

FR9201918

CEA-CONF--10891

Simulations Monte Carlo en Physique Théorique *

A. Billoire

Service de Physique Théorique de Saclay[†]
91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

24 septembre 1991

Je présente le principe de la méthode Monte Carlo et deux exemples d'applications en Physique Théorique. L'exposé est avant tout descriptif, et le langage employé est celui du physicien, délibérément heuristique. L'accent est mis sur les motivations physiques.

1 Monte Carlo et Mécanique Statistique

L'objet de la mécanique statistique est de dériver les propriétés macroscopiques des solides, liquides, gaz, ... à partir des propriétés de leurs composants à l'échelle microscopique, supposées données à l'avance. Par exemple, on dérivera "l'équation d'état" d'un gaz (la relation qui relie la pression du gaz, le volume de l'enceinte qui le contient, et la température), à partir des propriétés des molécules qui le composent (la masse des molécules et la forme de l'interaction entre molécules). Si l'on décrit les interactions entre molécules par la mécanique classique, par opposition à quantique, on parlera de mécanique statistique classique. C'est une très bonne approximation de la réalité, à des températures pas trop proches du zéro absolu. Une configuration du gaz, notée C , est la donnée de l'ensemble des positions $\{x_i ; i = 1, \dots, N\}$ et des vitesses $\{\dot{x}_i\}$ des N molécules qui composent ce

*Exposé donné au colloque "Les probabilités numériques" CIRM Luminy 18-22 mars 1991

[†]Laboratoire de la Direction des Sciences de la Matière du CEA.

gaz. Le système à l'équilibre à température T se trouve dans "l'état de Gibbs", défini par la loi de probabilité

$$P(\mathcal{C})d\mathcal{C} = \frac{1}{Z(T)}e^{-H(\mathcal{C})/kT}d\mathcal{C} \quad (1)$$

où $Z(T)$ est un facteur de normalisation appelé "fonction de partition" qui joue un rôle fondamental dans ce qui suit.

$$Z(T) = \int e^{-H(\mathcal{C})/kT}d\mathcal{C} \quad (2)$$

L'énergie de la configuration \mathcal{C} est égale à la valeur de l'hamiltonien $H(\mathcal{C})$, k est la "constante de Boltzmann" (numériquement¹ $k \sim 1.38 \cdot 10^{-23}$ Joule Kelvin⁻¹). Si les molécules du gaz n'interagissent pas entre elles (cas du "gaz parfait"), H se réduit à l'énergie cinétique des molécules

$$H = \sum_{i=1,\dots,N} \frac{1}{2} m_i \dot{x}_i^2 \quad (3)$$

où m est la masse d'une molécule. L'interaction la plus simple est une "interaction à deux corps" qui ajoute à l'énergie un terme

$$\sum_{i>j} V(|x_i - x_j|) \quad (4)$$

où $V(r)$ est l'énergie potentielle d'interaction entre deux molécules situées à une distance r l'une de l'autre. Un échantillon réel contient un très grand nombre de molécules, de l'ordre de grandeur du nombre d'Avogadro ($\sim 6.02 \cdot 10^{23}$), et l'on observe uniquement des quantités moyennes globales comme l'énergie du gaz (on n'observe pas la position de toutes les molécules!). En conséquence, la mécanique statistique se contente de calculer des quantités globales pour un système de N molécules contenues dans une enceinte de volume V dans la "limite thermodynamique" $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$, N/V fixe. Les fluctuations autour des valeurs moyennes disparaissent dans cette limite.

Un autre problème classique de physique statistique est celui des systèmes de spins, dont le plus célèbre est le modèle d'Ising. C'est un modèle très schématique d'aimants. Les variables ("les spins") ne peuvent prendre que deux valeurs ± 1 , elles sont associées aux sites d'un réseau hypercubique à d dimensions de maille a .

¹Le lecteur me pardonnera l'utilisation de la notation anglaise pour les décimaux.

Le réseau possède L mailles dans chaque dimension, et l'on s'intéresse à la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$. Une configuration est déterminée par l'ensemble des valeurs des spins noté $\{\sigma\}$. A l'équilibre, la probabilité pour que le système soit dans la configuration $\{\sigma\}$ est

$$P(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z(T)} e^{-H(\{\sigma\})/kT} \quad (5)$$

$$H(\{\sigma\}) = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (6)$$

où la sommation sur $\langle i, j \rangle$ porte sur toutes les paires de sites voisins (situés à une distance a l'un de l'autre). J est la constante de couplage, et $Z(T)$ la fonction de partition du modèle.

$$Z(T) = \sum_{\{\sigma\}} e^{-H(\{\sigma\})/kT} \quad (7)$$

L'équation 5 permet de calculer la valeur moyenne de n'importe quelle quantité $\mathcal{O}(\{\sigma\})$ par

$$\langle \mathcal{O} \rangle = Z(T)^{-1} \sum_{\{\sigma\}} \mathcal{O}(\{\sigma\}) e^{-H(\{\sigma\})/kT} . \quad (8)$$

par exemple la valeur moyenne de l'énergie du système

$$\langle E \rangle = Z(T)^{-1} \sum_{\{\sigma\}} \sum_{\langle i',j' \rangle} -J \sigma_{i'} \sigma_{j'} e^{-H(\{\sigma\})/kT} . \quad (9)$$

ou les fonctions de corrélation

$$\langle \sigma_i \sigma_j \sigma_k \dots \rangle = Z(T)^{-1} \sum_{\{\sigma\}} \sigma_i \sigma_j \sigma_k \dots e^{-H(\{\sigma\})/kT} \quad (10)$$

Lorsque la température est très grande, les 2^{L^d} configurations possibles du système deviennent équiprobables. Lorsque la température est très basse, deux configurations dominent. Ce sont les configurations² où tous les spins valent soit $+1$, notée $\langle + \rangle$, soit -1 , notée $\langle - \rangle$. Le système évolue au cours du temps, selon une certaine dynamique. Une dynamique réaliste dans le cas du modèle

²Plus précisément, les configurations qui dominent sont ces deux configurations "pures" et les configurations qui en diffèrent par la valeur de quelques spins.

d'Ising sera une suite de petits sauts dans l'espace de configurations. Pour une telle dynamique, il est clair qu'à basse température, le système reste piégé, par exemple dans l'état $\langle + \rangle$, n'en sort qu'au bout d'un temps très long, pour se retrouver rapidement dans la configuration $\langle - \rangle$ où il reste piégé, et ainsi de suite. Un système de taille macroscopique restera des années dans le même état $\langle + \rangle$ ou $\langle - \rangle$. C'est l'essence du phénomène d'aimantation rémanente des ferromagnétiques.

