.20), on obtient

$$s_T = \frac{E}{T} + K \ln Z \quad (3.22)$$

où

$$s_T = KT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial T} \right) + K \ln Z \quad (3.23)$$

3.4.4 Énergie libre

L'énergie libre, est défini thermodynamiquement par

$$F = E - TS \quad (3.24)$$

En remplaçant S , il vient

$$F = E - \left(\frac{E}{T} + K \ln Z \right) \quad (3.25)$$

Nous observons que

$$F = -KT \ln Z \quad (3.26)$$

3.4.5 La pression

En terme d'énergie libre F , la pression est définie par

$$p = - \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)_T \quad (3.27)$$

En utilisant (3.25) pour F , on obtient

$$p = -KT \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_T \quad (3.28)$$

3.4.6 L'aimantation

C'est une grandeur caractéristique d'un corps à l'origine d'un champ magnétique. Elle a pour origine l'existence d'une densité de moments magnétiques microscopiques portés par les électrons au sein de la matière (courants ampériens imaginés par Ampère). On distingue l'aimantation permanente (aimant) de l'aimantation induite, provoquée par un champ magnétique extérieur ou un courant (induction, électroaimant). L'intensité d'aimantation est reliée au champ magnétique B et à son excitation H par la relation

$$B = \mu_0(H + M) \quad (3.29)$$

où μ_0 est la perméabilité du vide, multipliée par une perméabilité relative dans un milieu (équations de Maxwell-Ampère). Pour les modèles de spins sur réseaux, l'aimantation par spin se définit par la relation

$$A = \frac{1}{N} \sum_{i=1..N} S_i \quad (3.30)$$

3.4.7 La susceptibilité

Le matériau interagit avec l'application du champ magnétique. Il est susceptible en champ

$$d\vec{M} = \chi d\vec{H} \quad (3.31)$$

M représente l'aimantation, moments magnétiques par unité de volume, et χ la susceptibilité magnétique volumique (sans dimension). On peut tirer la susceptibilité d'après l'aimantation par la relation

$$\chi = \frac{1}{\beta} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2) \quad (3.32)$$

3.5 L'hypothèse ergodique

Comme on a vu dans la section précédente, le calcul d'une propriété moyenne (quantité thermodynamique) d'un système se donne par ce qu'on appelle une moyenne d'ensemble qui n'est que le moment d'ordre « 1 » ou bien espérance mathématique de cette propriété cf. (2.12). On assure la correspondance entre ces valeurs moyennes d'ensemble et les moyennes temporelles envisagées dans le cas d'un système unique. Ces moyennes prennent la forme

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{t_{eq}}^{t_{max}} Q_i}{t_{max} - t_{eq}} \quad (3.33)$$

On fait la moyenne sous un intervalle $t_{max} - t_{eq}$ suffisamment grand entre deux temps : t_{eq} qui est le temps où l'équilibre commence en observant des petites fluctuations microscopiques, et t_{max} un temps suffisamment large pour avoir des bons résultats. Cette substitution des moyennes d'ensemble aux moyennes temporelles qu'on appelle l'hypothèse ergodique est à la base de la physique statistique, et elle est devenue indispensable pour le

calcul numérique par simulation puisque la connaissance de la fonction de partition n'est toujours évident.

3.6 Chaîne de Markov

Une suite infinie ordonnée X_1, X_2, X_3, \dots de variables aléatoires est une chaîne de Markov si la loi de probabilité conditionnelle de X_{t+1} lorsqu'on se donne les valeurs de X_1, X_2, \dots, X_t se réduit à la loi de probabilité conditionnelle de X_{t+1} lorsqu'on se donne seulement la valeur de X_t . t désigne ici un entier naturel, faisant référence à un temps discret. Si nous nous restreignons aux cas où la loi de probabilité conditionnelle de X_{t+1} lorsqu'on se donne la valeur de X_t ne dépend pas de t , on dit que la chaîne de Markov est homogène. Alors la chaîne de Markov est entièrement déterminée par cette loi de probabilité conditionnelle appelée loi de transition et par la loi de probabilité initiale de la variable aléatoire X_1 . Comme un cas particulier, on peut considérer une suite de configurations d'un système où on associe une suite des micro-états constituant notre chaîne Markovien.

3.7 Transition de phase et phénomènes critiques

Ce domaine est très important et également très riche dans l'étude des modèles statistiques. Nous appellerons phase tous domaine de matière homogène limitée par une surface et présentant une composition, une organisation atomique et des propriétés bien définie. Une transition de phases correspond au passage d'un système initialement sous forme de phase A, vers une autre phase B. L'exemple standard d'une transition de phase est le passage entre les trois états de la matière : liquide, gaz, solide (fig. (3.1))

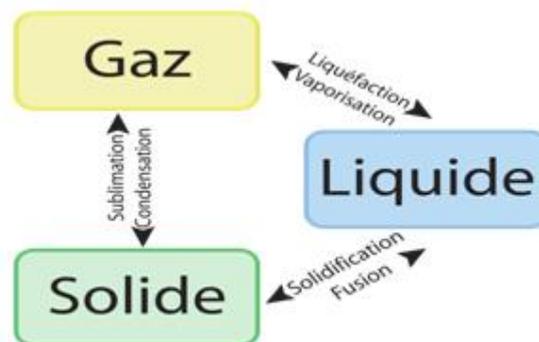


Figure (3.1) Transitions de phase du premier ordre en thermodynamique.

Ce qui caractérise ces transitions, c'est le changement qualitatif, la discontinuité des propriétés. Une petite variation d'un paramètre (température, pression ...) déclenche une modification qualitative spectaculaire. Pour un système donné, on fait varier un certain nombre de paramètres (température, pression, champs extérieurs, etc. ...) pour mettre en évidence les diverses phases du système et en explorer les domaines d'existence, et on consigne les résultats sur une carte : un diagramme de phase (fig. (3.2))

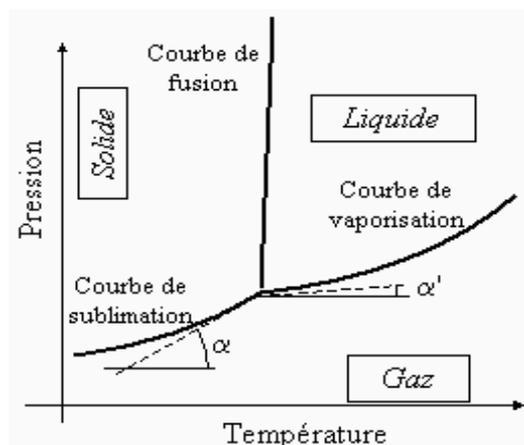


Figure (3.2) Diagramme (pression, température) montrant les domaines d'existence de trois phases (solide, liquide, gaz).

Le point critique est le point d'arrêt à la frontière entre deux phases ou plus de la matière. En tournant autour lui, on peut passer continûment ou discrètement d'une phase à l'autre. On appelle l'étude des points critiques phénomène critique. On distingue deux types de transition de phase

3.7.1 Transitions du premier ordre

Les transitions du premier ordre sont celles pour lesquelles la dérivée première par rapport à une des variables thermodynamiques de l'énergie libre est discontinue (présence d'un « saut » dans cette dérivée). Par exemple, les transitions solide/liquide/gaz sont de premier ordre : la dérivée de l'énergie libre par rapport à la pression est le volume, qui change de manière discontinue lors des transitions.

3.7.2 Transitions du deuxième ordre

Les transitions du deuxième ordre sont celles pour lesquelles la dérivée première par rapport à une des variables thermodynamiques de l'énergie libre est continue, mais pas la dérivée seconde qui présente une discontinuité. La transition paramagnétique/ferromagnétique du fer (en absence de champ magnétique) en est un exemple type : la dérivée première de l'énergie libre par rapport au champ magnétique appliqué est l'aimantation, la dérivée seconde est la susceptibilité magnétique et celle-ci change de manière discontinue à la température dite « de Curie » (ou point de Curie).

3.8 Magnétisme des matériaux

3.8.1 Le paramagnétisme

Le magnétisme habituel, celui qui permet à un aimant de soulever des trombones, c'est le paramagnétisme : c'est le magnétisme du fer et de l'acier, mais aussi du nickel ou du cobalt. Dans les atomes comme ceux du fer, certains électrons, ceux situés en périphérie de l'atome et qui ne participent pas aux liaisons atomiques, sont comme « orientables » (on parle

de moment magnétique de l'électron, qu'on pourrait décrire comme le sens de l'aimant représenté par l'électron). Quand on soumet un échantillon de fer à un champ magnétique, ces électrons s'alignent tous dans le même sens que les lignes de champ du champ magnétique (figure (3.3))

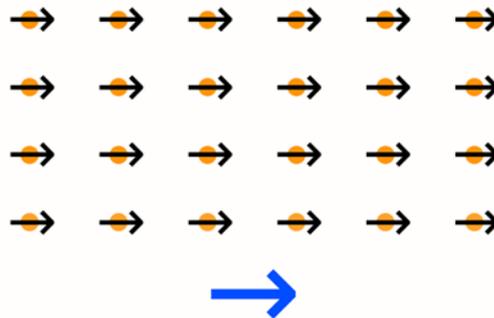


Figure (3.3) Alignement des électrons en présence d'un champ magnétique dans le cas d'un matériau paramagnétique

En résultat, le champ magnétique du matériau et celui de l'aimant s'ajoutent. Le matériau et l'aimant sont alors attirés l'un vers l'autre. C'est ce qui permet à un trombone de rester « collé » à un aimant. De plus, si on utilise un aimant relativement puissant, on peut créer une sorte de « serpent » avec les trombones : le premier trombone est collé à l'aimant, mais les autres trombones peuvent se coller au trombone précédent. On peut ainsi en faire coller deux ou trois à la suite, suivant la force de l'aimant. Ceci est dû au fait que chaque trombone, en présence de l'aimant, devient un aimant également (à cause des électrons, tous alignés). Quand on retire l'aimant, les électrons reprennent une orientation aléatoire et l'aimantation disparaît. Le paramagnétisme est caractérisé par une susceptibilité relative positive, de faible amplitude.

3.8.2 Le ferromagnétisme

Si on reprend le cas précédent, où on colle des trombones à un aimant, mais que l'on utilise un aimant très puissant (aimant au néodyme par exemple), alors les trombones conservent une petite aimantation résiduelle même quand l'aimant est retiré. Les électrons dans la matière restent alors orientés dans le même sens que l'aimant les a mis, même quand on retire l'aimant. On parle alors de ferromagnétisme. Dans ce cas, le matériau est devenu un aimant permanent lui-même, et il conservera cette aimantation tant que l'on ne la supprime pas (en chauffant fortement le matériau, par exemple).

