



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE : Master

Filière : Physique
Option : Physique des Matériaux

THÈME :

**Méthode Monte Carlo quantique par diffusion :
Application à l'oscillateur harmonique.**

Préparé par : Belkasmi Imene

Soutenu le : --/--/2021

Devant le jury :

Président : Kahoul Abdelhalim

Rapporteur : Khalfallah Farid

Examineur : Mameri Samir

Pr. Université de BBA

M.C.A Université de BBA

M.C.B. Université de BBA

Année Universitaire 2020-2021



Dédicace

Je dédie cette première page a toutes les personnes qui ont de près ou de loin contribué à la réalisation de ce mémoire

En effet, ce mémoire représente bien plus que de simples travaux. ce mémoire est la finalité de cinq longues années d'études, c'est pourquoi je tiens tout d'abord à adresser mes remerciements à toutes les personnes qui ont su me soutenir en amont de ce mémoire

Remerciement

- v je tiens avant tout à remercier le miséricordieux tout puissant, car sans son aide rien de cela n'aura pu être possible
- v A mes parents
- v A mes chères sœurs, A mes chers frères vos encouragements ont été ma motivation durant ce travail, c'est l'occasion pour moi de vous remercier très sincèrement. puisse t-il vous inspirer à toujours aller de lavant
- v J'exprime mes profondes gratitude et respectueuse reconnaissance a mon encadreur « **Mr F. Khalfallah** » pour son suivi durant la préparation de mon projet de fin d'étude
- v Je tien aussi a remercier tous les membres du jury qui m'ont fait l'honneur d'accepter de juger mon travail
- v A tous mes amis qui ont toujours été à mes cotés dans les bons et les mauvais moments en particulier mes chères amies « **imene saoudi** »

Table des matières

Introduction générale.....	5
1 Chapitre I : Introduction aux méthodes Monte Carlo.....	7
1.1 Historique de la méthode Monte Carlo.....	8
1.2 Définition.....	8
1.3 Elément de base de Monte Carlo.....	9
1.3.1 Variables aléatoire.....	9
1.3.2 Simulation Monte Carlo.....	16
1.3.3 Génération de nombres aléatoires.....	18
1.4 Marches aléatoires.....	20
1.4.1 Chaines de Markov.....	20
1.4.2 Algorithme de Metropolis-Hastings (MH).....	21
2 Chapitre II : Méthode Monte Carlo et équations intégrales.....	23
2.1 Introduction.....	24
2.2 Méthode d'intégration de Monte Carlo.....	24
2.2.1 Description de la méthode.....	24
2.2.2 Généralisation aux intégrales multidimensionnelles.....	27
2.2.3 Convergence de la méthode Monte Carlo.....	30
2.3 Monte Carlo et équations intégrales.....	31
2.3.1 Transformation d'une équation différentielle en une équation intégrale.....	31
2.3.2 Application à l'oscillateur harmonique classique.....	33
3 Chapitre III : Méthode Monte Carlo quantique par diffusion.....	39
3.1 Introduction.....	40
3.2 Equation de Schrödinger sous forme intégrale.....	40
3.2.1 Propagateur (fonction de Green) de l'équation de Schrödinger.....	41
3.3 Formalisme de la méthode Monte Carlo quantique par diffusion (QDMC).....	42
3.3.1 Approximation de l'état fondamental.....	43
3.3.2 Intégration Monte Carlo.....	44
3.4 Application à l'oscillateur harmonique.....	46
Conclusion.....	50

Bibliographie.....	52
--------------------	----

Liste des figures

Chapitre I

- Figure 1-1 :** Histogramme d'une distribution uniforme à (gauche) et d'une distribution gaussienne à (droite) avec 20000 événements obtenue à l'aide de Maple18
- Figure 1-2 :** Méthode d'inversion pour une distribution normale (fonction gaussienne).....19
- Figure1-3 :** L'algorithme de la méthode de rejet20

Chapitre II

- Figure 2-1 :** Calcul MC de la solution de l'équation intégrale (2-30) pour trois échantillons avec une densité approximée par un développement de Taylor de degré 1. La courbe en continue représente la solution exacte de l'EDO de l'oscillateur harmonique35
- Figure 2-2 :** Calcul MC de la solution de l'équation intégrale (2-30) pour trois échantillons avec une densité approximée par un développement de Taylor de degré 3. La courbe en continue représente la solution exacte de l'EDO de l'oscillateur harmonique36
- Figure 2-3 :** Calcul MC de la solution de l'équation intégrale (2-30) pour trois échantillons avec une densité approximée par un fit polynomial de degré 5. La courbe en continue représente la solution exacte de l'EDO de l'oscillateur harmonique.....37
- Figure 2-4 :** Variations exponentielle du nombre de points d'intégration en fonction de la dimension (n) pour les trois méthodes de Newton-Cotes et pour un nombre de subdivisions $m=10$ 38

Chapitre III

- Figure 3-1 :** Calcul QDMC de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique pour plusieurs valeurs du nombre de marcheurs.....48
- Figure 3-2 :** Calcul QDMC de l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique49

Liste des tableaux

Chapitre III

Tableau 3-1 : Valeur obtenu par calcul QDMC de l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique.....	49
--	----

Introduction générale

Le terme méthode de Monte Carlo, qui sont des techniques probabilistes impliquant calcul d'une valeur numérique à l'aide de méthodes stochastiques, trouve son origine dans les jeux de hasard pratiqués à la ville de Monte-Carlo, ils ont été inventés par N. Metropolis dans les années 40 dans un article publié pour la première fois en 1949. Les méthodes de Monte Carlo se sont avérées très efficaces pour résoudre de nombreux problèmes mathématiques en analyse numérique et en physique.

On peut citer l'estimation de surfaces, le calcul d'intégrales multiples et la résolution d'équations aux dérivées partielles, les problèmes de diffusion et de transfert, ainsi que les problèmes à n corps en mécanique quantique et physique statistique où ces méthodes sont fréquemment appliquées. Tout cela fait des méthodes de simulation Monte Carlo un choix judicieux pour un grand nombre d'études.