Un autre aspect du même phénomène est celui de la sensibilité aux conditions aux limites que l'on impose à $\{\sigma\}$. Pour T grand, la limite thermodynamique est indépendante des conditions choisies. Ce n'est pas le cas pour T petit. Une façon de définir, sans ambiguïté, la limite thermodynamique pour tout T consiste à ajouter un terme régulateur $h \sum_i \sigma_i$ à l'énergie $H(\{\sigma\})$. On introduit le "paramètre d'ordre" $S(T) = L^{-d} \langle \sum_i \sigma_i \rangle$, qui s'interprète comme l'aimantation du système. $S(T)$ vaut ~ 1 dans l'état $\langle + \rangle$, et vaut ~ -1 dans l'état $\langle - \rangle$. Alors,

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{L \rightarrow \infty} S(T) = \bar{S}(T) > 0 \quad (11)$$

$$\lim_{h \rightarrow 0^-} \lim_{L \rightarrow \infty} S(T) = -\bar{S}(T) \quad (12)$$

pour tout $T < T_c$, où T_c est la température de transition. Pour $T > T_c$, $\bar{S}(T)$ est nul. Nous avons là un exemple de transition de phase, le modèle d'Ising existe dans deux phases, une phase de haute température et une phase de basse température. Ces deux phases sont séparées par une singularité à $T = T_c$ (un point de non-analyticité). L'aimantation spontanée $\bar{S}(T)$ étant continue en $T = T_c$, on parle de transition du deuxième ordre. Les phénomènes physiques au voisinage d'une transition de deuxième ordre sont appelés phénomènes critiques. T_c est la température critique. Les aimants réels, en champ magnétique nul, existent aussi dans deux phases séparées par une transition du deuxième ordre, lorsqu'on chauffe un aimant son aimantation disparaît au dessus d'une température appelée température de Curie de l'aimant. Notons pour terminer que la transition est du premier ordre si le paramètre d'ordre est discontinu au point de transition, la transition glace-liquide de l'eau est un exemple de transition du premier ordre (les densités de l'eau et de la glace sont différentes).

Il y a malheureusement très peu de systèmes pour lesquels on ait pu obtenir des résultats exacts, ce sont dans tous les cas des systèmes idéalisés très simples ou modèles. Les modèles solubles[1] (ceux pour lesquels on sait calculer exactement $Z(T)$, dans la limite thermodynamique du moins) sont soit des modèles de

particules sans interaction, soit des modèles définis dans l'espace à une ou deux dimensions (c'est le cas du modèle d'Ising qui est soluble en une et deux dimensions), soit des cas limites. Le physicien est donc obligé de faire des approximations pour évaluer la somme sur les états de l'équation 8, c'est l'approche traditionnelle en mécanique statistique. Une autre approche est l'approche numérique, rendue possible avec l'apparition d'ordinateurs très puissants. Parmi les approches numériques, la plus utilisée est la méthode de Monte Carlo, que je vais exposer dans ce qui suit. On appelle généralement méthode de Monte Carlo, toute méthode de calcul numérique qui utilise le hasard comme ingrédient. Ici, il s'agit de générer explicitement une marche aléatoire, judicieusement construite, dans l'espace des configurations. Cette méthode a été baptisée méthode Metropolis d'après N. Metropolis, premier auteur (par ordre alphabétique) de l'article où elle a été introduite en 1953[2]. En fait, il s'agit de toute une classe d'algorithmes qui sont des variations autour de l'algorithme suivant[3], présenté dans le cas du modèle d'Ising: On considère une chaîne de Markov faite de configurations successives

$$\{\sigma\}_0 \rightarrow \{\sigma\}_1 \rightarrow \dots \rightarrow \{\sigma\}_t \rightarrow \dots \quad (13)$$

avec une probabilité de transition (fixe) $\mathcal{P}(\{\sigma\}_t \rightarrow \{\sigma\}_{t+1})$. Soit un ensemble de configurations initiales avec une certaine distribution $\pi_0(\{\sigma\})$, cette distribution évolue suivant

$$\pi_0(\{\sigma\}) \rightarrow \pi_1(\{\sigma\}) \rightarrow \dots \rightarrow \pi_t(\{\sigma\}) \rightarrow \dots \quad (14)$$

et converge vers l'ensemble de Gibbs pour t grand (la convergence est exponentiellement rapide)

$$\pi_t(\{\sigma\}) \sim Z(T)^{-1} e^{-E(\{\sigma\})/kT} \quad t \text{ grand} \quad (15)$$

pourvu que \mathcal{P} conserve l'ensemble de Gibbs, c'est à dire vérifie l'équation

$$\sum_{\{\sigma\}_t} e^{-E(\{\sigma\}_t)/kT} \mathcal{P}(\{\sigma\}_t \rightarrow \{\sigma\}_{t+1}) = e^{-E(\{\sigma\}_{t+1})/kT} \quad (16)$$

En pratique, on considère une seule chaîne, on génère N_{conf} configurations successives à partir d'une configuration initiale arbitraire. On admet qu'après N_{Equ} pas de la chaîne, les configurations sont distribuées selon l'ensemble de Gibbs (que l'équation 15 est une égalité pour $t > N_{Equ}$). On dit alors que "le système est à l'équilibre", et on estime les valeurs moyennes de l'équation 8 comme

$$\langle \mathcal{O} \rangle = \frac{1}{(N_{Conf} - N_{Equ})} \sum_{t=N_{Equ}+1}^{N_{Conf}} \mathcal{O}(\{\sigma\}_t) \quad (17)$$

Il s'agit donc d'une méthode "importance sampling" dans laquelle les événements sont générés grâce à une chaîne de Markov judicieusement construite (on ne sait évidemment pas générer directement les événements selon l'ensemble de Gibbs).

Le passage d'une configuration $\{\sigma\}_t$ à la suivante $\{\sigma\}_{t+1}$ s'effectue par une succession d'étapes qui n'impliquent qu'un spin et ses voisins dans l'espace ("d'étapes locales") et ne demandent qu'un petit nombre d'opérations arithmétiques (du fait du caractère local de l'énergie).

- On choisit un site i
- On propose de changer le signe de σ_i .
- On calcule la variation d'énergie ΔE qu'induirait ce changement
 - Si $\Delta E < 0$, on accepte la proposition.
 - Sinon on l'accepte avec une probabilité $e^{-\Delta E/kT}$
- L'opération est répétée L^d fois.

Le programme utilisera une fonction que nous appellerons "RANF()" qui prend comme valeurs, lors d'appels successifs, les valeurs successives d'une suite de nombres pseudo-aléatoires uniformes compris entre 0 et 1. Le changement sera accepté si $RANF() < e^{-\Delta E/kT}$.

La méthode appelle quelques remarques

- Elle repose sur l'utilisation d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires. En pratique on utilise des générateurs simples et donc très rapides[4]. Soit un générateur congruentiel qui retourne les éléments successifs de la séquence d'entiers (divisés par b pour que le résultat soit compris entre 0 et 1)

$$I_{n+1} = aI_n \quad \text{Modulo } b \quad (18)$$

tel celui du CRAY qui correspond à $a = 44\,485\,709\,377\,909$, $b = 2^{48}$ et dont la période vaut 2^{46} si I_0 est impair. Soit un générateur de Fibonacci décalé, basé sur une séquence de flottants comme

$$I_n = I_{n-l_1} - I_{n-l_2} \quad \text{Modulo 1} \quad (19)$$

qui possède une très longue période pour l_1 et l_2 convenablement choisis.