Il faut noter que dans un matériau ferromagnétique, si les électrons s'orientent dans le même sens sous l'effet d'un aimant, puis conservent une partie de cette orientation une fois l'aimant retiré, le caractère aimanté de l'échantillon n'existe pas « de base ». En fait, la matière est subdivisée en petites régions, appelées micro-domaines de Weiss. L'orientation des électrons de chacune de ces régions est identique, mais chaque domaine a une orientation aléatoire. Au total, l'échantillon dans sa globalité n'est pas aimanté tant que l'on n'applique pas un champ magnétique extérieur.

3.8.3 L'antiferromagnétisme

Dans les matériaux ferromagnétiques, les électrons s'orientent tous dans le même sens que le champ magnétique extérieur. Dans l'antiferromagnétisme, l'orientation est inversée d'un atome sur l'autre, formant un moment magnétique global nul (figure (3.4))

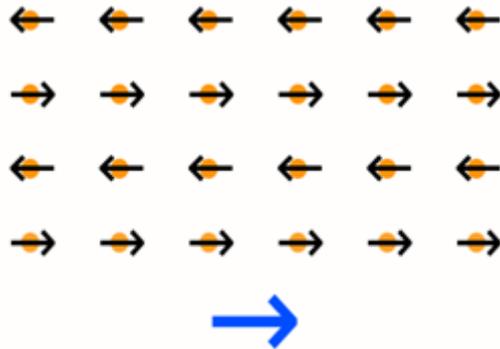


Figure (3.4) Orientation des électrons lors d'une application d'un champ magnétique pour un matériau antiferromagnétique.

Les moments magnétiques d'un atome s'inversent avec celui de l'atome voisin. Macroscopiquement, ce matériau réagit comme un matériau non magnétique (il n'est ni attiré, ni repoussé par un aimant), mais des phénomènes magnétiques interviennent tout de même au niveau microscopique. Les matériaux antiferromagnétiques le sont en dessous d'une certaine température (dite de Neel) et sont généralement paramagnétique au-dessus.

En plus des matériaux intrinsèquement antiferromagnétiques, des assemblages de couches ferromagnétiques séparées par un isolant ont parfois également un comportement antiferromagnétique. Ces dispositifs-là sont largement utilisés en électronique et en mécanique, à cause de comportements électroniques particuliers. Ces constructions au comportement antiferromagnétique sont utilisées sur les têtes de lecture des disques durs, dans la mémoire vive magnétique (Magnetic Random Access Memory, ou MRAM) et plus généralement dans d'autres formes de microsystème électromécanique (ou MEMS, de l'anglais) dont font partie les accéléromètres et les capteurs à effet hall que l'on trouve dans les smart-phones aujourd'hui.

3.8.4 Le ferrimagnétisme

Un peu situé à l'intermédiaire entre le paramagnétisme (tous les électrons s'orientent dans le même sens) et l'antiferromagnétisme (les électrons s'orientent dans des sens deux à deux opposés), on trouve le ferrimagnétisme : les moments magnétiques des électrons sont bien opposés deux à deux, mais ceux étant dans le sens le champ magnétique extérieur sont plus forts que ceux dans le sens inverse. Le moment magnétique total dans un sens est donc supérieur à celui dans l'autre sens et le moment magnétique total de l'échantillon n'est donc pas nul (figure (3.5)).

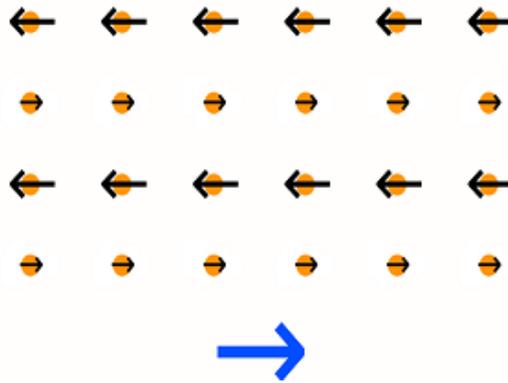


Figure (3.5) Le moment magnétique total de l'échantillon n'est pas nul dans le cas d'un matériau ferrimagnétique

Les moments magnétiques dans un sens n'ont pas la même intensité que ceux dans l'autre sens. Les matériaux ferrimagnétiques ont des propriétés anisotropiques, c'est à dire que l'orientation des cristaux utilisés a son importance. Ceci est utilisé dans le domaine du paléomagnétisme, où les roches ferrimagnétiques capturent le magnétisme terrestre de l'époque de leur formation. L'étude de ces roches permet de déduire que le champ magnétique terrestre s'inverse régulièrement au fil des éons. Inversement, on peut aussi dater une roche en analysant le champ magnétique qu'il a capturé.

Ces matériaux, ont aussi un intérêt dans les nanotechnologies : leur moment magnétique global étant « programmable » sous l'effet de la chaleur, certaines formes de mémoire vives et mortes pourraient utiliser des éléments ferrimagnétiques avec une tête de lecteur et d'écriture à base d'un laser. Le but étant d'avoir des modules mémoires beaucoup plus rapides que la mémoire actuelle, inscrite avec des tensions électriques seulement.

3.8.5 Le diamagnétisme

Quand, dans un matériau soumis à un champ magnétique, tous les électrons s'orientent dans le sens opposé au champ magnétique (donc l'inverse que dans un matériau paramagnétique), alors l'aimant et le matériau se repoussent et on parle de diamagnétisme (figure (3.6)). Cette répulsion intervient à de degrés plus ou moins forts dans tous les matériaux, bien qu'elle soit généralement écrasée par d'autres types de magnétisme. Aussi, la répulsion entre un matériau diamagnétique et un aimant n'existe pas de façon intrinsèque : elle naît de la présence de l'aimant, et elle disparaît quand l'aimant est retiré.

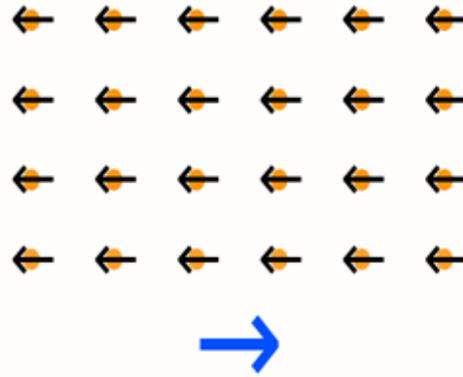


Figure (3.6) Matériau diamagnétique

Ce type de magnétisme est caractérisé par une susceptibilité relative négative, de faible amplitude.

3.9 Influence de la température

Pour les matériaux ferromagnétiques, il existe une température caractéristique, dite température de Curie T_c , au-dessus de laquelle ils perdent leur propriété ferromagnétique pour faire place au paramagnétisme. Voir quelques exemples dans la table (3.1). Ceci provient de ce que l'interaction qui tend à aligner les spins ne peut plus lutter contre l'agitation thermique qui tend au contraire à leur donner une orientation aléatoire.

Matériau	T_c en °C
Nickel	358
Fer	770
Cobalt	1115

Table 3.1 Température de Curie pour certains matériaux

Le diagramme (3.7) présente une frontière sur l'axe $H = 0$ avec un point d'arrêt, qu'on appelle aussi point critique. On observe à haute température une phase désordonnée, dite paramagnétique sans aimantation [11]. Lorsque $T = T_c$, au point critique, une transition se produit, et pour $T < T_c$, on observe une phase ordonnée, dite ferromagnétique, présentant une aimantation spontanée. Il y a une analogie avec la transition liquide-gaz, H et p jouant des rôles similaires. Dans le 2ème diagramme (3.8) si on traverse la frontière ($H = 0$, $0 < T < T_c$), on observe un saut de l'aimantation ; ce saut diminue quand le point de franchissement de la frontière se rapproche du point critique; au point critique, il n'y a plus de saut de l'aimantation.

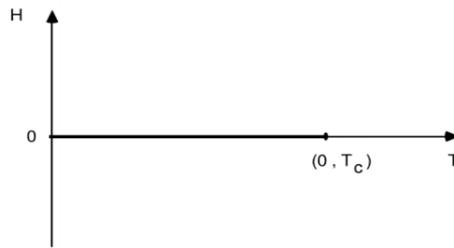


Figure (3.7) Diagramme (champ magnétique, température) pour un corps qui présente une transition ferromagnétique.

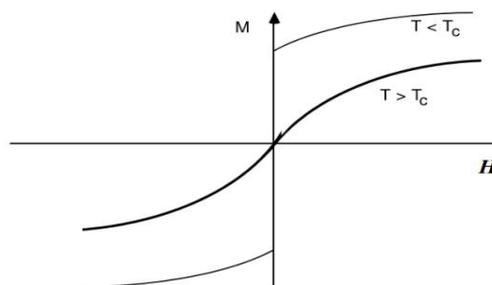


Figure (3.8) Courbe d'aimantation $M(H)$ pour un ferromagnétique à différentes températures.

Autre cas, on a une transition antiferromagnétique leur diagramme est un diagramme (champ magnétique, température) mais pour un corps qui présente une transition antiferromagnétique (avec une aimantation alternée dans la phase ordonnée).

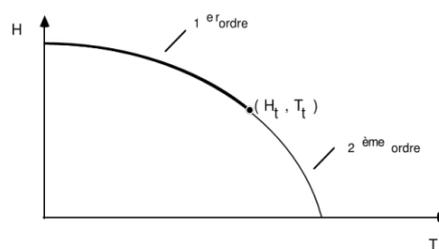


Figure (3.9) Diagramme de phase montre un point tri critique pour un matériau antiferromagnétique.

On observe sur ce diagramme deux domaines séparés par une ligne (une partie en trait gras, l'autre en trait fin) : quand on franchit la partie grasse, on observe un saut de l'aimantation alternée ; quand on franchit la ligne fine, il n'y a pas de saut. Cette dernière ligne est une ligne de points critiques (puisque'il n'y a pas de saut). La ligne de points critiques a un point d'arrêt, sur la ligne de transition, qu'on appelle un point tri-critique.

Chapitre 4
LES NOMBRES ALEATOIRES

4.1 Introduction

Puisque les simulations de Monte Carlo se basent sur les procédés aléatoires, il faut introduire la notion des nombres aléatoires pour les utiliser dans le reste de ce cours.