Ce travail a pour but d'étudier certaines méthodes de Monte Carlo et leurs applications à l'intégration multidimensionnelle et à la résolution d'équations différentielles partielles connues comme l'équation de Schrödinger pour les systèmes à plusieurs particules en mécanique quantique. Ce mémoire est divisé en trois chapitres :

Le premier chapitre est une introduction aux méthodes Monte Carlo. On commence par un rappel théorique sur les probabilités, les nombres aléatoires et comment générer des échantillons de ces nombres. On introduit ensuite une méthode d'échantillonnage très utilisée dans les méthodes Monte Carlo et basée sur les Marches aléatoires et plus précisément les chaînes de Markov.

Dans le deuxième chapitre, nous présentons une utilisation des méthodes de Monte Carlo, où il s'agit de l'évaluation des intégrales et en particulier des intégrales multidimensionnelles. Dans la deuxième partie du chapitre, nous verrons comment convertir un type particulier d'équations différentielles en équations d'intégrales que l'on peut résoudre à l'aide de Monte

Carlo. Nous présentons également une application concrète de cette technique dans l'étude de l'oscillateur harmonique classique à l'aide d'un.

Le chapitre 3 est consacré à l'étude de la méthode Monte Carlo quantique par diffusion (QDMC). Nous commençons par la présentation du formalisme de la méthode qui se base sur la résolution de la forme intégrale de l'équation de Schrödinger à l'aide d'une fonction de Green par calcul Monte Carlo. Par la suite et par souci de comparaison avec des solutions exactes, nous présentons l'application de la méthode QDMC à l'oscillateur harmonique quantique.

1 Chapitre I : Introduction aux méthodes Monte Carlo

1.1 Historique de la méthode Monte Carlo

Le nom de la méthode provient de la ville Monte Carlo dans la principauté de Monaco. La ville est associée aux roulettes de chance, un simple générateur de nombres aléatoires (1). C'est en 1949 que le physicien gréco-américain Nicholas Metropolis et le mathématicien américain d'origine polonaise Stanisław Ulam publient l'article fondateur de cette méthode de calcul et lui donnent son nom.

Parmi les problèmes efficacement traités par la méthode de Monte Carlo, il y a les calculs d'intégrales (multiples notamment) et les problèmes de diffusion de collision et de mouvement de particules dans un milieu matériel. Ceci est rendu possible par la propriété essentielle de pouvoir simuler une grande variété de fonction de distributions. Pour être plus exact, l'idée de procéder à des tirages aléatoires pour évaluer des intégrales compliquées était dans l'air du temps parmi la communauté des physiciens, mais l'apport majeur de Metropolis & Ulam fut de proposer la technique d'échantillonnage préférentiel, qui améliore largement l'efficacité de la méthode. Pour l'anecdote, c'est dans le cadre des recherches du projet Manhattan sur le développement de la bombe atomique que ces chercheurs (avec quelques autres dont notamment John Von Neumann) avaient commencé à développer leurs idées.

Des développements importants des méthodes de Monte-Carlo furent l'algorithme de Metropolis – Hastings pour la simulation de certaines variables aléatoires en physique statistique (travaux dus notamment à Marshall Rosenbluth en 1953 et à Keith Hastings en 1970), algorithme qui à son tour fut la base de la méthode du recuit simulé (1983) pour trouver des extrema globaux de fonctions définies sur des espaces de grande dimension. Plus récemment (2008), on a aussi parlé des méthodes de Monte-Carlo à l'occasion de leur utilisation dans des logiciels joueurs de go (très grossièrement, l'idée est que l'ordinateur évalue la qualité d'une position en imaginant que les joueurs terminent leur partie en jouant au hasard), où ces méthodes ont permis des progrès spectaculaires. La dénomination « Monte-Carlo » provient simplement de l'appel au hasard dans les algorithmes, par allusion au célèbre quartier de Monaco réputé pour son casino (2).

1.2 Définition

On appelle méthode de Monte Carlo (M.C.) toute méthode visant à calculer une valeur numérique en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes. La

méthode de Monte Carlo est une méthode d'approximation au sens statistique du terme. Il n'y a pas de définition précise de ce qu'est une technique de type Monte Carlo, mais la description la plus habituelle consiste à dire que les méthodes de ce type se caractérisent par l'utilisation du hasard pour résoudre des problèmes centrés sur le calcul d'une valeur numérique (3). Ainsi, les méthodes de Monte Carlo sont une classe de techniques qui peuvent être utilisées pour simuler le comportement d'un système physique ou mathématique, distingué à partir d'autres méthodes de simulation par son aspect stochastique, c'est-à-dire non déterministe, le traitement statistique de ce comportement aléatoire est à la base des méthodes de Monte Carlo et conduit à l'utilisation de suites de nombres aléatoires dans les opérations arithmétiques.

1.3 Élément de base de Monte Carlo

La méthode Monte Carlo désigne une famille de méthodes algorithmiques visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés stochastiques aléatoires basées sur les principes de la théorie des probabilités et statistiques (4) que l'on va résumer ci-dessous.

1.3.1 Variables aléatoire

Dans de nombreux cas, le résultat d'un événement aléatoire imprévisible peut être converti en une valeur numérique. Une définition simple d'un nombre aléatoire consiste à dire que c'est une valeur numérique résultant d'un processus ou d'une expérience dont la valeur ne peut être prédéterminée par les conditions initiales et qu'elle est due au hasard.

Ainsi, pour chaque résultat élémentaire, il existe un nombre réel x_i associé. Une sélection aléatoire X de l'une des valeurs possibles x_1, x_2, \dots est appelée une variable aléatoire. La probabilité que la valeur x_i soit choisie (5) est donnée par :

$$p_i = P\{X = x_i\}$$

Une variable aléatoire peut être soit discrète ou continue. Dans notre étude nous allons nous concentrer uniquement sur les variables continues.