Une simulation sérieuse devrait présenter les résultats obtenus avec (au moins) deux générateurs différents, afin de vérifier que le biais sur les résultats, dû au caractère non aléatoire du générateur est bien négligeable face aux erreurs statistiques.

- La méthode est limitée à des systèmes de petite taille, les plus grands systèmes simulés ont de l'ordre de 10^6 points au grand maximum, ce qui est bien faible par rapport au nombre d'Avogadro, mais amplement suffisant dans la majorité des cas. Dans les cas où ce n'est pas suffisant, il est nécessaire d'extrapoler les résultats vers la limite thermodynamique.
- Les configurations successives générées par l'algorithme de Metropolis sont corrélées. Cet effet est mesuré par la fonction d'auto-corrélation de la chaîne

$$C_{\mathcal{O}}(t - t') = \langle \mathcal{O}(t)\mathcal{O}(t') \rangle - \langle \mathcal{O} \rangle^2 \quad (20)$$

où la moyenne porte sur un ensemble de chaînes à l'équilibre, $\langle \mathcal{O} \rangle := \langle \mathcal{O}(t) \rangle = \langle \mathcal{O}(t') \rangle$. Le temps d'auto-corrélation $\tau_{\mathcal{O}}$ est défini par l'équation

$$-1/t \ln(C_{\mathcal{O}}(t)) \sim 1/\tau_{\mathcal{O}} \quad t \text{ grand} \quad (21)$$

- Il s'agit d'une méthode stochastique, les résultats obtenus ont des erreurs statistiques qui décroissent lentement $O(1/\sqrt{N_{Conf} - N_{Equ}})$ avec le nombre d'itérations effectuées.
- Une étude Monte Carlo d'un système s'apparente à un travail de physique expérimentale. La méthodologie est la même, le travail comporte des phases de conception, de "montage financier", de prise de données et finalement d'exploitation. Comme en physique expérimentale, la tentation existe de publier des interprétations d'expériences dont la valeur statistique est douteuse. La valeur scientifique des conclusions d'une "expérience numérique"

est clairement différente de celle d'un résultat exact. On ne cite plus les résultats d'expériences numériques vieilles de vingt ans!

En conclusion, la méthode de Metropolis permet d'obtenir des informations sur n'importe quel modèle de mécanique statistique classique. La précision des résultats peut être améliorée systématiquement, ce qui n'est pas le cas de toutes les méthodes analytiques approchées. D'un autre côté, cette méthode est fort coûteuse en ressources de calcul. On n'améliorera d'un ordre de grandeur la précision obtenue qu'au prix d'une augmentation de plusieurs ordres de grandeur du temps calcul utilisé. Ce processus d'améliorations systématiques trouve bien sur vite sa limite.

2 Calcul d'Exposants Critiques

Un premier type d'emploi de la méthode consiste à vérifier que la description microscopique que l'on fait d'un composé permet bien de retrouver les propriétés macroscopiques de ce corps mesurées expérimentalement. Le champ d'applications est immensément vaste[5, 6]. J'ai choisi de présenter un autre type d'application, plus "physique théorique", qui est le calcul des exposants critiques du modèle d'Ising à trois dimensions. Ces exposants interviennent dans le comportement du modèle au voisinage de sa transition de phase[7]. Nous avons déjà vu que, dans la limite thermodynamique, l'aimantation spontanée $\tilde{S}(T)$ est singulière au point de transition, elle est identiquement nulle pour $T > T_c$ et non nulle pour $T < T_c$. Pour $T \rightarrow T_c^+$, elle se comporte comme

$$\tilde{S}(T) \sim S_0 (T_c - T)^\beta \quad \beta > 0 \quad (22)$$

De même, la chaleur spécifique $CV(T) = \frac{1}{L^d} \frac{d}{dT} \langle E \rangle$ est singulière à la température de transition T_c . C'est une singularité en loi de puissance également

$$CV(T) \sim C_+ (T - T_c)^{-\alpha} \quad T > T_c \quad (23)$$

$$\sim C_- (T_c - T)^{-\alpha'} \quad T < T_c \quad (24)$$

Au voisinage de T_c , la longueur de corrélation³ $\xi(T)$, qui mesure la façon dont

³La longueur de corrélation est définie par l'équation

$$-\frac{1}{|x-y|} \ln(\langle \sigma_x \sigma_y \rangle - \langle \sigma \rangle^2) \sim \frac{1}{\xi(T)} \quad |x-y| \text{ grand} \quad (25)$$

sont corrélés des spins situés à grande distance l'un de l'autre, diverge

$$\xi(T) \sim \xi_+ (T - T_c)^{-\nu} \quad T > T_c \quad (26)$$

$$\sim \xi_- (T_c - T)^{-\nu'} \quad T < T_c \quad (27)$$

Les exposants β , α , α' , ν , et ν' sont appelés exposants critiques. On définit en tout 9 indices critiques. Ils jouissent de deux propriétés remarquables, qui ont été conjecturées longtemps avant qu'une théorie satisfaisante existe:

- Les valeurs des exposants sont très largement universelles. L'ensemble des transitions du deuxième ordre se range en "classes d'universalité". Une classe est déterminée (en simplifiant un peu) par la dimension de l'espace d et la dimensionnalité du paramètre d'ordre, l dans le cas du modèle d'Ising. Toutes les transitions contenues dans une même classe d'universalité ont les mêmes exposants.
- Les neuf exposants critiques ne sont pas indépendants, ils sont reliés par les relations de "scaling" aux deux indices conventionnellement choisis comme indépendants, ν et γ . Pour les indices définis plus haut, ces relations s'écrivent

$$\alpha = \alpha' = 2 - \nu d \quad (28)$$

$$\nu = \nu' \quad (29)$$

$$\beta = \frac{\nu d - \gamma}{2} \quad (30)$$

La théorie des phénomènes critiques est une des grandes avancées récentes de la physique théorique. Elle repose sur la théorie du groupe de renormalisation due à L. Kadanoff et K. Wilson[8]⁴. Les différentes classes d'universalité sont identifiées aux bassins d'attraction de points fixes de la transformation du groupe de

où σ_x est le spin au point x , σ_y le spin au point y , $|x - y|$ la distance entre les points x et y , et $\langle \sigma \rangle := \langle \sigma_x \rangle = \langle \sigma_y \rangle$.