4.2 Nombres pseudo-aléatoires

Pour avoir un nombre aléatoire, on tire d'une urne des billets numérotés de 0 à 9 un billet et on répète l'opération N fois pour obtenir un nombre de N chiffres. Généralement, n'importe quel processus naturel peut être utilisé comme générateur de nombres aléatoire. Si on utilise un processus déterministe (loi mathématique), on peut avoir des nombres pseudo-aléatoire et non pas aléatoire car le générateur déterministe n'est pas aléatoire mais ces nombres ainsi obtenus ont les mêmes propriétés que les nombres aléatoires dans la simulation de Monte Carlo. Pour cela, on parle généralement des nombres aléatoires même s'ils ont obtenus de façon pseudo-aléatoire.

4.3 Quelques générateurs uniformes des nombres aléatoires

4.3.1 La méthode de congruence

Cette méthode génère des nombres aléatoires X_i à partir des nombres X_{i-1} par la relation de récurrence

$$X_i = aX_{i-1} + b \text{ mod } m \quad (4.1)$$

avec a, b, m , et X_0 des entiers positifs donnés. a : Le multiplicateur, b : L'incrément, m : Le modulus, et X_0 : La valeur initiale. Ainsi, on peut définir le nombre aléatoire U_i compris entre 0 et 1 par la relation

$$U_i = \frac{X_i}{m} \quad (4.2)$$

Les nombres générés par cette méthode se répètent après certain nombre d'itérations selon le choix des paramètres a, b, m , et X_0 . De manière générale, il faut choisir une grande valeur de m pour obtenir une suite de longueur maximale avec les conditions suivantes :

- b , et m sont co-premier entre eux
- $a - 1$ est un multiple de chaque nombre premier qui divise m
- Si m est un multiple de 4, alors $a - 1$ l'est aussi.

D'autre part, on peut modifier la relation de récurrence pour éviter certaines régularités de la manière suivante (méthode de congruence par retard) :

$$X_i = aX_{i-r} + b \text{ mod } m, \quad r \in \mathbb{N}^* \quad (4.3)$$

On propose un petit programme Maple où on utilise la formule (4.1) pour générer 10 nombres aléatoire uniformes :

TP 01 :

> `with(Statistics) :`

Méthode de Congruence

> `a := 2`

`a := 2`

> `b := 3`

`b := 3`

> `m := 100`

`m := 100`

> `X(0) := 50`

`X(0) := 50`

> `N := 10`

`N := 10`

> **for** `i` **from** 1 **to** `N` **do** `X(i) := a·X(i - 1) + b mod m` **end do**

`X(1) := 3`

`X(2) := 9`

`X(3) := 21`

`X(4) := 45`

`X(5) := 93`

`X(6) := 89`

`X(7) := 81`

`X(8) := 65`

`X(9) := 33`

`X(10) := 69`

4.3.2 Le générateur naturel π

Le nombre π qui est le rapport entre le périmètre et le diamètre d'un cercle représente une constante mathématique pour tous les cercles. Il a été démontré qu'il n'est pas un nombre rationnel et ces décimales ne constituent pas une suite périodique cf. annexe B. Alors, on peut l'utiliser comme un bon générateur de nombres aléatoires.

Dans le TP 02, on a construit un programme Maple pour démontrer que les décimales de π obéissent à une loi uniforme discrète par une comparaison de la variance des deux lois :

TP 02 :

> `with(Statistics) :`

(1) Extraire les décimales de Pi

> `Digits := 101`

`Digits := 101`

> `N := Digits - 1`

`N := 100`

> `evalf(Pi)`

> $W := \langle seq(R(x), x = 0 ..9) \rangle :$
 > $Digits := 5$ $Digits := 5$

> $M1 := (Mean(V1, weights = W))^2$ $M1 := 21.996$

> $M2 := Mean(V2, weights = W)$ $M2 := 30.670$

> $VarPi := M2 - M1$ $VarPi := 8.674$

> $VarU := evalf\left(\frac{(10^2 - 1)}{12}\right)$ $VarU := 8.2500$

> $Erreur := \frac{1}{VarU} \text{abs}(VarPi - VarU)$ $Erreur := 0.051392$

4.4 La qualité des générateurs des nombres aléatoires

Les problèmes souvent rencontrés lors d'une génération des nombres aléatoires sont :

- La corrélation (dépendance) entre les nombres générés
- La limitation de la longueur de la suite générée (répétition des nombres)

Généralement, il faudra faire des tests statistiques avant l'utilisation de ces nombres. Quelqu'un peut consulter la référence [1] pour plus de détail. Voilà un exemple d'un bon générateur de la méthode de congruence

$$X_i = 16807X_{i-1} \text{ mod } 2^{31} - 1 \quad (4.4)$$

4.5 Générateurs non uniformes

4.5.1 Transformation d'une variable aléatoire

Soit X la variable aléatoire obéit à la loi de probabilité discrète $p(X_i)$ ou continue $f(x)$. On veut transformer cette variable à une autre variable Y et trouver sa loi convenable par la transformation

$$X \rightarrow Y = \Phi(X) \quad (4.5)$$

Si la loi est discrète, cela se fait par la propriété

$$p(X_i) = p(\Phi^{-1}(Y_i)) \quad (4.6)$$

et si la loi est continue, on fait

$$p(a \leq X \leq b) = p(\Phi(a) \leq Y \leq \Phi(b)) \quad (4.7)$$

or

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{\Phi(a)}^{\Phi(b)} g(y)dy \quad (4.8)$$

$f(x)$ et $g(y)$ sont les densités de probabilités de chaque variable.

Exemples :

(1) Soit la loi de Poisson (2.25). On veut la transformée à une autre loi par la transformation

$$X \rightarrow Y = X^2 - 1 \quad (4.9)$$

Alors, on a

$$X = \sqrt{Y + 1} \quad (4.10)$$

et on obtient

$$p(X_i) = p(Y_i) = \frac{\lambda^{\sqrt{Y_i+1}} e^{-\lambda}}{\sqrt{Y_i+1}!}, Y_i = -1, 0, 3, \dots \quad (4.11)$$

(2) Soit la loi de X définie par la densité

$$f(x) = \begin{cases} 2x, & \text{si } x \in [0,1] \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.12)$$

On veut la transformée à une variable aléatoire Y par la transformation

$$Y = e^x \quad (4.13)$$

Alors, on a

$$X = \ln Y \quad (4.14)$$

et par le changement de variable (4.14)

$$\begin{aligned} \int_0^1 f(x)dx &= \int_0^1 2x dx \\ &= \int_1^e \frac{2 \ln y}{y} dy \\ &= 1 \end{aligned} \quad (4.15)$$

On obtient la loi

$$g(y) = \begin{cases} \frac{2 \ln y}{y}, & \text{si } y \in [1, e] \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.16)$$

4.5.2 Transformation inverse

Soit une loi continue de densité de probabilité $f(x)$ et soit $F(x)$ sa fonction de répartition définie par (cf. (2.9))

$$F(x) = \int_{-\infty}^x f(t)dt \quad (4.17)$$

Prenant ses valeurs dans $[0, 1]$. On peut voir $Y = F(x)$ une variable aléatoire uniforme dans $[0, 1]$ qu'on peut la transformée à la variable X de loi $f(x)$ par la transformation

$$\Phi(X) = F(x) \quad (4.18)$$

et par conséquent, on peut générer des nombres aléatoires non uniforme à partir des nombres uniformes $U(0, 1)$ par la relation

$$X = F^{-1}(Y) \quad (4.19)$$

Exemples :

- Soit la loi exponentielle (2.29) de fonction de partition (2.30)

$$F(x) = 1 - e^{-\lambda x} \quad (4.20)$$

Considérons la transformation

$$y = \Phi(x) = 1 - e^{-\lambda x} \quad (4.21)$$

Alors (4.19) s'écrit

$$X = -\ln(1 - Y)/\lambda \quad (4.22)$$

Ainsi, on obtient une loi exponentielle d'après une loi uniforme par la transformation (4.22)

$$g(y) = \begin{cases} 1, & \text{si } y \in [0,1] \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \rightarrow f(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x}, & \text{si } x \in [0, +\infty[\\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

Le TP 03 donne une petite table de calcul où on transforme quelques nombres uniformes Y (dans l'intervalle $[0,1]$) obtenus par la méthode de Mersenne Twister (basée sur une formule de récurrence de période $2^{19937} - 1$) aux nombres exponentiels X :

TP 03 :

> with(RandomTools [MersenneTwister]) :

> N := 10

N := 10

> Y := <seq(GenerateFloat(), i = 1..N)>

Y :=

0.3747053250
0.0640439652
0.8564458969
0.7825014938
0.4832623175
0.6402031176
0.2850164008
0.9130656515
0.8809907465
0.8746448575

> lambda := 1

$\lambda := 1$

```
> for i from 1 to N do X(i) := -ln(1 - Y(i))/lambda end do
X(1) := 0.469532260
X(2) := 0.0661867749
X(3) := 1.941043290
X(4) := 1.52556329
X(5) := 0.660219917
X(6) := 1.02221562
X(7) := 0.335495674
X(8) := 2.442602060
X(9) := 2.128554020
X(10) := 2.076604430
```

- **Théorème de Box et Muller**

Ce théorème nous permet de générer des nombres aléatoires selon la loi normale à partir des nombres aléatoires uniformes. Alors il suffit de transformer une loi normale à une loi uniforme (Voir les références dans la bibliographie pour une démonstration complète).

Considérons la loi normale réduite

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (4.23)$$

et considérons deux nombres normales x_1, x_2 . Par le changement de variables

$$\begin{cases} x_1 = r \cos \theta \\ x_2 = r \sin \theta \end{cases} \quad (4.24)$$

on peut calculer la fonction de partition, et trouver la relation donnant le passage des nombres uniformes aux nombres normales

$$\begin{cases} x_1 = r \cos \theta = \sqrt{-2 \ln(1 - r')} \cos(2\pi\theta') \\ x_2 = r \sin \theta = \sqrt{-2 \ln(1 - r')} \sin(2\pi\theta') \end{cases} \quad (4.25)$$

r', θ' sont deux nombres uniformes

Finalement, on note que le problème souvent rencontré est de trouver l'inverse de la fonction de répartition si cette dernière n'est pas inversible ce qui nécessite d'autres méthodes de calcul.

Exercices

4.1 Soit $x_0 = 17$

1. Choisir a , b , et m tels que la relation de récurrence $x_{i+1} = (ax_i + b) \bmod m$ permette de générer des nombres pseudo-aléatoires entre 0 et 999 avec un cycle de longueur maximale 1 000.
2. Calculer ensuite les 20 premiers éléments.
3. Utiliser la méthode de congruence par retard $r = 3$ pour générer 20 premiers éléments. Faire la comparaison.