1.3.1.1 Densité probabilité

Soit X une variable aléatoire continue (appelée aussi variable à densité), qui peut prendre toute valeur réelle dans l'intervalle $[a, b]$. On définit une fonction $\rho(x)$ appelée densité de probabilité de la variable aléatoire X , telle que la probabilité d'obtenir une valeur x dans l'intervalle $[x_1, x_2]$ est : (6)

$$P(x_1 \leq x \leq x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x) dx \quad 1-1$$

Cette fonction $\rho(x)$ vérifie la condition suivante, appelée condition de normalisation :

$$\int_a^b \rho(x) dx = 1 \quad 1-2$$

On introduit aussi la fonction de répartition $F(x)$ qui donne la probabilité d'obtenir une valeur inférieure ou égale à x :

$$F(x) = \int_{-\infty}^x \rho(x') dx'$$

La densité de probabilité représente la dérivé de la probabilité et de la fonction de répartition :

$$\rho(x) = \frac{dP}{dx} = \frac{dF}{dx} \quad 1-3$$

Ainsi la probabilité d'obtenir une valeur entre x et $x + dx$ est égale à :

$$dP = \rho(x) dx \quad 1-4$$

Variable aléatoire continue

Soit X une variable aléatoire réelle définie sur un espace probabilité(Ω). Nous disons que la variable aléatoire X est continue s'il existe une fonction ρ définie sur R telle que

1. $\rho(x) \geq 0$ pour tout $x \in R$;

2. L'ensemble des points de discontinuités de ρ est finie et ces discontinuités sont de première espèce (la limite à gauche et à droite en chaque point existe) (7)

1.3.1.2 Espérance et variance

Espérance

Définition : Soit I un intervalle d'extrémités a et b , ($-\infty \leq a < b \leq +\infty$). Soit f une fonction à valeur dans R définie et continue sur I et X une variable aléatoire réelle (v.a.r.).

$f(X)$ admet une espérance mathématique $E[f(X)]$ si et seulement si l'intégrale (8) :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx$$

est absolument convergente et nous appelons alors cette intégrale l'espérance mathématique (ou la moyenne) de $f(X)$:

$\mathbf{E[f(X)] = \langle f(X) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx}$	1-5
--	-----

Propriétés

1. L'espérance est linéaire : pour tout $\alpha, \beta \in R$, et pour toutes v.a.r. X et Y

$$\mathbf{E(\alpha X + \beta Y) = \alpha E(X) + \beta E(Y)} \quad 1-4$$

2. Si X est une v.a.r. constante égale à $a \in R$, c'est-à-dire pour tout $\omega \in \Omega$,

$$X(\omega) = a, \text{ alors } P(X = a) = 1 \text{ et } E(X) = a.$$

3. L'espérance d'une v.a.r. positive est positive. En particulier, si $X \geq Y$ (ce qui signifie que pour tout $\omega \in \Omega$, $X(\omega) \geq Y(\omega)$), alors $E(X - Y) \geq 0$ donc $E(X) \geq E(Y)$.

L'espérance d'une v.a.r. X est un indicateur de "localisation" de sa loi : $E(X) \simeq$ "valeur moyenne de X ". Néanmoins, la connaissance de l'espérance mathématique donne peu de renseignements sur cette v.a.r. Ainsi, il faut étudier « l'étalement » de sa loi, c'est-à-dire la dispersion de la v.a.r. X autour de sa moyenne $E(X)$

Variance et écart-type

Définitions : Pour rendre positifs les écarts entre X et son espérance $E(X)$, un autre outil plus facile à manipuler que la valeur absolue, est à notre disposition : la mise au carré. On ne va donc pas calculer la moyenne des écarts mais la moyenne des écarts au carré. C'est ce qu'on appelle la variance (8).

- La variance de la v.a.r. X est la quantité :

$$\sigma^2 = Var(X) = \mathbb{E}(X - \mathbb{E}(X))^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - E(X))^2 \rho(x) dx \quad 1-5$$

Afin d'être en mesure de comparer, en termes d'ordre de grandeur, variance et espérance, il faut prendre la racine carrée de la variance. C'est ce qu'on appelle l'écart-type.

- La racine carrée de la variance, notée $\sigma(X) = \sqrt{Var(X)}$, est appelée écart type de X .

Propriétés :

- La propriété suivante peut être facilement démontrée :

$$\mathbf{Var(X) = \mathbb{E}(X^2) - (\mathbb{E}(X))^2} \quad 1-6$$

- $Var(aX + b) = a^2 Var(X)$ pour tout $a, b \in \mathbb{R}$. En particulier, $Var(X + b) = Var(X)$.

Remarque :

Si X est une v.a.r. telle que $\mathbb{E}(X) = \mu$ et $Var(X) = \sigma^2$, alors la variable $Y = (X - \mu)/\sigma$ est d'espérance nulle et de variance 1. On dit que Y est centrée (d'espérance nulle) et réduite (de variance 1).

1.3.1.3 Quelques lois de probabilité

Loi uniforme continue :

La variable aléatoire U est distribuée uniformément sur l'intervalle $[a, b]$ si sa densité de probabilité est constante sur cet intervalle (9) :

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

On dit que U suit la loi uniforme et on note $U \rightarrow U(a, b)$. Par conséquent, sa fonction de répartition est donnée par :

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{si } a \leq x \leq b \\ 1 & \text{si } x > b \end{cases}$$

Les principales caractéristiques numériques sont :

$$\text{Espérance (Moyenne)} : E(X) = (a + b)/2$$

$$\text{Variance} : \text{Var}(X) = \frac{1}{12}(a - b)^2$$

$$\text{Ecart type} : = (b-a)/\sqrt{12}$$

Loi normale (ou Gaussienne) :

Une variable aléatoire X à valeur dans R suit une loi normale de paramètres $\mu \in R$ et $\sigma > 0$, notée $N(\mu, \sigma)$, si X est une variable continue et admet pour densité de probabilité la fonction $\rho_{\mu, \sigma}$ suivante (7):

$$\rho_{\mu, \sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right]$$

Elle admet la fonction de répartition suivante :

$F_{\mu, \sigma}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^t \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] dx$	1-7
---	-----