⁴Le groupe de renormalisation de K. Wilson ("real space renormalization group") opère dans l'espace des Hamiltoniens d'un système de mécanique statistique. Ces transformations laissent invariantes la fonction de partition et les propriétés critiques du système. Une transformation élémentaire est le produit d'un changement de variable qui passe des variables définies sur un réseau de maille "a" à des variables définies sur un réseau de maille "2 a" (par exemple), et d'un changement d'échelle. On appelle aussi groupe de renormalisation, un groupe continu d'invariance des fonctions de corrélations des théories des champs. Cette invariance apparaît dans la "renormalisation" de la théorie.

renormalisation, c'est à dire aux différentes théories quantiques des champs. Les théories quantiques des champs sont des objets mathématiques qui ont été introduits à l'origine pour décrire les particules élémentaires dans un cadre quantique et relativiste. Le modèle d'Ising, dans la région critique, est identifié à la théorie quantique des champs Φ^4 . La variable dynamique de cette théorie est un champ défini dans l'espace temps: à chaque point $x := \{\vec{x}, t\}$ on associe le champ réel $\Phi(x)$. Les objets fondamentaux de la théorie sont les "fonctions de corrélation" $\langle \Phi(x_1)\Phi(x_2)\dots \rangle$ dont la valeur est donnée par

$$\langle \Phi(x_1)\Phi(x_2)\dots \rangle = Z^{-1} \int [\prod_x d\Phi(x)] e^{-S(\Phi)} \Phi(x_1)\Phi(x_2)\dots \quad (31)$$

"L'intégrale fonctionnelle" $\int [\prod_x d\Phi(x)]$ est une "intégrale sur toutes les fonctions $\Phi(x)$ ", Z est un facteur de normalisation qui assure que $\langle 1 \rangle = 1$, et $S(\Phi)$ est "l'action" de la configuration $\Phi(x)$

$$S(\Phi) = \int d\vec{x} dt \left(\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial \Phi(x)}{\partial t} \right)^2 + (\nabla \Phi(x))^2 \right] + \frac{m^2}{2} \Phi(x)^2 + \frac{g}{4!} \Phi(x)^4 \right) \quad (32)$$

m est la masse du champ, et g la constante de couplage, l'interaction se trouve dans le terme $\frac{g}{4!} \Phi(x)^4$, d'où le nom de théorie Φ^4 . Les intégrales fonctionnelles sont des objets formels. La "théorie perturbative des champs" consiste à développer formellement les intégrales fonctionnelles en puissances de g . On sait donner un sens non ambigu aux termes successifs de ce développement grâce à la théorie de la renormalisation.

L'identification entre un système de mécanique statistique au voisinage d'un point critique et la théorie du champ correspondante est la suivante: lorsque la longueur de corrélation du système de mécanique statistique ξ est grande, le comportement des fonctions de corrélation de ce système est indépendant des détails du Hamiltonien, ce comportement est le même que celui des fonctions de corrélation de la théorie du champ, convenablement normalisées. Cette identification permet d'employer les techniques développées pour les théories quantiques des champs pour calculer la valeur des exposants critiques[9]. Plus récemment, la théorie quantique conforme des champs a permis de calculer exactement les exposants critiques d'un grand nombre de modèles de mécanique statistique en deux dimensions[11].

On trouvera dans la Table 1 une compilation[9] tirée du livre de J. Zinn-Justin de résultats pour les exposants critiques du modèle d'Ising à trois dimensions.

	ϵ	H.T.	B.F.	L.V.
ν	.6310 (15)	.6305 (15)	.625 (10)	.625 (6)
η	.0375 (25)			
γ	1.2390 (25)	1.2385 (25)	1.24 (1)	1.24 (1)

Tableau 1 : Estimation des indices critiques ν , $\eta = 2 - \gamma/\nu$ et γ du modèle d'Ising en 3 dimensions, d'après J. Zinn-Justin. Les chiffres entre parenthèses sont une estimation de l'erreur sur le dernier chiffre du résultat. Les colonnes successives correspondent à différentes approches: développement en ϵ (ϵ), séries de haute température (*H.T.*), expériences sur fluides binaires (*B.F.*) et sur la transition liquide vapeur (*L.V.*).

- Dans la première colonne, les exposants sont ceux de la théorie quantique des champs Φ^4 calculés en utilisant la méthode du "développement en ϵ ". Le calcul nécessite un développement dont on ne peut pratiquement obtenir que les premiers termes. Les chiffres entre parenthèses sont une estimation de "l'erreur théorique" sur le dernier chiffre du résultat.
- Dans la deuxième colonne, les exposants sont ceux du modèle d'Ising lui-même, obtenus à partir de séries de haute température[10]. Il s'agit de développer le membre de droite de l'équation 8 en puissances de $1/T$. Les coefficients des premiers termes de ce développement sont calculables facilement à la main. La complexité des calculs croit très vite avec l'ordre, d'où recours à l'ordinateur si l'on veut calculer un maximum de termes. Ces séries sont convergentes dans un cercle fini, on utilise une méthode d'extrapolation comme les "approximants de Padé" pour en extraire une estimation des exposants critiques. L'erreur indiquée est une estimation de l'erreur due à la troncation de la série et à l'extrapolation.
- Les deux dernières colonnes contiennent des résultats expérimentaux concernant des fluides (mélanges de deux fluides et équilibre liquide-vapeur), les erreurs sont une estimation[9] des erreurs expérimentales. On montre que ces transitions sont dans la classe d'universalité du modèle d'Ising.

Les résultats de la table 1 sont en excellent accord avec l'universalité des exposants critiques. Il est à noter que les séries de haute température permettent de

vérifier les relations de “scaling” entre exposants. Elles permettent aussi d’étudier le modèle défini sur d’autres réseaux que le réseau cubique, et de vérifier que l’on retrouve bien les mêmes indices.

Les simulations Monte Carlo du modèle d’Ising en 3 dimensions ont un double but

- Le premier est de montrer que Monte Carlo permet de faire des prédictions quantitatives précises pour un problème hautement non trivial, et pas seulement des prédictions qualitatives (Un domaine dans lequel Monte Carlo excelle, sans demander de gros moyens de calcul).
- Le second est évidemment d’obtenir une estimation la plus précise possible des exposants critiques. Nous verrons que la précision obtenue est déjà comparable à celle obtenue avec les méthodes traditionnelles.

Ces simulations se heurtent à deux problèmes majeurs, les effets de taille finie, et le ralentissement critique.

- Nous avons introduit la notion de longueur de corrélation ξ qui mesure la façon dont sont corrélés des spins situés à grande distance l’un de l’autre. Il est intuitif que si la taille du système L est beaucoup plus grande que ξ , le fait que le réseau soit fini aura peu d’influence. Les simulations sont faites en utilisant des conditions aux limites périodiques pour le réseau, qui a alors la topologie d’un tore à 3 dimensions. Ce choix minimise les effets de taille finie, qui décroissent alors comme $O(\epsilon^{-L/\xi})$ pour L grand. Dans un cas générique, ξ est un nombre d’ordre un, on voit donc qu’il suffit de simuler des petits réseaux pour obtenir une bonne approximation de la limite thermodynamique. Le voisinage d’un point critique est un cas nettement plus difficile, puisque ξ diverge pour $T \rightarrow T_c$ (formule 27).
- La dynamique devient extrêmement lente au voisinage du point critique. Le temps d’auto-corrélation τ diverge comme ξ^z (avec $z \sim 2$) pour $\xi \gg L$ et comme L^2 pour $L \gg \xi$.