4.2 Pour chaque loi ci-dessous, trouver la transformée appropriée :

1. La loi binomiale de paramètres $n = 10$, et $p = 1/3$ par la transformation $\phi(x) = x^3$

2. $f(x) = \begin{cases} 12x^2(1-x) & \text{si } x \in [0,1] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$ par la transformation $\phi(x) = \ln x$

4.3 Comment peut-on générer, à partir de nombres uniformes sur l'intervalle $[0, 1]$, une réalisation des lois de probabilité suivantes :

1. Uniforme sur l'intervalle $[-1, 4]$;
2. Exponentielle de moyenne 30

4.4 Un générateur de nombres binaires aléatoires a donné la suite suivante :

1, 0, 0, 1, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 1, 0, 1, 1, 1, 0, 1, 0

1. Comment peut-on transformer cette suite en une suite de nombres aléatoires ayant une distribution uniforme dans l'ensemble discret $\{0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9\}$?
2. Sur la base de ces 20 nombres binaires aléatoires, combien de nombres aléatoires entre 0 et 9 peut-on ainsi obtenir ?

Chapitre 5
METHODES DE MONTE CARLO
EXEMPLES D'APPLICATION

5.1 Introduction

Dans ce chapitre, on va détailler quelques méthodes de simulation Monte Carlo pour différents problèmes en : Mathématiques, gestion, et physiques. Les programmes associés sont des TP trouvés dans l'annexe D. Notons que la simulation a besoin d'un grand nombre de variables aléatoires pour avoir des résultats proches des résultats exactes.

5.2 Estimation d'une aire par la méthode de rejet

5.2.1 Etapes à suivre

Soit une courbe fermée C qu'on veut estimer l'aire « S » de la surface qui englobe. On introduit une méthode de Monte Carlo qu'on appelle méthode de rejet basée sur les étapes suivants :

- Chercher un rectangle de dimensions $L \times H$ qui enveloppe notre courbe
- Disposer un nombre N suffisamment grand de points aléatoires dans ce rectangle en générant deux séries de variables aléatoires uniformes représentant les deux coordonnées.
- On compte le nombre de points n tombant dans C .
- L'aire S est calculée par la relation

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{n}{N} L \times H \quad (5.1)$$

5.2.2 Algorithme (TP 04)

Dans la suite, on trouve le programme Maple pour calculer l'aire d'une ellipse en prenant $N = 10$. On peut prendre des valeurs assez grandes selon la capacité de calcul de l'ordinateur.

> `with(RandomTools[MersenneTwister]), with(LinearAlgebra),
with(Statistics), with(plots, implicitplot) :`

(1) Détermination d'une courbe fermée C soit une ellipse de rayons a , et b

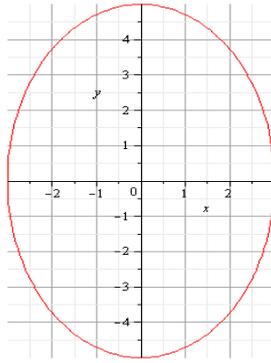
> `a := 3`

`a := 3`

> `b := 5`

`b := 5`

> `implicitplot` $\left(\frac{(x)^2}{a^2} + \frac{(y)^2}{b^2} = 1, x = -a .. a, y = -b .. b, axes = normal, \right.$
`gridlines = true, scaling = constrained` $\left. \right)$



(2) Génération de deux séries des nombres aléatoires uniformes sur le rectangle de dimensions $L=2a$,
et $H=2b$

> $r := 3$

$r := 3$

> $N := 10$

$N := 10$

> $A := \langle \text{seq}(\text{Float}(\text{GenerateInteger}(\text{range} = -a \cdot 10^r .. a \cdot 10^r), -r), i = 1 .. N) \rangle$

$A :=$ $\begin{bmatrix} -2.880 \\ -1.436 \\ -0.119 \\ -0.125 \\ -2.457 \\ 2.716 \\ -2.261 \\ -0.629 \\ -0.913 \\ -1.517 \end{bmatrix}$

> $B := \langle \text{seq}(\text{Float}(\text{GenerateInteger}(\text{range} = -b \cdot 10^r .. b \cdot 10^r), -r), i = 1 .. N) \rangle$

$B :=$ $\begin{bmatrix} -0.798 \\ 2.206 \\ 2.056 \\ 1.906 \\ 2.757 \\ 2.986 \\ -3.387 \\ 4.609 \\ 0.731 \\ 1.924 \end{bmatrix}$

(3) Compter le nombre de points n situés dans C

> **for** j **from** 1 **to** N **do** **if** $\left(\frac{A[j]}{a}\right)^2 + \left(\frac{B[j]}{b}\right)^2 \leq 1$ **then** $R(j) := 1$
 else $R(j) := 0$ **end if** **end do**

> **for** j **from** 1 **to** N **do** $R(j)$ **end do**

1
1
1
1
1
1
0
0
1
1
1

> $n := \text{add}(R(j), j = 1 .. N)$

$n := 8$

(4) Estimation de l'aire S et le comparer la avec la valeur exacte S_0

> $S := \text{evalf}\left(2 a \cdot 2 b \cdot \frac{n}{N}\right); S_0 := \text{evalf}(\text{Pi} \cdot a \cdot b)$

$S := 48.$

$S_0 := 47.1238898$

(5) Une procédure pour déterminer l'aire S en fonction de N le nombre des points aléatoires

>

```
S := proc(N)
  global B, A, n, SS, S0;
  local j;
  A := ⟨seq(Float(GenerateInteger(range = -a·10r .. a·10r), -r), i
    = 1 .. N)⟩ :
  B := ⟨seq(Float(GenerateInteger(range = -b·10r .. b·10r), -r), i
    = 1 .. N)⟩ :
  for j from 1 to N do if  $\left(\frac{A[j]}{a}\right)^2 + \left(\frac{B[j]}{b}\right)^2 \leq 1$  then  $R(j) := 1$ 
    else  $R(j) := 0$  end if end do :
  n := add(R(j), j = 1 .. N) :
  SS := (N) → evalf $\left(2 a \cdot 2 b \cdot \frac{n}{N}\right)$  :
  return SS(N)
end proc
```

> $S(10)$

42.

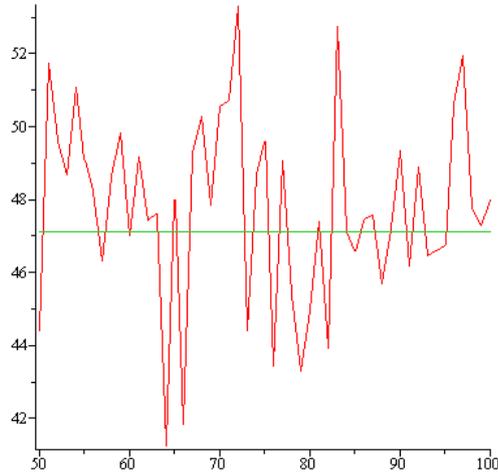
(6) Représentation de la courbe $S(N)$ sur l'intervalle $[N_i, N_f]$. La ligne verte est la valeur exacte

> $N_i := 50; N_f := 100$

$N_i := 50$

$N_f := 100$

> `plot([<<seq(N, N = Ni ..Nf)>>|<seq(S(N), N = Ni ..Nf)>>], <<seq(N, N = Ni ..Nf)>>|<seq(S0, N = Ni ..Nf)>>], style = [line, line])`



(7) La valeur moyenne et l'incertitude relatif

> $MeanS := \frac{1}{N_f - N_i + 1} \text{add}(S(N), N = Ni ..Nf); S0 := \text{evalf}(\text{Pi} \cdot a \cdot b)$

$MeanS := 46.6681100;$

$S0 := 47.1238898;$

> $Incertitude := \frac{\text{abs}(MeanS - S0)}{S0}$

$Incertitude := 0.00967194626$

5.3 Estimation d'une intégrale bornée

Soit l'intégrale bornée sur l'intervalle $[a, b]$

$$H = \int_a^b h(x) dx \quad (5.2)$$

On propose deux méthodes de Monte Carlo pour estimer sa valeur H_e sous réserve convergence

5.3.1 Méthode de rejet

Elle est expliquée dans la section précédente 5.2. Puisque l'intégrale bornée représente une aire, on peut suivre les mêmes étapes détaillées avant. Un exemple concret est présenté dans la section 5.3.3

5.3.2 Méthode de la valeur moyenne

On peut écrire l'intégrale (5.2) sous la forme d'un produit de deux fonctions $f(x)$, et $g(x)$ dont l'une est une densité de probabilité admettant une fonction de répartition inversible

$$H = \int_a^b f(x)g(x)dx \quad (5.3)$$

où

$$f(x) \equiv \begin{cases} f(x), & \text{si } x \in D \\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

$$g(x) \equiv \begin{cases} g(x), & \text{si } x \in [a, b] \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.4)$$

L'intervalle $[a, b]$ est inclus dans D . Cela signifie que H n'est que la valeur moyenne de $g(x)$ selon la distribution $f(x)$. Or

$$H = E(g(x)) \quad (5.5)$$

Si on choisit un nombre N suffisamment grand de valeurs de x . Alors (5.5) est équivalent à

$$H_e = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g(x_i) \quad (5.6)$$

Dans le TP 05, on va calculer l'intégrale

$$H = \int_1^{10} x^2 e^{-x} dx \quad (5.7)$$

par les deux méthodes, et on va comparer les deux résultats avec la valeur exacte H_0 . Pour la distribution dans (5.4), elle a été choisie comme la loi exponentielle, et la fonction $g(x)$ sera la fonction carrée.

$$f(x) \equiv \begin{cases} e^{-x}, & \text{si } x \in [0, +\infty[\\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$$

$$g(x) \equiv \begin{cases} x^2, & \text{si } x \in [1, 10] \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \quad (5.8)$$

Alors

$$H_e = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2 \quad (5.9)$$

où x_i sont des nombres aléatoires de la loi exponentielle obtenus par la transformation (4.22). Si $x_i^2 \notin [1, 10]$, alors $x_i^2 \rightarrow 0$ d'après la relation (5.8). Finalement, on peut comparer les résultats des deux méthodes H_{er} , et H_{ev} par rapport le résultat exacte H_0 .