Propriétés

1. Le graphe de $\rho_{\mu, \sigma}$ a l'allure d'une courbe en cloche symétrique par rapport à $x = \mu$, pointue pour σ petit, aplatie pour σ grand.
2. La fonction de densité d'une loi normale $N(\mu, \sigma)$ vérifie

$$\rho_{\mu,\sigma}(\mu + u) = \rho_{\mu,\sigma}(\mu - u) \quad 1-8$$

3. La fonction de répartition d'une loi normale $N(\mu, \sigma)$ vérifie

$$F_{\mu,\sigma}(\mu - x) = 1 - F_{\mu,\sigma}(\mu + x)$$

4. Soit X une variable aléatoire qui suit une loi normale $N(\mu, \sigma)$. Nous avons

$$E(X) = \mu \quad \text{et} \quad \text{Var}(X) = \sigma^2$$

Loi exponentielle :

Cette loi permet entre autres de modéliser la durée de vie de la radioactivité ou d'un composant électronique (9)

La fonction de répartition de la loi exponentielle est

$$f(x) \begin{cases} 1 - e^{-\lambda x} & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

et sa fonction de densité

$$\rho(x) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda x} & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases}$$

Caractéristiques : $E(x) = 1/\lambda$, $\text{Var}(X) = 1/\lambda^2$

1.3.1.4 Généralisation à n dimensions

Densité de probabilité $\rho(\vec{r})$

Nous avons vu quelques éléments de probabilité pour une seule variable x . Pour plusieurs variables, la généralisation est directe (4). Si $\vec{r} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ est un point de l'espace R^n , la densité de probabilité est $\rho(\vec{r})$ et l'élément de volume est $dv = dx_1 dx_2 \dots dx_n$. La probabilité que \vec{r} soit localisé dans un volume infinitésimal n-dimensionnel dv est :

$$dP = \rho(\vec{r})dv \quad 1-9$$

Avec $\rho(\vec{r})$ normalisée, c'est-à-dire :

$$\iiint \rho(\vec{r})dv = 1 \quad 1-10$$

Si les variables aléatoires x_α (composantes du vecteur aléatoire \vec{r} indépendantes les une des autres) alors la densité de probabilité $\rho(\vec{r})$ peut se factoriser sous la forme

$$\rho(\vec{r}) = \prod_{\alpha} g(x_{\alpha}) \quad 1-11$$

Où $g(x_{\alpha})$ est une fonction d'une seule variable x_{α} avec

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x_{\alpha})dx_{\alpha} = 1 \quad 1-12$$

On a alors

$$\iiint_{\Omega} \rho(\vec{r})dv = \prod_{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x_{\alpha})dx_{\alpha} = 1 \quad 1-13$$

Espérance et variance

A n dimensions l'espérance d'une fonction $f(\vec{r})$ est donnée par :

$$\mathbf{E}[f(\vec{r})] = \langle f(\vec{r}) \rangle = \iiint f(\vec{r})\rho(\vec{r})d\mathbf{v} \quad 1-14$$

et la variance par :

$$\text{Var}(\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}})) = \langle (\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}}) - \mathbf{E}(\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}})))^2 \rangle = \iiint (\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}}) - \mathbf{E}(\mathbf{f}(\vec{\mathbf{r}})))^2 \rho(\vec{\mathbf{r}}) d\mathbf{v} \quad 1-15$$

Loi des grands nombres

Soit $(X_n, n \geq 1)$ une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées (i.i.d), ayant une espérance μ et une variance σ^2 . Soit \bar{X} la valeur moyenne empirique (ou arithmétique) de X_n .

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$$

Alors la suite $(\bar{X}_n, n \geq 1)$ converge vers l'espérance mathématique $\mu = E(x)$ de la variable x . C'est-à-dire :

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \xrightarrow{n \rightarrow \infty} E(x)$$

1.3.2 Simulation Monte Carlo

1.3.2.1 Définition

De manière générale, la simulation permet d'étudier et expérimenter un système donné dont on connaît mal les interactions complexes, de calculer les effets de certains changements dans les interactions sur le comportement du système et d'expérimenter de nouvelles situations. Les techniques de simulation MC vont nous permettre d'approcher numériquement ces calculs. Lorsque dans la simulation intervient un élément aléatoire, on parle de simulation aléatoire (3).

Le principe de la simulation Monte Carlo

Le principe de base d'une simulation Monte Carlo est d'utiliser un nombre aléatoire dans une série d'équations probabilistes décrivant un système. Selon les paramètres constants de ces équations, on obtient une réponse variant selon la valeur de ce chiffre aléatoire. Cependant, en répétant l'opération un grand nombre de fois, les réponses convergent. La précision de cette solution augmente avec la quantité de nombres aléatoires utilisés dans ce processus (10).

L'utilisation des simulations Monte Carlo

L'utilisation des simulations Monte Carlo a débuté dans les années 1940 avec le début du développement des armes atomiques et la méthode a été appliquée aux phénomènes de transport des particules de radiation dans un milieu matériel. L'idée d'utiliser les simulations aléatoires est directement liée à la complexité des processus en question comme par exemple avec des interactions radiatives dans un milieu donné où l'utilisation d'expressions analytiques conventionnelles pour décrire ces interactions est limitée et nécessite souvent des approximations (10). Parmi les principales applications des méthodes MC en physique, du côté empirique il y a tout ce qui est interaction rayonnement-matière (problèmes de diffusion et de transfert) et du côté calcul théorique on peut citer le calcul d'intégrales multiples et la résolution d'équations différentielles en relation avec les problèmes à n-corps en mécanique quantique.

1.3.2.2 Nombres pseudo-aléatoire

Il n'existe pas d'algorithme mathématique qui permet de générer des nombres parfaitement aléatoires. On obtient uniquement des nombres qui se rapprochent de l'aléatoire dit nombres pseudo- aléatoire. Les nombres pseudo-aléatoire générés par ordinateur diffèrent des nombres aléatoire parfaits par le fait que lorsque le premier est arbitrairement choisi, toute la suite est complètement déterminée et reproductible. De ce fait, il est toujours nécessaire d'appliquer des tests de qualité et vérifier les programmes dans lesquels ils sont utilisés (3)

On montre dans la figure (I-1) sous la forme d'histogrammes deux exemples de génération de distribution aléatoire à l'aide du logiciel Maple, la première pour une distribution uniforme sur l'intervalle [0,1] et la deuxième pour une distribution gaussienne avec une variance $\sigma = 1$ sur l'intervalle [-3, 3], le nombre d'évènements générés est de 20000 évènements.