Deux méthodes ont été employées pour estimer les indices critiques du modèle d’Ising à partir de simulations Monte Carlo. La première est le “Monte Carlo Renormalization Group” qui implémente la transformation du Groupe de Renormalisation de L. Kadanoff et K. Wilson dans le cadre du Monte Carlo. A la suite

	Machine	Méthode	ν	η	CP
Pawley et al[12]	DAP	MCRG	.629 (4)	.031 (5)	360 h
Blöte et al[13]	Delf	MCRG	.629 (3)	.027 (5)	120 h
Bhanot et al[16]	Cyber 205	FSS	.6295 (10)		
Alves et al[17]	Cyber 205	FSS	.6285 (19)		100 h
Alves et al[17]	Cyber 205	FSS	.6321 (19)		380 h

Tableau 2 : Résultats obtenus par simulation Monte Carlo pour les exposants ν et η . Sont précisés les auteurs, la méthode d'analyse employée, l'ordinateur utilisé (La simulation de Blöte et al utilise une machine spécialisée construite à l'université de Delft), et la durée de la simulation.

des premiers travaux de K. Wilson, cette méthode a été utilisée dans deux simulations de grande échelle[12, 13]. Cette méthode se contente de relativement petits réseaux. En dire plus du MCRG nous entraînerait trop loin. La seconde méthode utilise la théorie du "Finite Size Scaling"[14] sous une forme ou sous une autre. Cette théorie nous dit comment les résultats se comportent sur des réseaux finis, au voisinage de T_c , et permettent d'extraire le comportement thermodynamique (singulier) de l'étude du comportement d'un système fini (qui est régulier). La chaleur spécifique, par exemple, qui diverge comme $CV(T) \sim |T - T_c|^{-\alpha}$ sur un réseau infini (ou pour $L \gg \xi$), se comporte, selon le FSS, comme

$$CV(T) \sim L^{\alpha/\nu} f(L(T - T_c)^\nu) \quad (33)$$

pour L et ξ grands, où $f(x)$ est une fonction régulière, $f(x) \sim \text{Cte } x^{-\alpha/\nu}$ $x \rightarrow \infty$. Cette méthode a été utilisée pour la première fois par un groupe de physiciens de l'université de Santa Barbara[15] qui ont construit un ordinateur spécialisé dans le modèle d'Ising pour ce faire. Leurs résultats semblaient en désaccord avec le FSS, ce qui mis la communauté de la physique théorique en émoi. Un consensus s'est fait par la suite pour penser que l'ordinateur était en cause. Le "Finite Size Scaling" a été utilisé, avec succès cette fois, dans les références[16, 17].

On trouvera dans le tableau 2, les résultats des expériences numériques énumérées plus haut. La précision obtenue est équivalente à celle du tableau 1, ce qui montre l'efficacité de la méthode Monte Carlo. Une amélioration substantielle de la précision atteinte semble tout à fait possible dans un futur proche, grâce à la découverte d'algorithmes "non locaux" qui souffrent moins du ralentissement cri-

tique comme l'algorithme de Swendsen-Wang[3], et à l'arrivée de machines ~ 1000 fois plus puissantes.

Parmi tous les autres problèmes de mécanique statistique qui ont été étudiés intensivement avec la méthode de Monte Carlo, je citerais deux exemples

- Les systèmes désordonnés. Par exemple les "verres de spin"[18], dont un modèle est le modèle d'Ising avec couplages aléatoires, pour lequel l'énergie d'une configuration est égale à

$$H(\{\sigma\}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j \quad (34)$$

où $J_{i,j}$ est une variable aléatoire.

- Les systèmes quantiques. La méthode Monte Carlo s'applique à la mécanique statistique quantique, quoique de façon peu naturelle malheureusement[20]. Ce sujet est devenu très actif depuis la découverte[19] des "Supraconducteurs à haute température critique" en 1986. Certaines explications de ce phénomène font appel aux propriétés du modèle de Hubbard et à sa limite de couplage fort, le modèle de Heisenberg classique, qui sont étudiés activement.

3 QCD sur le réseau

La Chromo Dynamique Quantique (QCD) est une théorie quantique des champs. Il s'est établi au début des années 1970 un très large consensus parmi les physiciens des particules élémentaires pour considérer que l'on tenait en elle la théorie de l'interaction forte, c'est à dire de l'interaction responsable de la cohésion des noyaux des atomes. C'est une des quatre interactions fondamentales, à côté de l'interaction gravitationnelle, de l'interaction électromagnétique et de l'interaction faible. L'interaction forte est la plus forte des interactions⁵, mais elle a une portée extrêmement courte, de quelques fermis (1 fermi = $10^{-15}m$), elle devient totalement négligeable au-delà. Les particules sensibles à l'interaction forte sont appelées hadrons. A l'exception du proton (noté p) et du neutron (noté n), les

⁵L'énergie de liaison d'un proton ou d'un neutron à l'intérieur d'un noyau vaut quelques méga-électron-volts (Mev), l'énergie de liaison d'un électron atomique quelques électron-volts (ev).

hadrons ont des temps de vie extrêmement courts. On a mis en évidence un très grand nombre de hadrons, le lecteur trouvera une liste de quelques hadrons légers parmi les plus importants dans la table 3.

	Nom	Masse	Temps de vie	Spin
Baryons	p	938.27 Mev	stable	1/2
	n	939.57 Mev	900 s	1/2
	Λ	1116 Mev	$2.6 \cdot 10^{-10}$ s	1/2
	Σ^+	1189 Mev	$0.8 \cdot 10^{-10}$ s	1/2
	Σ^0	1193 Mev	$7.4 \cdot 10^{-20}$ s	1/2
	Σ^-	1197 Mev	$1.5 \cdot 10^{-10}$ s	1/2
	Mésons	π^\pm	139 Mev	$2.6 \cdot 10^{-8}$ s
π^0		135 Mev	$8.4 \cdot 10^{-17}$ s	0
K_S^0		498 Mev	$.89 \cdot 10^{-10}$ s	0
K_L^0		498 Mev	$5.2 \cdot 10^{-8}$ s	0
K^\pm		494 Mev	$1.2 \cdot 10^{-8}$ s	0
ρ^\pm		~ 770 Mev	$4 \cdot 10^{-24}$ s	1
ρ^0		~ 770 Mev	$4 \cdot 10^{-24}$ s	1

Tableau 3 : Propriétés de quelques hadrons. Les baryons ont un spin demi-entier ($S = 1/2, 3/2, \dots$), les mésons un spin entier. A chaque baryon correspond un anti-baryon de charge opposée et de masse et temps de vie exactement égaux (par exemple, au proton p correspond l'anti-proton \bar{p}). Les mésons chargés existent en paires de particules de charges opposées, anti-particule l'une de l'autre.