5.3.3 Algorithme (TP 05)

> `with(RandomTools[MersenneTwister]), with(LinearAlgebra),`
`with(Statistics) :`

> $H := \text{Int}(x^2 \cdot \exp(-x), x = 1..10)$

$$H := \int_1^{10} x^2 e^{-x} dx$$

> $H0 := \text{evalf}(H)$

$$H0 := 1.833858414$$

> $N := 1000$

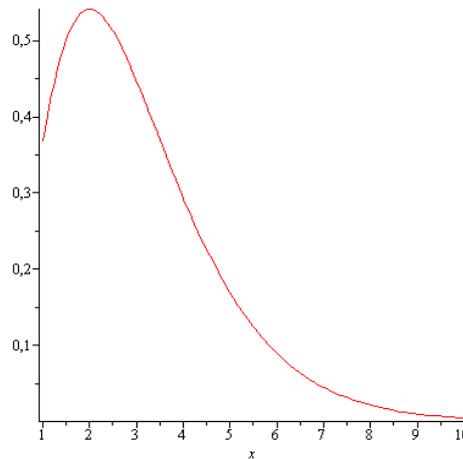
$$N := 1000$$

(1) Méthode de rejet

> $h := (x) \rightarrow x^2 \cdot \exp(-x)$

$$h := x \rightarrow x^2 e^{-x}$$

> $\text{plot}(h(x), x = 1..10)$



> $\text{solve}(\text{diff}(h(x), x) = 0, x); \text{evalf}(h(2))$

$$0, 2$$

$$0.5413411321$$

> $A := \text{Vector}[\text{row}]([\text{seq}(\text{Float}(\text{GenerateInteger}(\text{range} = 1 \cdot 10^3 .. 10 \cdot 10^3), -3), i = 1..N)])$

$$A := \left[\begin{array}{l} 1..1000 \text{ Vector}_{\text{row}} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{array} \right]$$

> $B := \text{Vector}[\text{row}]([\text{seq}(\text{Float}(\text{GenerateInteger}(\text{range} = 0..541), -3), i = 1..N)])$

$$B := \left[\begin{array}{l} 1..1000 \text{ Vector}_{\text{row}} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{array} \right]$$

> **for** j **from** 1 **to** N **do** **if** $h(A[j]) \geq B[j]$ **then** $R(j) := 1$ **else** $R(j) := 0$ **end if** **end do**

> **for** j **from** 1 **to** N **do** $R(j)$ **end do:**

> $n := \text{add}(R(j), j = 1..N); \frac{n}{N}$

$n := 384$

$\frac{48}{125}$

> $Her := \frac{n}{N} \cdot 0.541 \cdot 9$

$Her := 1.86969600$

(2) Méthode de la valeur moyenne

> $Y := Vector[row]([seq(Float(GenerateInteger(range = 10^3), -3), i = 1 .. N)])$

$Y := \left[\begin{array}{l} 1 .. 1000 \text{ Vector}_{row} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{array} \right]$

> **for** j **from** 1 **to** N **do** $X(j) := -\ln(1 - Y(j))$ **end do**:

> $seq(X(i)^2, i = 1 .. N)$:

> **for** i **from** 1 **to** N **do** **if** $X(i) < 1$ **or** $X(i) > 10$ **then** $X(i) := 0$ **end if** **end do**

> $seq(X(i)^2, i = 1 .. N)$:

> $Hev := \frac{1}{N} add(X(i)^2, i = 1 .. N); Her; H0$

$Hev := 1.83970280$

1.86969600

1.83385841

> $IncerRejet := abs\left(\frac{Her - H0}{H0}\right); IncerValm$
 $:= abs\left(\frac{Hev - H0}{H0}\right)$

$IncerRejet := 0.0195421771$

$IncerValm := 0.00318693469$

> $VarHer := sqrt\left(\frac{(0.541 \cdot 9)^2}{N} add(R(j)^2, j = 1 .. N) - Her^2\right); Her$

$VarHer := 2.36807658$

1.86969600

> $VarHev := sqrt\left(\frac{1}{N} add(X(i)^4, i = 1 .. N) - Hev^2\right); Hev$

$VarHev := 4.55514845$

1.83970280

Notons que pour réduire les variances surtout dans la méthode de la valeur moyenne (VarHev), on change la forme de la distribution f .

5.4 Statistique d'un aéroport

5.4.1 Description

On veut simuler le nombre d'arriver et le nombre de départs d'avions par minute dans un aéroport pendant 20 minutes. Supposons qu'on connaît les lois de probabilités d'arriver et de départs depuis les tableaux suivants

X_i : Nombre d'arriver par minute	0	1	2	3	4	5
$p(X_i)$	1/8	1/2	1/4	1/10	3/125	1/1000

Table 5.1 La loi de d'arriver/mn des avions

Y_i : Nombre de départs par minute	0	1	2	3	4
$p(Y_i)$	1/12	1/2	1/4	2/15	1/30

Table 5.2 La loi de départs/mn des avions

On va générer 20 nombres aléatoires uniformes pour X_i et 20 d'autres pour Y_i , puis les transformer aux lois exprimées aux deux tables (5.1), et (5.2). On peut utiliser une suite de nombres entre 0, et 999 pour X , et d'autre de nombres entre 0, et 899 pour Y . Alors, on obtient les répartitions suivantes

Nombres aléatoires entre	Nombres d'arrivées X_i
000 – 124	0
124 – 624	1
625 – 874	2
875 – 974	3
975 – 998	4
999	5

Table 5.3 Transformation d'une loi uniforme à la loi de probabilité de X .

Nombres aléatoires entre	Nombres d'arrivées Y_i
000 – 74	0
75 – 524	1
525 – 749	2
750 – 869	3
870 – 899	4

Table 5.4 Transformation d'une loi uniforme à la loi de probabilité de Y .

On peut finalement, calculer les valeurs moyenne numériques de X , et de Y (on les notent X_m , et Y_m), et les comparer avec $E(X)$, et $E(Y)$.

5.4.2 Algorithme (TP 06)

- > `with(RandomTools[MersenneTwister]), with(plots, implicitplot), with(Statistics) :`
- > `N := 20`
- `N := 20`
- > `Digits := 3`
- `Digits := 3`
- > `A := Vector[row]([seq(GenerateFloat(), i = 1..N)])`

$$A := \left[\begin{array}{l} 1 \dots 20 \text{ Vector}_{\text{row}} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{array} \right]$$

>

```

for i from 1 to N do
  if  $0 \leq A(i) \leq 0.124$  then  $X(i) := 0$ 
  elif  $0.125 \leq A(i) \leq 0.624$  then  $X(i) := 1$ 
  elif  $0.625 \leq A(i) \leq 0.874$  then  $X(i) := 2$ 
  elif  $0.875 \leq A(i) \leq 0.974$  then  $X(i) := 3$ 
  elif  $0.975 \leq A(i) \leq 0.998$  then  $X(i) := 4$ 
  elif  $A(i) = 0.999$  then  $X(i) := 5$ 
  end if
end do

```

> $\text{seq}(X(i), i = 1 \dots N)$

1, 1, 1, 3, 4, 3, 1, 1, 0, 1, 1, 1, 2, 1, 2, 0, 3, 1, 1, 1

> $Ex := \text{evalf}\left(0 \cdot \frac{1}{8} + 1 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \frac{1}{4} + 3 \cdot \frac{1}{10} + 4 \cdot \frac{3}{125} + 5 \cdot \frac{1}{1000}\right); Xm := \text{evalf}\left(\frac{1}{N} \text{add}(X(i), i = 1 \dots N)\right)$

$Ex := 1.40$

$Xm := 1.45$

> $\text{IncertX} := \frac{\text{abs}(Ex - Xm)}{Ex}$

$\text{IncertX} := 0.0357$

> $B := \text{Vector}[\text{row}](\text{seq}(\text{Float}(\text{GenerateInteger}(\text{range} = 0 \dots 899), -3), i = 1 \dots N))$

$$B := \left[\begin{array}{l} 1 \dots 20 \text{ Vector}_{\text{row}} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{array} \right]$$

>

```

for i from 1 to N do
  if  $0 \leq B(i) \leq 0.074$  then  $Y(i) := 0$ 
  elif  $0.075 \leq B(i) \leq 0.524$  then  $Y(i) := 1$ 
  elif  $0.525 \leq B(i) \leq 0.749$  then  $Y(i) := 2$ 
  elif  $0.750 \leq B(i) \leq 0.869$  then  $Y(i) := 3$ 
  elif  $0.870 \leq B(i) \leq 0.899$  then  $Y(i) := 4$ 
  end if
end do

```

> $\text{seq}(Y(i), i = 1 \dots N)$

1, 3, 3, 3, 1, 0, 1, 2, 2, 0, 2, 1, 2, 1, 1, 1, 1, 0, 3

> $Ey := \text{evalf}\left(0 \cdot \frac{1}{12} + 1 \cdot \frac{1}{2} + 2 \cdot \frac{1}{4} + 3 \cdot \frac{2}{15} + 4 \cdot \frac{1}{30}\right); Ym := \text{evalf}\left(\frac{1}{N} \text{add}(Y(i), i = 1 \dots N)\right)$

$Ey := 1.53$

$Ym := 1.45$

$$\text{> } \text{Incert}Y := \frac{\text{abs}(E_y - Y_m)}{E_y}$$

$$\text{Incert}Y := 0.0523$$

5.5 Gestion d'un stock

Les statistiques d'un concessionnaire d'une marque de voitures sur la demande journalière d'un certains modèles présente la distribution suivante

Quantité demandée	0	1	2	3	4	5
Probabilité	0.10	0.10	0.20	0.30	0.20	0.10

Table 5.5 La distribution de la quantité de voiture demandée

De même, le délai de la livraison vers le stock peut varier entre 2, et 5 jours avec les probabilités suivantes

Délai (jours)	2	3	4	5
Probabilité	0.20	0.50	0.20	0.10

Table 5.6 La distribution de délai de livraison

L'objectif du gestionnaire du stock est d'équilibrer les objets dans le stock et la demande des clients (éviter d'avoir un stock important et une faible demande ou un stock faible et une forte demande). Tous d'abord, le gestionnaire fixe les deux éléments suivants

- (a) La quantité en stock T critique qui déclenche une nouvelle commande
- (b) La quantité à commander Q pour remplir le stock

On veut répondre à ces questions pour améliorer la gestion

- (a) Quel a été le nombre moyen d'objets en stock (par jour) ?
- (b) Quel a été le nombre moyen de vente (clients servis) ?
- (c) Quel a été le nombre d'objets commandés ?
- (d) Quel a été le nombre de clients servis ?
- (e) Quel a été le nombre de jours durant lesquels l'objet manquait en stock ?
- (f) Quel a été le nombre de clients n'ayant pas pu être servi ?