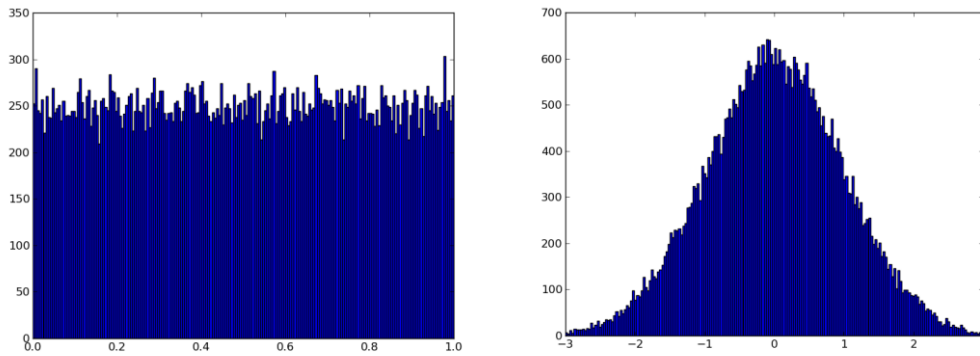


Figure I-1 : Histogramme d'une distribution uniforme (à gauche) et d'une distribution gaussienne (à droite) avec 20000 événements obtenue à l'aide de Maple.

1.3.3 Génération de nombres aléatoires

Nous avons vu que la méthode Monte Carlo est basée sur l'utilisation des nombres aléatoires, c'est-à-dire tirés au sort (3). L'outil de base de la génération de nombre aléatoires en général consiste en une séquence de nombres aléatoires indépendants et distribués selon une fonction de distribution. Plusieurs méthodes numériques sont utilisées pour générer ces nombres aléatoires.

1.3.3.1 Méthode de congruence

Une des formules les plus utilisées pour engendrer une suite de nombres pseudo-aléatoires à distribution uniforme est la méthode de congruence. Elle est basée sur la séquence itérative (3):

$$x_i = ax_{i-1} + c[\text{modulo } m]$$

Ceci signifie que le nombre x_i est égal au reste de la division par m de $a.x_{i-1} + c$, Où m, a , et c sont des constantes. La séquence de nombres générés par cette relation a une période égale à m sous certaines conditions vérifiées par les constantes. On a donc intérêt à ce que la période soit la plus longue possible. La plupart des calculateurs utilisent cet algorithme pour donner des séquences de nombres pseudo-aléatoires à distribution uniforme sur $[0,1]$

1.3.3.2 Méthode d'inversion

Elle est utilisée pour générer des distribution pour des densités non uniforme dont l'inverse de la fonction de répartition est connue. Soit F une fonction de répartition définie sur un intervalle $[a, b]$, de fonction inverse (3)

$$F^{-1} = \inf\{t: F(t) \geq u\} \text{ Pour tout } u \in]0,1[$$

Etant donné une variable aléatoire, notée U , qui suit la loi uniforme sur l'intervalle $[0,1]$ alors la variable aléatoire $X = F^{-1}(U)$ suit une distribution donnée par la fonction de répartition F

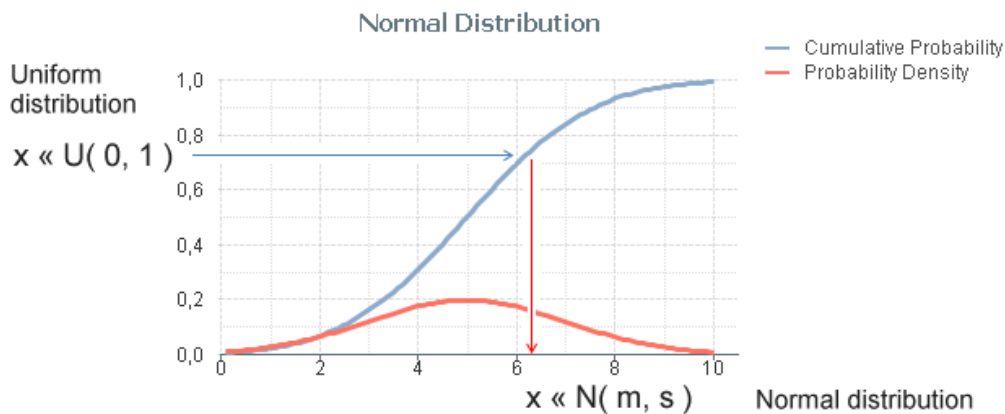


Figure 1-2 : Méthode d'inversion pour une distribution normale (fonction gaussienne)

Ainsi, à partir de nombres pseudo-aléatoires $u_1 \dots \dots u_n$ simulés suivant une loi uniforme sur l'intervalle $[0,1]$, nous obtenons, en posant $x_i = F^{-1}(u_i)$, des nombres pseudo-aléatoires $x_1 \dots x_n$ simulant les réalisations d'une variable aléatoire de fonction de répartition $F(x)$ (3).

1.3.3.3 Méthode de rejet

Lorsque l'on dispose d'une méthode pour simuler une variable aléatoire de fonction de densité $g(x)$, on peut à partir de là simuler une variable aléatoire continue d'une autre fonction de densité $f(x)$. La méthode consiste à simuler d'abord la variable y ayant la densité g puis on accepte cette valeur générée avec une probabilité proportionnelle à $\frac{f(y)}{g(y)}$.

Soit un constante $c \geq 1$ telle que : $\frac{f(y)}{g(y)} \leq c$ pour tout x

et soit $\alpha(x) = \frac{f(x)}{cg(x)} \in [0,1]$

Soit Y_1 une variable aléatoire de densité g et U_1 une variable aléatoire de loi uniforme indépendant de Y_1 . Si $U_1 \leq \alpha(Y_1)$, on pose $X = Y_1$. Si non, on rejette X_1 et on simule une autre variable aléatoire Y_2 de même densité g et on recommence (4).