Selon la Chromo Dynamique Quantique, tous les hadrons sont des états liés de particules fondamentales appelées quarks et gluons. La théorie s'accommode d'un nombre arbitraire d'espèces de quarks de masses quelconques (les gluons ont une masse exactement nulle). Jusqu'à la découverte du J/Ψ en 1974, tous les hadrons connus pouvaient s'interpréter comme états liés de trois espèces de quarks (quarks "u", "d" et "s"), la découverte du J/Ψ implique l'existence d'une quatrième espèce de quark, le "quark c". On sait depuis la découverte du Υ qu'il existe un cinquième quark, le "quark b", et très certainement un sixième, le "quark t" dont la masse très lourde fait qu'il n'est pas produit (plus précisément que les hadrons contenant le quark "t" ne sont pas produits) dans les expériences faites à ce jour, du moins en quantité détectable.

On suppose que la dynamique de la théorie est telle que l'on ne peut pas briser un hadron pour en extraire un quark, ou un gluon, alors qu'il est facile, par exemple, de briser un atome pour en extraire des électrons. En brisant un hadron, on ne peut que créer d'autres hadrons. On dit que "les quarks et les gluons sont confinés" (à l'intérieur des hadrons). Les physiciens sont convaincus que s'ils pouvaient résoudre QCD, l'hypothèse du confinement serait démontrée. La masse de tout hadron serait alors obtenue comme une fonction des sept (!) paramètres⁶ de la théorie que sont les masses des six espèces de quarks et une échelle de masse supplémentaire qui fixe la constante de couplage. La valeur de ces sept paramètres choisie par le Créateur permettant de reproduire l'ensemble des masses des hadrons telles qu'on les a mesurées.

Malheureusement, les méthodes analytiques actuelles ne permettent pas de calculer, ne serait ce que de façon approximative, la masse des états liés de quarks et de gluons, ni de décider si le confinement est une propriété de QCD ou non. Elles s'appliquent par contre à l'analyse de certaines collisions dites "inélastiques profondes" ("deep inelastic scattering"). Le ralliement universel à QCD vient de ce que seul QCD, parmi toutes les théories quantiques des champs, explique les résultats expérimentaux remarquables obtenus avec ces collisions, grâce à sa propriété de "Liberté Asymptotique"[21]. Ce fait donne aussi du poids au succès semi-quantitatif de tous les modèles "inspirés de QCD" inventés pour reproduire telles ou telles données expérimentales (modèles d'états liés non-relativistes de quarks, "bag model", modèles de "partons", ...).

En 1974 K. Wilson a proposé une version discrétisée de QCD ("QCD sur réseau"). Il s'agit d'un modèle de Mécanique Statistique quadri-dimensionnel que l'on peut étudier par Monte Carlo⁷. Ce modèle possède une transition de phase du second ordre, au voisinage de laquelle il devient équivalent à la théorie des champs de départ (QCD). Les variables dynamiques de QCD sur réseau sont des matrices 3 par 3 de $SU(3)$ associées aux liens du réseau: $\{U\}$, qui correspondent aux degrés de liberté gluoniques, et des variables de Grassmann associées aux sites du réseau $\{\Psi, \bar{\Psi}\}$, qui correspondent aux degrés de liberté des quarks. Pour alléger les formules je fais comme s'il n'existait qu'un type de quark de masse m_q . La probabilité d'obtenir une configuration $\{U, \Psi, \bar{\Psi}\}$ est

⁶En fait, la valeur des masses des trois quarks les plus lourds n'a vraisemblablement qu'une influence minimale sur la masse des hadrons légers.

⁷La méthode de développement de haute température n'a pas donné de résultats bien intéressants.

$$P(\{U, \Psi, \bar{\Psi}\}) = Z(g, m_q)^{-1} e^{-\frac{1}{g^2} S(\{U, \Psi, \bar{\Psi}\})} \quad (35)$$

Dans cette formule, g est la constante de couplage, $Z(g, m_q)$ la fonction de partition, et $S(U, \Psi, \bar{\Psi})$ l'action de la configuration

$$S = \sum_p \text{Re} \text{cal} \left[\text{Trace}(U_{\hat{p}}) \right] + \sum_{i,j} \bar{\Psi}_i \Delta_{i,j}(\{U\}, m_q) \Psi_j \quad (36)$$

\sum_p est une somme sur toutes les plaquettes du réseau (les carrés élémentaires) et $U_{\hat{p}}$ le produit ordonné des variables $U_{\langle i,j \rangle}$ associées aux quatre liens⁸ qui bordent la plaquette p . Le terme dépendant de Ψ , et $\bar{\Psi}$ contient un opérateur de différences finies $\Delta(\{U\}, m_q)$. On a beaucoup étudié la "théorie de pure jauge", c'est à dire la version radicalement simplifiée du modèle qui ne contient que les degrés de liberté gluoniques. Je vais poursuivre dans ce cadre, ce qui simplifie beaucoup les formules, et incidemment me dispense de définir l'intégration sur des variables de Grassmann. On s'attend à ce que dans la théorie de pure jauge, les gluons soient confinés aussi. Ils forment des états liés appelés "Glue Balls". On considère les observables, appelés par abus de langage opérateurs

$$\mathcal{O}^C = \text{Trace} \left(\prod_C U_{\langle i,j \rangle} \right) \quad (37)$$

où le produit est un produit ordonné le long d'un circuit fermé de liens du réseau, noté \mathcal{C} . Soient deux telles observables \mathcal{O}^C et $\mathcal{O}^{C'}$. Dans la limite où la distance $d_{C,C'}$ entre les contours \mathcal{C} et \mathcal{C}' tends vers l'infini, on a

$$-\frac{1}{d_{C,C'}} \ln \left(\langle \mathcal{O}^C \mathcal{O}^{C'} \rangle - \langle \mathcal{O}^C \rangle \langle \mathcal{O}^{C'} \rangle \right) \sim m_{min} \quad (38)$$

où m_{min} est la masse de la particule la plus légère de la théorie, l'inverse de la longueur de corrélation. En travaillant un peu, on peut obtenir les masses des autres états: de façon générale, en Mécanique Quantique, les états d'un système se classent selon les représentations irréductibles du groupe (de recouvrement universel de) $SO(3)$, ces représentations sont caractérisées par un demi-entier $J = 0, 1/2, 1, \dots$ qui s'interprète comme le moment angulaire de l'état. Sur

⁸Par définition, $U_{\langle i,j \rangle}$ est l'hermitique conjugué de $U_{\langle j,i \rangle}$.

le réseau $SO(3)$ se réduit au groupe du cube. On choisit une des quatres directions du réseau comme "axe des temps" et se restreint aux observables dont le support est contenu dans un hyperplan de temps constant t . On construit[23] alors des combinaisons linéaires de ces opérateurs qui se transforment selon les représentations irréductibles du groupe du cube et sont invariants par translation dans l'hyperplan t . Les fonctions de corrélation de ces opérateurs, notés⁹ $O^J(t)$, satisfont

$$C(t-t') := \langle O^J(t)O^{J'}(t') \rangle - \langle O^J(t) \rangle \langle O^{J'}(t') \rangle \quad (39)$$

$$= \delta_{J,J'} \sum_i A_J^i(g, \mathcal{C}) e^{-(t-t')E_J^i(g)} \quad (40)$$

Les coefficients $A_J^i(g, \mathcal{C})$ dépendent du choix arbitraire de circuit \mathcal{C} . Les énergies $E_J^i(g)$ n'en dépendent pas. La somme porte sur tous les états de moment total J et d'impulsion totale nulle. Ces états consistent en un, deux, trois, ... "Glue Balls". Pour $t-t'$ grand, la somme est dominée, sauf accident, par la contribution des "Glue Balls" de spin J les plus légers, de masses $m_J^1(g)$, $m_J^2(g)$, ..., et la contribution des états à plusieurs "Glue Balls" est négligeable.