Pour répondre à ces questions, on fixe T , et Q , et on fait une simulation de 30 jours en générant deux séries de nombres aléatoires selon les deux distributions : tables (5.5), et (5.6). Prenons $T = 5$, et $Q = 10$. Voici un extrait de tableau (5.7) expliquant la simulation pendant 10 jours

Jours	Nombres aléatoires A	Vente	Stock matin	Stock soir	Nombres aléatoires B	Délai
1	0.330	2	$Q = 10$	8	///	///
2	0.050	0	8	8	///	///

3	0.720	4	8	4	0.620	3
4	0.700	4	4	0	///	///
5	0.360	2	0	2 Clients non servis	///	///
6	0.570	3	Q = 10 Nouvelle commande	7	///	///
7	0.590	3	7	4	0.740	4
8	0.590	3	4	1	///	///
9	0.190	1	1	0	///	///
10	0.530	3	0	3 Clients non servis	///	///

Table 5.7 Simulation de Gestion pendant 10 jours

On résume les résultats sous forme de réponses aux questions posées

- (a) Le nombre moyen d'objets en stock : 3.2
- (b) Le nombre moyen de vente : 2
- (c) Le nombre d'objets commandés : 20
- (d) Le nombre de clients servis : 20
- (e) Le nombre de jours durant lesquels l'objet manquait en stock : 2 jours
- (f) Le nombre de clients n'ayant pas pu être servi : 5 clients.

Pour améliorer cette gestion, on joue sur les deux paramètres T , et Q .

5.6 Le modèle d'Ising

5.6.1 Définition

Le modèle d'Ising est défini sur un réseau régulier dont chaque site possède un spin qui peut prendre seulement deux valeurs ± 1 , représentant un spin up ou un spin down (figure 5.1). L'Hamiltonien du système s'écrit

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - B \sum_i S_i \quad (5.10)$$

où $\langle ij \rangle$ désigne une somme sur les sites qui sont les plus proches voisins, J le paramètre d'interaction, et B le champ magnétique extérieur.

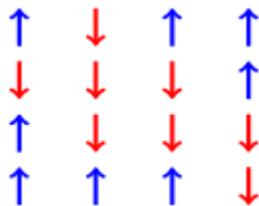


Figure (5.1) Le modèle d'Ising sur un réseau carré bidimensionnel. Les flèches hautes et basses représentent des spins positifs et négatifs respectivement.

Par suite, on traite le cas classique

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i \quad (5.11)$$

et pour des raisons de simplification, on prend $J = 1$, et $B = 0$. (Pour d'autre cas, quelqu'un peut consulter la bibliographie)

5.6.2 Algorithme de Metropolis

On considère pour simplification, un réseau carré de taille $N = L^2$ sites. Chaque site porte un spin de direction aléatoire donnée (figure 5.1). Les spins sont représentés par leurs coordonnées (i, j) , de 1 à L avec les conditions périodiques $L + 1 \equiv 1$ sur les deux indices.

Etape (1) : Chain de Markov

On travaille dans l'ensemble canonique à une température donnée T . On utilise l'algorithme de Metropolis en envisageant des mouvements locaux (retournement d'un spin) dans notre système Markovien de la façon suivante :

1. On choisit une configuration initiale S_0 globale en donnant à chaque vecteur représentant le spin une direction ($S_0(i, j) = \pm 1$). Cette configuration a une énergie initiale E_0 .
2. On choisit un spin au hasard suivant deux lois de distributions uniformes (les séries B , et C) pour les deux indices (i, j) respectivement.
3. On envisage comme tentative de mouvement, le retournement de ce spin pour avoir une nouvelle configuration d'énergie E_1 .
4. On calcule la différence d'énergie d'interaction des spins entre la nouvelle configuration avec le spin retournée, et la configuration initiale de départ

$$\Delta E_1 = E_1 - E_0 \quad (5.12)$$

5. Si ΔE_1 est négatif, ou nul c'est à dire, le retournement du spin diminue l'énergie, ou la laisse invariante, on accepte la nouvelle configuration
6. Si ΔE_1 est positif, on l'accepte avec une probabilité

$$pr = \exp(-\Delta E_1) \quad (5.13)$$

C'est-à-dire, on tire un nombre aléatoire η suivant une loi uniforme sur le segment $[0; 1]$, puis si $\eta \leq pr$, on accepte la configuration avec spin retourné comme nouvelle configuration. Sinon on la rejette et la configuration à l'étape suivante est identique à la précédente.

Etape (2) : Thermalisation

1. Pour chaque configuration acceptée, on associé un pas de simulation, et on calcul pour chaque pas l'énergie de notre system en question soit E_t .

2. On fait un nombre suffisant de pas de calcul (généralement à l'ordre de N) pour la thermalisation (équilibre thermique) de notre système. Autrement dit, jusqu'à l'énergie ne dérive plus et fluctue autour d'une valeur de l'équilibre.
3. A partir du moment où l'équilibre est atteint, on va pouvoir calculer les valeurs moyennes des grandeurs thermodynamiques intéressantes (chaleur spécifique, aimantation, susceptibilité) par la relation générale (3.31)

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_{t_{eq}}^{t_{max}} Q_i}{t_{max} - t_{eq}} \quad (5.14)$$

où t_{eq} est le nombre de pas nécessaire pour atteindre l'équilibre, et t_{max} le nombre total des pas de simulation

Etape (3) : Etude en fonction de la température

1. On augmente la température par pas discrets (on le prend 0.1) dans un intervalle $[T_i, T_f]$, et pour chaque température on applique l'algorithme précédent sur un nombre suffisant de pas en effectuant les valeurs moyennes sur les $t_{max} - t_{eq}$ pas derniers.
2. On trace les graphes $Q(x), x = KT$ en fonction de T pour chaque quantité.
3. On fait des analyses sur les résultats.

5.6.3 Quelques remarques

Il est approprié de citer quelques remarques concernant cette étude. Tout d'abord, il faut noter que la simulation ne donne des résultats fiables que pour des systèmes de tailles infinies (qu'on l'appelle la limite thermodynamique) et également un nombre de pas important. C'est pour ça, on choisit N suffisamment grand dans les limites des possible pour avoir effectué les calculs, et d'autre part, pour diminuer l'erreur statistique. Le deuxième point concerne le type de l'algorithme. On peut choisir d'autre algorithme qui fait retourner un ensemble entier des spins de même propriété (orientation) au lieu d'un seul spin. Celle-ci ne nécessite pas un grand nombre de pas pour atteindre l'équilibre, mais elle a des inconvénients.

5.6.4 Résultats

Dans le TP 07, On a effectué un programme de calcul pour un system de taille $N = 100$ sites où on a considéré $10N = 1000$ pas de calcul, et on a fait les moyennes temporelles sur les cents derniers pour 50 valeurs de température (de T_i à T_f) de pas de température 0.1. On a pris $J = 1$, et $K_B \equiv K = 1.38$ la constante de Boltzmann.

On obtient les graphes ci-dessous pour les quatre quantités thermodynamiques : L'énergie, la chaleur spécifique, l'aimantation, et la susceptibilité. Notons que pour une taille plus grande (que 100), le temps de calcul devient très grand grâce au nombre important de boucles. Il nous faut une optimisation de notre programme pour des tailles plus grandes. Selon les travaux faites à la limite thermodynamique, le model d'Ising à l'absence d'un champ magnétique extérieur présente une transition de phase ferromagnétique-paramagnétique à la température $T_c = 2.2691 \dots J$. Pour notre programme, cela correspond à $x = KT = 1.38 * 2.2691 = 3.13 \dots$

- > with(RandomTools[MersenneTwister]), with(LinearAlgebra),
with(Statistics), with(plots, implicitplot), with(plots) :

Etape (1) : Chain de Markov
(a) Configuration initiale

- > L := 10

L := 10

- > N := L²

N := 100

- > 2^N configurations possibles

1267650600228229401496703205376 configurations possibles

- > A := ⟨seq(GenerateInteger(range = 0..1), i = 1..N)⟩ :
for i from 1 to N do if A(i) = 0 then A(i) := -1 end if end do :

- > S0 := Matrix(L, L, [seq(A(i), i = 1..N)])

$$S0 := \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

- > E0 := -J·(add(add(S0(i,j)·(S0(i mod L + 1,j) + S0(i,j mod L + 1)), i = 1..L), j = 1..L))

E0 := -4

(b) Retournement de pas spins à une température donnée (KT = 3)

- > pas := 10 N

pas := 1000

- > B := ⟨seq(GenerateInteger(range = 1..L), i = 1..pas)⟩;
C := ⟨seq(GenerateInteger(range = 1..L), i = 1..pas)⟩;
eta := ⟨seq(Float(GenerateInteger(range = 10⁴), -4), i = 1..pas)⟩ ;

$$B := \begin{bmatrix} 1..1000 \text{ Vector}_{\text{column}} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{bmatrix}$$

$$C := \begin{bmatrix} 1..1000 \text{ Vector}_{\text{column}} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{bmatrix}$$

$$\eta := \begin{bmatrix} 1 \dots 1000 \text{ Vector}_{\text{column}} \\ \text{Data Type: anything} \\ \text{Storage: rectangular} \\ \text{Order: Fortran_order} \end{bmatrix}$$

> $J := 1; Ti := 1; Tf := 50;$

$J := 1$

$Ti := 1$

$Tf := 50$

> **for** x **from** Ti **to** Tf **do**
for i **from** 1 **to** L **do** **for** j **from** 1 **to** L **do** $S(x, 0, i, j) := S0(i, j);$
 $E(x, 0) := E0$
end do end do end do;

Etape (2) : Thermalisation dans l'intervalle [Ti, Tf]

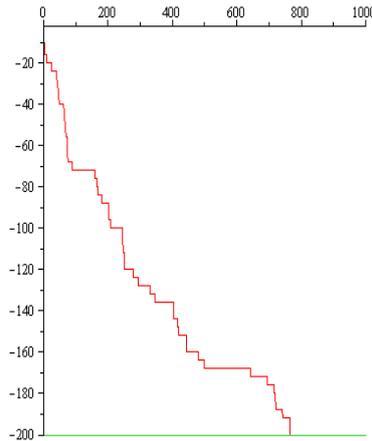
> **for** x **from** Ti **to** Tf **do**
for t **from** 1 **to** pas **do**
for i **from** 1 **to** L **do** **for** j **from** 1 **to** L **do**
 $S(x, t, i, j) := S(x, t - 1, i, j)$
end do end do;
 $M(x, t) := \text{Matrix}(L, L, [\text{seq}(\text{seq}(S(x, t, j, i), i = 1 \dots L), j = 1 \dots L)]);$
 $M(x, 0) := \text{Matrix}(L, L, [\text{seq}(\text{seq}(S(x, 0, j, i), i = 1 \dots L), j = 1 \dots L)]);$
 $S(x, t, B(t), C(t)) := -S(x, t, B(t), C(t));$
 $E(x, t) := -J \cdot (\text{add}(\text{add}(S(x, t, i, j) \cdot (S(x, t, i \bmod L + 1, j) + S(x, t, i, j \bmod L + 1)), i = 1 \dots L), j = 1 \dots L));$
 $\text{Delta}(x, t) := \frac{E(x, t) - E(x, t - 1)}{J};$
 $KT := x \cdot J;$
 $y := \frac{x}{10};$
if $\text{Delta}(x, t) > 0$ **and** $\text{eta}(t) > \text{evalf}\left(\exp\left(-\frac{\text{Delta}(x, t)}{y}\right)\right)$ **then**
for i **from** 1 **to** L **do** **for** j **from** 1 **to** L **do**
 $S(x, t, i, j) := S(x, t - 1, i, j)$
end do end do end if;
if $\text{Delta}(x, t) > 0$ **and** $\text{eta}(t) > \text{evalf}\left(\exp\left(-\frac{\text{Delta}(x, t)}{y}\right)\right)$
then $E(x, t) := E(x, t - 1)$ **end if;**
end do end do;