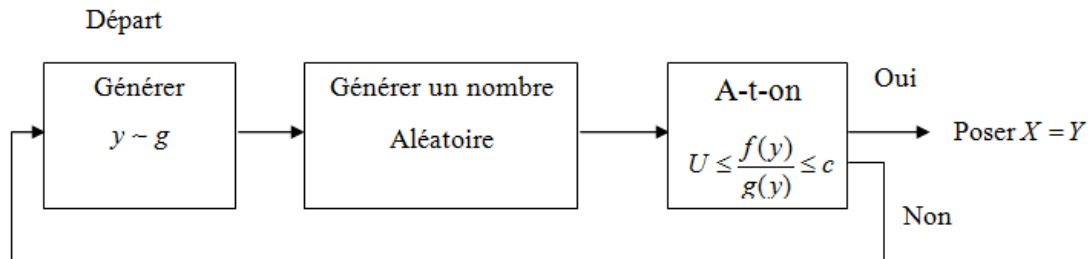


Figure 1-3 : L’algorithme de la méthode de rejet

1.4 Marches aléatoires

Plusieurs processus physiques tel que le mouvement Brownien, le transport des électrons à travers un solide ou par exemple les erreurs cumulées dans un ordinateur sont modélés comme des marches aléatoires. Il s’agit généralement de suivre en fonction du temps une chaîne d’événements $\{X_n\}$ dans laquelle l’état suivant est déterminé soit uniquement par son état présent soit par son historique proche ou loin (4).

1.4.1 Chaînes de Markov

Beaucoup de calculs de type Monte Carlo, notamment en mécanique quantique avec les méthodes Monte Carlo quantiques (QMC), sont basés sur des marches aléatoires dites chaînes de Markov. C’est une classe générale d’algorithmes pour la génération de nombres aléatoires (on parle aussi de vecteurs aléatoires) et d’échantillonnage à partir d’une distribution de probabilité donnée. Ces échantillons sont créés pour une densité de probabilité proportionnelle à une fonction connue. Pratiquement, une chaîne d’états dite de «marcheurs» est générée à partir d’un ensemble de points arbitrairement choisis et suffisamment éloignés les uns des autres et se déplacent au hasard selon un algorithme qui recherche des endroits avec une contribution

raisonnablement proportionnelle à la fonction de distribution pour générer les éléments suivants de la chaîne, leur attribuant ainsi des probabilités plus élevées.

Une chaîne de Markov doit posséder la propriété de Markov suivante : l'information utile pour la prédiction de l'état futur de la chaîne est entièrement contenue dans l'état présent du processus et n'est pas dépendante des états antérieurs.

Ainsi une chaîne d'événements $(X_n, n \geq 0)$ est une chaîne de Markov si la loi de l'état X_{n+1} ne dépend des valeurs passées (X_0, \dots, X_n) que par l'intermédiaire de X_n et n'a pas de relations « directes » avec les états antérieurs à X_n .

Si E un espace probabiliste et $Q = (Q(x, y); x, y \in E)$ une matrice de transition sur E . Une suite $(X_n, n \geq 0)$ de variables aléatoires est appelée chaîne de Markov de matrice de transition Q si, pour tout x_1, x_2, \dots, x_n (4):

$$P(X_{n+1} = x / X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = P(X_{n+1} = x / X_n = x_n) = Q(x_n, x) \quad 1-16$$

1.4.2 Algorithme de Metropolis-Hastings (MH)

L'algorithme de Metropolis-Hastings est une méthode de Monte Carlo par chaîne de Markov qui permet d'obtenir une séquence d'échantillons aléatoires à partir d'une distribution de probabilité donnée π pour laquelle l'échantillonnage direct est difficile à obtenir à condition que l'on connaisse une fonction f proportionnelle à π . Cette séquence peut être utilisée pour approximer la distribution (par exemple pour générer un histogramme) ou pour calculer une intégrale sur cette variable (sous la forme d'une espérance mathématique). L'algorithme est généralement utilisé pour l'échantillonnage à partir de distributions multidimensionnelles, en particulier lorsque le nombre de dimensions est élevé. Le principe de l'algorithme est le suivant (4).

L'algorithme MH fonctionne en générant une séquence de valeurs d'échantillons de telle sorte que, à mesure que de plus en plus de valeurs sont produites, la distribution des valeurs se rapproche de la distribution souhaitée π . Ces valeurs sont produites de manière itérative avec la condition que la valeur suivante ne dépende que de la valeur actuelle de l'échantillon (chaîne de Markov). Plus précisément, à chaque itération, l'algorithme sélectionne un candidat pour la valeur d'échantillon suivante en fonction de la valeur actuelle. Ensuite, avec une certaine probabilité, le candidat est soit accepté (auquel cas la valeur est utilisée dans l'itération suivante),

soit rejeté (auquel cas la valeur candidate est rejetée et la valeur actuelle est réutilisée dans l'itération suivante). La probabilité d'acceptation est déterminée en comparant la fonction f pour la valeur actuelle à la distribution souhaitée π .

Algorithme MH: Soit E un espace probabiliste et π une probabilité donnée sur E que l'on cherche à échantillonner. soit une matrice de transition sur E de densité de probabilité Q appelée aussi probabilité de proposition. Fixons $X_0 = x_0$ où x_0 est tel que $\pi(x_0) > 0$, puis construisons $(X_n, n \geq 1)$ de manière itérative comme suit .

Supposons que $X_n = x_n$. on simule deux variables aléatoires indépendantes (et indépendantes des simulations passées) Y_n et U_n , avec :

Y_n suit la loi Q_n , (pour tout y , $P(X_n = y) = Q(x_0, y)$).

U_n suit une loi uniforme sur $[0, 1]$.