$$C(t-t') \sim \delta_{J,J'} [A_J^1(g, \mathcal{C}) e^{-(t-t')m_J^1(g)} + A_J^2(g, \mathcal{C}) e^{-(t-t')m_J^2(g)} + \dots] \quad (41)$$

La transition du second ordre du modèle est obtenue dans la limite $g \rightarrow 0$, $L \rightarrow \infty$. Toutes les masses tendent alors vers zéro de la même façon

$$m_J^i(g) \sim A_J^i g^B \epsilon^{-\frac{t}{g^2}} \quad g \rightarrow 0 \quad L \rightarrow \infty \quad (42)$$

B et C sont des constantes universelles connues exactement. Dans cette "limite continue", le rapport de deux masses quelconques tend vers une limite qui est la valeur de ce rapport dans la théorie continue.

$$\frac{m_J^i(g)}{m_{J'}^{i'}(g)} \rightarrow \frac{m_J^i}{m_{J'}^{i'}} \quad g \rightarrow 0 \quad L \rightarrow \infty \quad (43)$$

Il suffit donc de fixer la valeur de la masse d'un "Glue Ball", pour déterminer la masse de tous les autres, le "spectre de la théorie". Notons bien qu'il y a un grand arbitraire dans la façon de discrétiser QCD, mais que cet arbitraire n'affecte pas la limite continue grâce à l'universalité des phénomènes critiques, qui joue ainsi un rôle fondamental.

⁹Ici J distingue les représentations du groupe du cube!

On dispose donc d'une méthode pour obtenir le spectre de la version discrétisée de QCD sur un réseau fini de taille L^4 , en fonction de la constante de couplage. Cette estimation comporte des erreurs statistiques et systématiques que l'on peut diminuer à volonté:

- Les erreurs statistiques décroissent avec le nombre de configurations générées N_{Conf} comme $O(1/\sqrt{N_{Conf}})$.
- Les effets de taille finie décroissent comme $O(e^{-m_{min}L})$ pour L grand, pourvu que l'on utilise des conditions aux limites périodiques pour les variables de liens $U_{\langle i,j \rangle}$.
- On diminue les effets de la discrétisation en diminuant g . Si l'on diminue g de façon à ce que les masses $\{m'_j\}$ soient approximativement divisées par deux, il faut malheureusement aussi utiliser un réseau de taille double, qui prend 16 fois plus de temps à simuler. L'algorithme souffrant de ralentissement critique, il faut aussi générer plus de configurations, et le facteur 16 devient ~ 64 . C'est là le principal obstacle à ce type de calcul.

Il est donc clair que seule l'expérience peut décider si le calcul par Monte Carlo du spectre de QCD est faisable ou non, si l'on peut entrer dans la région de g suffisamment petits pour que l'équation 43 soit approximativement une égalité, tout en limitant les effets de taille finie et les erreurs statistiques. De plus, l'estimation des masses $m'_j(g)$, $m''_j(g) \dots$, à partir des données numériques, est un problème très délicat. C'est ainsi que les simulations faites depuis 1979 sont avant tout exploratoires. Le sujet s'est néanmoins déjà affirmé comme un des plus gourmands en ressource de calcul, comme le montre la table 4 qui donne quelques points de repère historiques:

1979 Premières simulations de la théorie du pure jauge faite à Brookhaven National Laboratory par M. Creutz[24]. Il trouve que la force de rappel entre un quark et un anti-quark reste constante lorsqu'on les éloigne l'un de l'autre. Ceci est en accord avec le confinement de la paire. Cette constante appelée "tension de corde" est notée K . Les données, très grossières, indiquent que \sqrt{K} , qui a la dimension d'une masse, décroît lorsque $g \rightarrow 0$ en accord avec l'équation 43. Ces résultats ont fait grand bruit, et sont à l'origine d'une explosion de travaux.

Date		Heures	Machine	Mflops	Heures CRAY 1
1979	M. Creutz	1 h	CDC 7600	8 ?	.05
1983	R. Petronzio	100 h	CRAY 1 (EDF)	160	100
1990	MT _c	12 000 h	CRAY YMP	335	25 000
1988	APE	4 000 h	APE 16	1 000	25 000
1989	N. Christ	4 000 h	Columbia 256	16 000	400 000
1990	Tsukuba Univ.	4 000 h	QCDPAX	12 500	310 000
?	D. Weingarten	4 000 h	GF11	11 000	270 000
1992 ?	APE	4 000 h	APE100	100 000	2 500 000
1993 ?	Teraflop Project	4 000 h		1 000 000	25 000 000
1988	CM2		64 K	29 000	
1990	INTEL		Gamma	7 600	
1991	INTEL		Delta	30 000	

Tableau 4 : Evolution des ressources employées pour les simulations de QCD sur réseau. Le nombre d'heures utilisées, une estimation de la puissance de la machine exprimée en méga opérations flottantes par seconde, et le nombre d'heures équivalentes sur un CRAY 1 sont indiqués. J'ai attribué forfaitairement 4000 h aux simulations sur machine dédiées (une année comporte 8760 h). Je présente d'abord les trois simulations repères du texte, puis les machines dédiées, et finalement trois exemples de machines du commerce récentes, la Connection Machine de TMC (dans sa version complète) et les INTEL Sigma et Delta.

1983 Un groupe de trois physiciens Italiens[25] se fait "prêter" pour deux week-end le CRAY de l'EDF à Clamart. Ils disposent de ~ 2000 fois plus de temps calcul que M. Creutz, ce qui semblait gigantesque à l'époque. La simulation donne des valeurs des masses des hadrons en accord semi-quantitatif avec les valeurs expérimentales de la table 3.

1990 Certains groupes ont à leur disposition exclusive une fraction notable d'un super ordinateur. Parmi eux, le groupes "MTc" qui utilise le CRAY YMP du HLRZ de Jülich, et la collaboration Américaine "High Energy Monte Carlo Grand Challenge" qui utilise les machines du DOE.

A partir du milieu des années 80, plusieurs groupes se lancent dans la fabrication d'ordinateurs dédiés à QCD, construits à partir d'éléments du commerce.

Le groupe de APE[27] à Rome autour de G. Parisi a construit une machine à 4 puis 16 processeurs. Le groupe de N. Christ à Columbia University a construit des machines à 16, 64 puis 256 processeurs. Il y a aussi la machine GF11 de D. Weingarten (IBM, YorkTown Heights) comprenant 566 processeurs. Annoncée en 1984, elle n'est pas terminée. Le groupe APE construit actuellement une machine de 100 GigaFlops[28] qui devrait être terminée fin 1992, et un groupe d'une quarantaine de physiciens Américains, en collaboration avec Thinking Machine Corporation (TMC), à proposé au DOE un projet, de 39 millions de Dollars, de construction d'une machine de un TeraFlop.