Etape (3) Ploting : (a) E(KT,t)

> $\text{Fundamental} := -2N$

$\text{Fundamental} := -200$

> $\text{plot}\left(\left[\left[\langle\langle\text{seq}(t, t = 0 \dots pas)\rangle\rangle\left[\left[\langle\langle\text{seq}\left(\frac{E(1, t)}{J}, t = 0 \dots pas\right)\rangle\rangle\right], \langle\langle\text{seq}(t, t = 0 \dots pas)\rangle\rangle\langle\langle\text{seq}(-200, t = 0 \dots pas)\rangle\rangle\right], \text{style} = [\text{line}, \text{line}]\right)$



> $teq := \frac{9}{10}pas; tmax := pas$

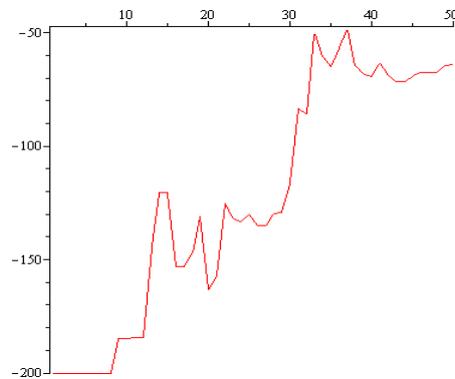
$teq := 900$

$tmax := 1000$

> $MeanE := (x) \rightarrow evalf \left(add \left(\frac{1}{J \cdot (tmax - teq + 1)} \cdot E(x, t), t = teq \dots tmax \right) \right)$

$MeanE := x \rightarrow evalf \left(add \left(\frac{E(x, t)}{J (tmax - teq + 1)}, t = teq \dots tmax \right) \right)$

> $plot(\langle seq(x, x = Ti \dots Tf) \rangle | \langle seq(MeanE(x), x = Ti \dots Tf) \rangle)$



(b) La chaleur spécifique $Cv(KT, t)$

> $MeansquareE := (x) \rightarrow evalf \left(\frac{1}{J^2 \cdot (tmax - teq + 1)} add(E(x, t)^2, \dots = teq \dots tmax) \right)$

$MeansquareE := x \rightarrow evalf \left(\frac{add(E(x, t)^2, t = teq \dots tmax)}{J^2 (tmax - teq + 1)} \right)$

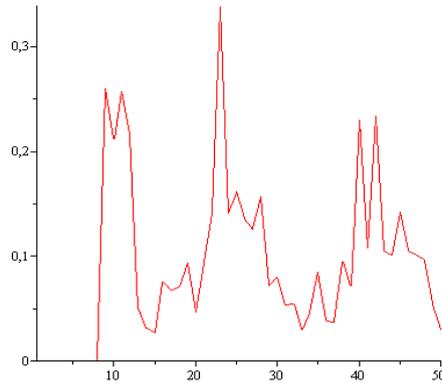
> $K := 1.38$

$K := 1.38$

> $Cv := (x) \rightarrow evalf \left(\frac{K}{(x \cdot J)^2} (MeansquareE(x) - MeanE(x)^2) \right)$

$Cv := x \rightarrow evalf \left(\frac{K (MeansquareE(x) - MeanE(x)^2)}{x^2 J^2} \right)$

> $plot(\langle seq(x, x = Ti .. Tf) \rangle \langle seq(Cv(x), x = Ti .. Tf) \rangle)$

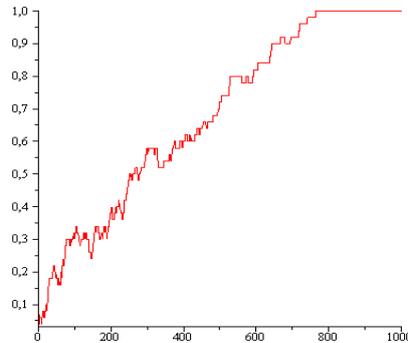


(c) L'aimantation $Aimant(KT, t)$

> $Aimant := (x, t) \rightarrow \frac{1}{N} \cdot add(add(S(x, t, i, j), i = 1 .. L), j = 1 .. L)$

$$Aimant := (x, t) \rightarrow \frac{add(add(S(x, t, i, j), i = 1 .. L), j = 1 .. L)}{N}$$

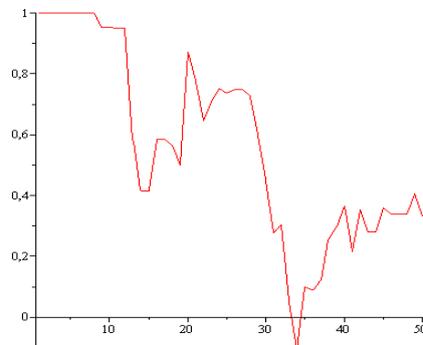
> $plot(\langle seq(t, t = 0 .. pas) \rangle \langle seq(Aimant(1, t), t = 0 .. pas) \rangle)$



> $MeanAimant := (x) \rightarrow evalf\left(add\left(\frac{1}{(tmax - teq + 1)} \cdot Aimant(x, t), t = teq .. tmax \right) \right)$

$$MeanAimant := x \rightarrow evalf\left(add\left(\frac{Aimant(x, t)}{tmax - teq + 1}, t = teq .. tmax \right) \right)$$

> $plot(\langle seq(x, x = Ti .. Tf) \rangle \langle seq(MeanAimant(x), x = Ti .. Tf) \rangle)$



(d) La susceptibilité $X(KT, t)$

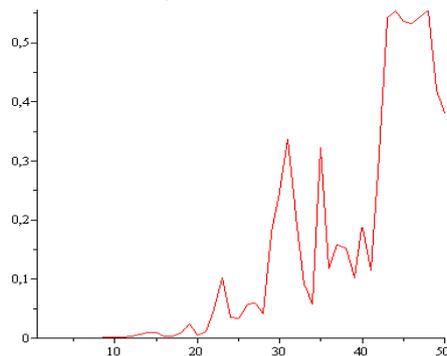
> $MeansquareAimant := (x) \rightarrow evalf \left(add \left(\frac{1}{(tmax - teq + 1)} \right. \right.$
 $\left. \left. \cdot Aimant(x, t)^2, t = teq .. tmax \right) \right)$

$MeansquareAimant := x \rightarrow evalf \left(add \left(\frac{Aimant(x, t)^2}{tmax - teq + 1}, t = teq \right. \right.$
 $\left. \left. .. tmax \right) \right)$

> $X := (x) \rightarrow x \cdot (MeansquareAimant(x) - MeanAimant(x)^2)$

$X := x \rightarrow x (MeansquareAimant(x) - MeanAimant(x)^2)$

> $plot(\langle seq(x, x = Ti .. Tf) \rangle \langle seq(X(x), x = Ti .. Tf) \rangle)$



Exercices

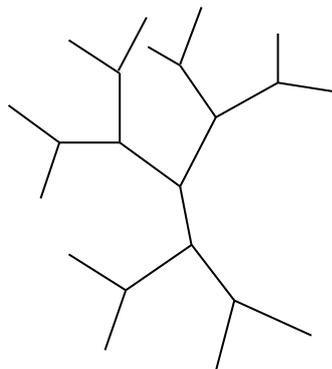
5.1 Estimer par une méthode de Monte Carlo les valeurs de la fonction Erreur

$$Erf(x) = \int_{-\infty}^x e^{-t^2} dt$$

5.2 Etablir un programme Maple pour le problème introduit dans la section 5.5

5.3 Utiliser les données de l'exercice 2.6 pour simuler un tirage de 10 pommes.

5.3 Le réseau de Bethe est un réseau ouvert sous forme d'un arbre (voir la figure ci-après). Il est caractérisé par z le nombre de plus proche voisins de chaque nœud



Réseau de Bethe pour $z = 3$

Chaque génération n contient $z(z - 1)^{n-1}$ sites (nœuds), et le nombre total des sites est $= \frac{z(z-1)^{n-2}}{z-2}$. On dispose de façon aléatoire des sites fermés et ouverts. Le problème de percolation sur ce réseau cherche le nombre de chemins continus en passant par les sites ouverts depuis l'origine en fonction de la population (probabilité d'avoir un site ouvert) en question. Pour des taille importantes (N très grand), on observe une transition de phase géométrique séparant l'existence et l'inexistence d'un chemin continu qu'on appelle l'amas infini. La valeur critique de la population est simplement $p_c = \frac{1}{z-1}$. Etablir un programme Maple pour ce problème.