On définit la probabilité d'acceptante :

$$\alpha(x, y) = \min \left(1, \frac{\pi(y) \cdot Q(y, x)}{\pi(x) \cdot Q(x, y)} \right)$$

et on calcul X_{n+1} de la façon suivante :

Si $U_n < \alpha(X_n, Y_n)$ alors on accepte la valeur et on pose : $X_{n+1} = Y_n$

Si $U_n \geq \alpha(X_n, Y_n)$ alors on rejette la valeur et on pose : $X_{n+1} = X_n$

La connaissance de la loi π n'est pas nécessaire si on connaît une fonction proportionnelle $f \sim \pi$. Le coefficient de proportionnalité va ainsi se simplifier dans la formule de $\alpha(x, y)$. En plus si la distribution Q est symétrique $Q(x, y) = Q(y, x)$ on obtient alors l'algorithme original de Metropolis :

$$\alpha(x, y) = \min \left(1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)} \right)$$

2 Chapitre II : Méthode Monte Carlo et équations intégrales

2.1 Introduction

L'une des applications les plus connues des méthodes Monte Carlo est le calcul numérique des intégrales. Par exemple, comme on le verra au chapitre 3, en physique quantique des systèmes à n -corps et en physique statistique, la résolution de l'équation différentielle de Schrödinger peut se faire en la transformant d'abord en une équation intégrale à l'aide notamment de fonctions de Green puis en appliquant les techniques d'intégration Monte Carlo.

Dans ce chapitre, nous présentons l'application des méthodes de Monte à l'estimation numérique d'intégrales multidimensionnelles ainsi qu'à la résolution d'équations intégrales. Dans un premier temps on va présenter deux méthodes d'intégration directe de Monte Carlo et leurs généralisations à n dimensions. Par la suite, nous étudions l'utilisation de la méthode dans la résolution des équations différentielles transformées en équations intégrales. Nous nous intéressons au cas particulier d'équations différentielles linéaires du 2^{ème} degré en réalisant le calcul sur un exemple concret de la mécanique classique.

2.2 Méthode d'intégration de Monte Carlo

2.2.1 Description de la méthode

L'utilisation d'une méthode de Monte-Carlo pour le calcul d'une intégrale de la forme

$$I = \int_a^b f(x)dx \tag{2-1}$$

nécessite la mise sous forme d'une espérance mathématique la quantité que l'on cherche à calculer. En effet comme on a vu au chapitre I, l'espérance d'une fonction $f(x)$ de la variable aléatoire X est donnée par (4) :

$$E[f(x)] = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \quad 2-2$$

la variable aléatoire X étant distribuée selon la densité de probabilité $\rho(x)$. Pour pouvoir calculer $E[f(x)]$ il convient de savoir simuler une variable aléatoire X selon la loi $\rho(x)$. On dispose alors d'une suite (x_i) (un échantillon) de N réalisations de la variable aléatoire X . Or selon la loi des grands nombres un estimateur qui approxime $E[f(x)]$ est donnée par la moyenne arithmétique (ou empirique) de $Y = f(x)$ sur les N réalisations x_1, \dots, x_n .

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx = E[f(x)] \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \bar{Y} \quad 2-3$$

Ainsi un choix adéquat de $\rho(x)$ permet d'estimer l'intégrale.

2.2.1.1 Intégration avec échantillonnage uniforme

Soit X une variable aléatoire distribuée selon une densité de probabilité uniforme $\rho(x)$ sur l'intervalle $[a, b]$ (4):

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{Sinon} \end{cases} \quad 2-4$$

avec :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x)dx = 1$$

Dans ce cas l'intégrale (2-3) se réécrit :

$$E[f(x)] = \int_a^b \frac{1}{b-a} f(x) dx \Rightarrow \int_a^b f(x) dx = (b-a)E[f(x)] \quad 2-5$$

Et donc :

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx \simeq \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad 2-6$$

2.2.1.2 Intégration avec échantillonnage préférentiel

$$I = I_1 = \int_a^b f(x) dx$$

Soit $\rho(x) = g(x)$ une densité de probabilité normalisée avec $g(x)$ une fonction qui ressemble à $f(x)$ (possède une forme similaire), de telle sorte que le rapport $y = \frac{f(x)}{g(x)}$ reste sensiblement constant (varie peu) : $\frac{f(x)}{g(x)} \simeq cte$ sur $[a, b]$.

g doit être normalisée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x) dx = 1$$

En multipliant et en divisant par $g(x)$ dans l'intégrale I_1 on obtient la nouvelle forme suivante :

$$I_1 = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} \rho(x) dx = E \left[\frac{f(X)}{g(X)} \right] \quad 2-7$$

L'estimateur de l'intégral I_1 devient :

$$I_1 = \int_a^b \mathbf{f}(\mathbf{x}) \mathbf{d}\mathbf{x} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x}_i)}{\mathbf{g}(\mathbf{x}_i)} = \bar{\mathbf{y}}, \mathbf{y}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{f}(\mathbf{x})}{\mathbf{g}(\mathbf{x})} \quad 2-8$$

Où (x_1, x_2, \dots, x_n) est un échantillon indépendantes et identiquement distribué (i.i.d) selon la nouvelle densité $\rho(x) = g(x)$. La variance de I_1 est alors :

$$Var(I_1) \approx Var\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{g(x_i)}\right) = \left(\frac{1}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^N Var\left(\frac{f(x_i)}{g(x_i)}\right) = \left(\frac{1}{N}\right)^2 N Var\left(\frac{f(x)}{g(x)}\right)$$

$$Var(I_1) = \frac{1}{N} Var(y) \quad 2-9$$

Et son estimateur :

$$Var(I_1) \approx \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2, \quad y_i = \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \quad 2-10$$

Ainsi que son écart type :

$$\sigma(I_1) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma(y) \quad 2-11$$

2.2.2 Généralisation aux intégrales multidimensionnelles

La généralisation de la méthode MC aux intégrales n-dimensionnelles de la forme :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) dv \quad 2-12$$

peut se faire sans difficulté.

2.2.2.1 Cas d'un échantillonnage uniforme

Soit l'intégrale multidimensionnelle suivante :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) dv \quad 2-13$$

Avec : $f(\vec{r}) = f(x_1, \dots, x_n)$ et $dv = dx_1 \dots dx_n$.