Une discussion des résultats déjà obtenus, qui ne peut être que très technique, prendrait beaucoup de place. On se reportera aux "proceedings" du congrès annuel du sujet[26]. On peut classer ces simulations en trois groupes:

- Simulations de la théorie de pure jauge: Calcul du spectre de la théorie, calcul du potentiel d'interaction entre un quark et un anti-quark, investigation du rôle de la topologie dans la dynamique.
- Calcul de la masse des hadrons, souvent fait dans une approximation ("quenched approximation") qui néglige l'influence des quarks sur la dynamique des variables de liens.
- Eléments de matrices. Dans l'analyse des interactions électromagnétiques et faibles des hadrons, on sait souvent factoriser la contribution des interactions fortes en un "élément de matrice". QCD sur réseau offre la possibilité unique de calculer ces éléments de matrices.

L'espoir est que l'arrivée prochaine des machines de la génération TeraFlop, combinée aux progrès considérables faits dans le domaine des algorithmes, tout spécialement dans l'art de construire des opérateurs dont les fonctions de corrélation permettent d'extraire les quantités physiques de façon optimale, permettra de calculer les propriétés des Hadrons à partir le QCD sur réseau avec une précision de quelques pour cents.

4 Remerciements

Je remercie les organisateurs de la rencontre D. Talay et N. Bouleau de m'avoir invité, et d'être restés calmes face à mon extrême lenteur à rédiger ma contribution.

Bibliographie

- [1] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, (Academic Press 1982).
- [2] N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. Teller and E. Teller, *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087.
- [3] On trouvera un exposé détaillé, dans un esprit de physique mathématique, sur la théorie de la méthode de Metropolis appliquée aux systèmes de spins classiques dans A. D. Sokal, *Cours de Troisième Cycle de la Physique en Suisse Romande*, Lausanne, Juin 1989.
- [4] Les propriétés de ces générateurs sont discutées dans:
D.E. Knuth, *The Art of Computer Programming*, Volume 2, (Addison-Wesley 1981);
G. Marsaglia, *A Current View of Random Number Generators*, in *Proceedings of Computer Science and Statistics: The Interface*, edited by L. Billard. (Elsevier 1985);
G. Marsaglia and Liang-Huey Tsay, *Matrices and the Structure of Random Number Sequences*, *Linear Algebra and its Appl.* 67 (1985) 147;
F. James, *Computer Phys. Comm.* 60 (1990) 329.
- [5] *Applications of the Monte-Carlo Method in Statistical Physics*, edited by K. Binder, (Springer-Verlag 1984).
- [6] K. Binder and D.W. Heermann, *Monte Carlo Simulations in Statistical Physics, an introduction*. Springer Series in Solid State Physics, Volume 80, (1988).
- [7] Parmi les nombreux ouvrages sur les phénomènes critiques:
S.K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena* (Benjamin 1976);
G. Parisi, *Statistical Field Theory* (Addison-Wesley 1988).
- [8] K.G. Wilson, *Phys. Rev. B* 4. 3174 (1971) 75;
Ces développements sont le sujet du livre de C. Domb et M.S. Green *Phase Transition and Critical Phenomena*, Volume 6 *The renormalization Group and its applications* (Academic Press 1974).

- [9] Un ouvrage de référence, avec un point de vue moderne, sur la théorie des champs et son application à la mécanique statistique est le livre de J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, (Clarendon Press 1989).
- [10] C. Domb et M.S. Green *Phase Transition and Critical Phenomena*. Volume 3, *Series Expansions for Lattice Models* (Academic Press 1974), ainsi que de la contribution de A.J. Guttmann dans le Volume 13 de la série.
- [11] Voir le cours de J.L. Cardy, école des Houches 1988, *Champs, Cordes et Phénomènes Critiques*, edited by E. Brezin and J. Zinn-Justin, (Elsevier 1989).
- [12] G.S. Pawley, R.H. Swendsen, D.J. Wallace and K.G. Wilson, *Phys. Rev.* B29 (1984) 4030.
- [13] H. Blöte et al, *Europhysics Lett.* 10 (1989) 105;
H. Blöte et al. *Physica* 161A (1989) 1.
- [14] *Finite Size Scaling and Numerical Simulations of Statistical Systems*, edited by V. Privman, (World Scientific 1990).
- [15] R.B. Pearson, J.L. Richardson and D. Toussaint, *J. Comp. Phys.* 51 (1983) 241;
M.N. Barber, R.B. Pearson, J.L. Richardson and D. Toussaint, *Phys. Rev.* B32 (1985) 1720.
- [16] G. Bhanot, R. Salvador, S. Black, P. Carter and R. Toral. *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987) 803.
- [17] N. Alves, B. Berg and R. Villanova, *Phys. Rev.* B41 (1990) 383.
- [18] M. Mezard, G. Parisi and M. Virasoro. *Spin Glass Theory and Beyond* (World Scientific 1987);
K. Binder, *Monte Carlo Methods and Glassy Systems*. *Ferroelectrics*, Volume 104 (1990) 3.
- [19] Voir le numéro de Juin 1991 de *Physics Today*.
- [20] *Monte Carlo Methods in Quantum Problems* edited by M. Kalos, (D. Reidel 1984).

- [21] Voir le cours de D.J. Gross, école des Houches 1976. *Méthodes en Théorie des Champs*, edited by R. Ralian and J. Zinn-Justin, (North Holland 1976).
- [22] K.G. Wilson, Phys. Rev. D10 (1974) 2445.
- [23] B. Berg and A. Billoire, Nucl. Phys. B221 (1983) 109.
- [24] M. Creutz, Phys. Rev. D21 (1980) 2308.
- [25] H. Lipps, G. Martinelli, R. Petronzio and F. Rapuano, Phys. Lett. 126B (1983) 250.
- [26] *Proceedings of the International Symposium on Field theory on the Lattice*, (Seillac) edited by A. Billoire et al (North Holland 1988);
Proceedings of the 1988 Symposium on Lattice Field Theory, (FNAL) edited by A.S. Kronfeld and P.B. Mackenzie (North Holland 1989);
Proceedings of the 1989 Symposium on Lattice Field Theory, (Isola di Capri) edited by N. Cabibbo et al (North Holland 1990);
Proceedings of the International Conference on Lattice Field Theory, (Tallahassee) edited by U.M. Heller, A.D. Kennedy and S. Sanielevici (North Holland 1991);
 Ainsi que le livre *Lattice Gauge Theories and Monte Carlo Simulations*, edited by C. Rebbi, (World Scientific 1983).
- [27] M. Albanese et al, Comp. Phys. Comm. 45 (1987) 345.
- [28] A. Bartoloni et al, Particle World. 2 (1991) 65.