Annexe A

LA LOI NORMALE [1]

Les valeurs x de cette table sont relatives à l' α pour lequel $\Pr(Z < \alpha) = x$, où Z est une variable aléatoire centrée réduite. Par exemple :

$$\Pr(Z < 1,25) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{1,25} e^{-\frac{t^2}{2}} dt = \Phi(1,25) \simeq 0,894.$$

α	0,00	0,01	0,02	0,03	0,04	0,05	0,06	0,07	0,08	0,09
0,0	0,500	0,504	0,508	0,512	0,516	0,519	0,523	0,527	0,531	0,535
0,1	0,539	0,543	0,547	0,551	0,555	0,559	0,563	0,567	0,571	0,575
0,2	0,579	0,583	0,587	0,591	0,594	0,598	0,602	0,606	0,610	0,614
0,3	0,617	0,621	0,625	0,629	0,633	0,636	0,640	0,644	0,648	0,651
0,4	0,655	0,659	0,662	0,666	0,670	0,673	0,677	0,680	0,684	0,687
0,5	0,691	0,695	0,698	0,701	0,705	0,708	0,712	0,715	0,719	0,722
0,6	0,725	0,729	0,732	0,735	0,738	0,742	0,745	0,748	0,751	0,754
0,7	0,758	0,761	0,764	0,767	0,770	0,773	0,776	0,779	0,782	0,785
0,8	0,788	0,791	0,793	0,796	0,799	0,802	0,805	0,807	0,810	0,813
0,9	0,815	0,818	0,821	0,823	0,826	0,828	0,831	0,834	0,836	0,838
1,0	0,841	0,843	0,846	0,848	0,850	0,853	0,855	0,857	0,859	0,862
1,1	0,864	0,866	0,868	0,870	0,872	0,874	0,877	0,879	0,881	0,883
1,2	0,884	0,886	0,888	0,890	0,892	0,894	0,896	0,898	0,899	0,901
1,3	0,903	0,904	0,906	0,908	0,909	0,911	0,913	0,914	0,916	0,917
1,4	0,919	0,920	0,922	0,923	0,925	0,926	0,927	0,929	0,930	0,931
1,5	0,933	0,934	0,935	0,937	0,938	0,939	0,940	0,941	0,942	0,944
1,6	0,945	0,946	0,947	0,948	0,949	0,950	0,951	0,952	0,953	0,954
1,7	0,955	0,956	0,957	0,958	0,959	0,959	0,960	0,961	0,962	0,963
1,8	0,964	0,964	0,965	0,966	0,967	0,967	0,968	0,969	0,969	0,970
1,9	0,971	0,971	0,972	0,973	0,973	0,974	0,975	0,975	0,976	0,976
2,0	0,977	0,977	0,978	0,978	0,979	0,979	0,980	0,980	0,981	0,981
2,1	0,982	0,982	0,983	0,983	0,983	0,984	0,984	0,985	0,985	0,985
2,2	0,986	0,986	0,986	0,987	0,987	0,987	0,988	0,988	0,988	0,989
2,3	0,989	0,989	0,989	0,990	0,990	0,990	0,990	0,991	0,991	0,991
2,4	0,991	0,992	0,992	0,992	0,992	0,992	0,993	0,993	0,993	0,993
2,5	0,993	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,994	0,995	0,995
2,6	0,995	0,995	0,995	0,995	0,995	0,996	0,996	0,996	0,996	0,996
2,7	0,996	0,996	0,996	0,996	0,996	0,997	0,997	0,997	0,997	0,997
2,8	0,997	0,997	0,997	0,997	0,997	0,997	0,997	0,997	0,998	0,998
2,9	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998
3,0	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,998	0,999	0,999

Annexe B

LES DECIMALE DE π [1]

1 415 926 535	3 305 727 036	5 024 459 455	8 583 616 035	8 164 706 001
8 979 323 846	5 759 591 953	3 469 083 026	6 370 766 010	6 145 249 192
2 643 383 279	0 921 861 173	4 252 230 825	4 710 181 942	1 732 172 147
5 028 841 971	8 193 261 179	3 344 685 035	9 555 961 989	7 235 014 144
6 939 937 510	3 105 118 548	2 619 311 881	4 676 783 744	1 973 568 548
5 820 974 944	0 744 623 799	7 101 000 313	9 448 255 379	1 613 611 573
5 923 078 164	6 274 956 735	7 838 752 886	7 747 268 471	5 255 213 347
0 628 620 899	1 885 752 724	5 875 332 083	0 404 753 464	5 741 849 468
8 628 034 825	8 912 279 381	8 142 061 717	6 208 046 684	4 385 233 239
3 421 170 679	8 301 194 912	7 669 147 303	2 590 694 912	0 739 414 333
8 214 808 651	9 833 673 362	5 982 534 904	0 331 367 702	4 547 762 416
3 282 306 647	4 406 566 430	2 875 546 873	8 989 152 104	8 625 189 835
0 938 446 095	8 602 139 494	1 159 562 863	7 521 620 569	6 948 556 209
5 058 223 172	6 395 224 737	8 823 537 875	6 602 405 803	9 219 222 184
5 359 408 128	1 907 021 798	9 375 195 778	8 150 193 511	2 725 502 542
4 811 174 502	6 094 370 277	1 857 780 532	2 533 824 300	5 688 767 179
8 410 270 193	0 539 217 176	1 712 268 066	3 558 764 024	0 494 601 653
8 521 105 559	2 931 767 523	1 300 192 787	7 496 473 263	4 668 049 886
6 446 229 489	8 467 481 846	6 611 195 909	9 141 992 726	2 723 279 178
5 493 038 196	7 669 405 132	2 164 201 989	0 426 992 279	6 085 784 383
4 428 810 975	0 005 681 271	3 809 525 720	6 782 354 781	8 279 679 766
6 659 334 461	4 526 356 082	1 065 485 863	6 360 093 417	8 145 410 095
2 847 564 823	7 785 771 342	2 788 659 361	2 164 121 992	3 883 786 360
3 786 783 165	7 577 896 091	5 338 182 796	4 586 315 030	9 506 800 642
2 712 019 091	7 363 717 872	8 230 301 952	2 861 829 745	2 512 520 511
4 564 856 692	1 468 440 901	0 353 018 529	5 570 674 983	7 392 984 896
3 460 348 610	2 249 534 301	6 899 577 362	8 505 494 588	0 841 284 886
4 543 266 482	4 654 958 537	2 599 413 891	5 869 269 956	2 694 560 424
1 339 360 726	1 050 792 279	2 497 217 752	9 092 721 079	1 965 285 022
0 249 141 273	6 892 589 235	8 347 913 151	7 509 302 955	2 106 611 863
7 245 870 066	4 201 995 611	5 574 857 242	3 211 653 449	0 674 427 862
0 631 558 817	2 129 021 960	4 541 506 959	8 720 275 596	2 039 194 945
4 881 520 920	8 640 344 181	5 082 953 311	0 236 480 665	0 471 237 137
9 628 292 540	5 981 362 977	6 861 727 855	4 991 198 818	8 696 095 636
9 171 536 436	4 771 309 960	8 890 750 983	3 479 775 356	4 371 917 287
7 892 590 360	5 187 072 113	8 175 463 746	6 369 807 426	4 677 646 575
0 113 305 305	4 999 999 837	4 939 319 255	5 425 278 625	7 396 241 389
4 882 046 652	2 978 049 951	0 604 009 277	5 181 841 757	0 865 832 645
1 384 146 951	0 597 317 328	0 167 113 900	4 672 890 977	9 958 133 904
9 415 116 094	1 609 631 859	9 848 824 012	7 727 938 000	7 802 759 009

Annexe C

REPONSES AUX EXERCICES

- 2.1** 1) 3.7%
2) 40.5%
3) 49.6%

- 2.2** 1) $C_4^1 \left(\frac{2}{3}\right) \left(\frac{1}{3}\right)^3$
2) $C_4^2 \left(\frac{2}{3}\right)^2 \left(\frac{1}{3}\right)^2$
3) $C_3^2 \left(\frac{1}{3}\right) \left(\frac{1}{3}\right)^3$
4) $C_4^1 \left(\frac{2}{6}\right) \left(\frac{4}{6}\right)^3$
5) $\frac{4!}{2!1!1!} \left(\frac{3}{6}\right) \left(\frac{2}{6}\right) \left(\frac{1}{6}\right)^2$
6) $\left(\frac{3}{6}\right)^2 \left(\frac{2}{6}\right)^2 + 2 \left(\frac{1}{6}\right) \left(\frac{3}{6}\right) \left(\frac{2}{6}\right)^2$

- 2.3** 1) D'après la normalisation $a = 1$
2) $E(X) = \frac{1}{4}(e^2 + 1), E(X^2) = \frac{2}{9}(e^3 + \frac{1}{2})$
3) $F(x) = x \ln x - x + 1$
4) $x = 2.155$

2.4 Utiliser la définition de l'espérance, et la variance

- 2.5** 1) $f(x) = \begin{cases} \frac{1}{100} e^{-\frac{x}{100}}, & \text{si } x \in [0, +\infty[\\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$
2) $\frac{1}{\lambda} = 100$ heures
3) 86%, 22%

2.6 1) 15%

2) Définir la loi associée au somme des poids qui est une loi normale de moyenne 2μ , et de variance $2\sigma^2$. On trouve 16%

3) Définir la loi associée au soustraction des poids qui est une loi normale de moyenne 0, et de variance $2\sigma^2$. On trouve 25%

4.1 Voir le TP 01

- 4.2** 1) $p(X = k) = C_{10}^k \left(\frac{1}{3}\right)^k \left(\frac{2}{3}\right)^{10-k} \rightarrow p(X') = C_{10}^{X'/3} \left(\frac{1}{3}\right)^{X'/3} \left(\frac{2}{3}\right)^{10-X'/3}$
2) $f(x) = \begin{cases} 12x^2(1-x), & \text{si } x \in [0,1] \\ 0, & \text{sinon} \end{cases} \rightarrow g(x) = \begin{cases} 12(e^{3x} - e^{4x}), & \text{si } x \in]-\infty, 0[\\ 0, & \text{sinon} \end{cases}$

4.3 1) Moyennant l'inverse de la fonction de répartition $F(x) = \frac{x+1}{5}$

2) Moyennant l'inverse de la fonction de répartition $F(x) = 1 - e^{-\frac{x}{30}}$

4.4 1) Les chiffres décimaux $\{0,1,2,\dots,9\}$ sont associés aux chiffres binaires $\{0,1,10,11,100,101,110,111,1000,1001\}$ respectivement. Alors, on prend quatre chiffres binaires par ordre et on les traduit aux nombres décimaux.

2) On trouve 1001, 0010, 0100, ... 17 chiffres associés aux 9, 2, 4, ...

5.1 Voir TP 05

5.2 Voir TP 06

5.3 Utiliser le théorème de Box et Muller (sec. 4.5.2)

5.4 Voir TP 07

Bibliographie

- [1] Y. Dodge, G. Melfi, *Premiers pas en simulation*, Springer-Verlag France, 2008.
- [2] M. Roger, *Méthodes de Monte Carlo*, Cours de physique de l'état condensé CEA Saclay.
- [3] Pascal Viot, *Simulation numérique en physique statistique*, Cours commun aux Parcours "Physique des Liquides", et "Modélisation Statistique et Algorithmique des systèmes hors d'équilibre, 2006.
- [4] David P. Landau, Kurt Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, Second Edition*, Cambridge University Press 2000.
- [5] Emmanuel Flachaire, *Méthodes de Simulations*, Notes de cours Mars 2003. Université Paris I Panthéon-Sorbonne.
- [6] Bernard Delyon, *Simulation et modélisation*, Cours de deuxième année de master, Université Rennes I 2012.
- [7] Le site de Maple : <http://www.maplesoft.com>.