Si on choisit un domaine cubique $D = ([a, b], \dots, [a, b]) \in \mathbb{R}^n$ de volume $V = (b - a)^n$. On définit alors la fonction de densité de probabilité uniforme $\rho(\vec{r})$ dans \mathbb{R}^n par :

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{(b-a)^n} & , \text{Si } : a \leq x \leq b \\ 0 & , \text{Sinon} \end{cases} \quad 2-14$$

Sachant que $\rho(\vec{r})$ est normalisée :

$$\iiint_{\mathbb{R}^n} \rho(\vec{r}) dv = \int_a^b \dots \int_a^b \rho(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = 1$$

On peut réécrire l'intégrale I_n sous la forme :

$$I_n = (b - a)^n \iiint_D f(\vec{r})\rho(\vec{r})dv = (b - a)^n E[f(\vec{r})] \quad 2-15$$

Selon la loi des grands nombres, on peut estimer l'espérance de $f(\vec{r})$ par la moyenne arithmétique, donc :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r})dv \approx \frac{(b - a)^n}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{r}_i) \quad 2-16$$

2.2.2.2 Cas d'un échantillonnage préférentiel

Nous pouvons généraliser cette technique à n dimensions de façon assez naturelle. Soit l'intégrale multidimensionnelle (2-14) :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r})dv$$

Soit $\rho(\vec{r}) = g(\vec{r})$ une densité de probabilité normalisé avec $g(\vec{r})$ ressemble à $f(\vec{r})$ sur $D = ([a, b], \dots, [a, b])$ (i.e. $f/g \simeq cte$).

avec :

$$\iiint_D g(\vec{r})dv = 1$$

Si on insère $\rho(\vec{r})$ dans l'intégrale I_n on obtient :

$$I_n = \iiint_D \frac{f(\vec{r})}{g(\vec{r})}\rho(\vec{r})dv = E\left[\frac{f(\vec{r})}{g(\vec{r})}\right] \quad 2-17$$

Alors l'estimateur de l'intégral I_n par la méthode Monte-Carlo est :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) d\mathbf{v} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(\vec{r}_i)}{g(\vec{r}_i)} = \bar{y} \quad 2-18$$

Où $(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$ est un échantillon i.i.d. selon la densité $g(\vec{r})$. La variance de I_n se calcul de la même façon:

$$\text{Var}(I_n) = \frac{1}{N} \text{Var}(y) \quad 2-19$$

Ainsi que son estimateur :

$$\text{Var}(I_n) \approx \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \quad 2-20$$

2.2.3 Convergence de la méthode Monte Carlo

Pour étudier la convergence de la méthode Monte Carlo, il faut évaluer l'erreur qui est définie par :

$$\varepsilon_N = E(Y) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i = E(Y) - \bar{Y} \quad 2-21$$

Avec $Y = f(x)$ et $E(Y) = \mu = \int_a^b f(x)\rho(x) dx$ l'espérance de $f(x)$ d'écart type $\sigma = \sqrt{E(Y^2) - E^2(Y)}$.

Soit $y_1 = f(x_1), y_2 = f(x_2), \dots, y_n = f(x_n)$ une suite de variables aléatoires réelles tel que x_1, x_2, \dots, x_n est un i.i.d selon $\rho(x)$.

Alors, la convergence de l'erreur ε est assurée par la loi des grands nombres qui stipule que la moyenne arithmétique :

$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i \quad 2-22$$

Cette lois Converge « en probabilité » vers la moyenne stochastique (ou l'espérance mathématique) $\mu = E(Y) = E[f(x)]$ lorsque $N \rightarrow +\infty$. C'est-à-dire, quel que soit le nombre positif ϵ donnée :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(|\varepsilon_N| > \epsilon) = 0 \quad 2-23$$

P étant la probabilité.

2.3 Monte Carlo et équations intégrales

2.3.1 Transformation d'une équation différentielle en une équation intégrale

Pour illustrer l'utilisation de la méthode MC dans la résolution d'équations intégrales, considérons un problème physique représenté par une équation différentielle. Dans notre cas on va traiter l'exemple d'une équation différentielle ordinaire (ODE) linéaire du second ordre de la forme (11) :

$$y'' + A(x)y' + B(x)y = g(x) \quad 2-24$$

avec des conditions initiales

$$y(a) = y_0 \quad y'(a) = y'_0$$

Voyons comment cette équation différentielle peut être transformée en une équation intégrale.

En effet, partant de notre ODE (2-24) et en Intégrant entre a et x :

$$y'(x) = - \int_a^x A(t)y'(t)dt - \int_a^x B(t)y(t)dt + \int_a^x g(t)dt + y'_0$$

Puis en intégrant la première intégrale de droite par parties, on obtient

$$y'(x) = -A(x)y(x) - \int_a^x [B(x) - A'(t)]y(t)dt + \int_a^x g(t)dt + A(a)y_0 + y'_0$$

En intégrant une seconde fois, on obtient

$$\begin{aligned} y(x) &= \int_a^x A(t)y(t)dt - \int_a^x du \int_a^u [B(t) - A'(t)]y(t)dt \\ &+ \int_a^x du \int_a^x g(t)dt + [A(a)y_0 + y'_0](x - a) + y_0 \end{aligned} \quad 2-25$$

Pour transformer cette équation en une forme plus claire, nous utilisons la relation suivante :

$$\int_a^x du \int_a^u f(t)dt = \int_a^x f(t)dt \int_t^x du = \int_a^x (x - t)f(t)dt \quad 2-26$$

En appliquant ce résultat à l'équation (2-25), on obtient

$$\begin{aligned} y(x) &= - \int_a^x (A(t) + (x - t)[B(t) - A'(t)])y(t)dt \\ &+ \int_a^x (x - t)g(t)dt + [A(a)y_0 + y'_0](x - a) + y_0 \end{aligned} \quad 2-27$$

Si nous introduisons maintenant les abréviations :

$$K(x, t) = (t - x)[B(t) - A'(t)] - A(t)$$

$$f(x) = \int_a^x (x-t)g(t)dt + [A(a)y_0 + y_0'](x-a) + y_0$$

L'équation (2.27) devient :

$y(x) = f(x) + \int_a^x K(x,t)y(t)dt$	2-28
---------------------------------------	------

Cette équation est appelée équation de Volterra de seconde espèce. Notons qu'elle est équivalente l'équation différentielle (2-24) et inclut implicitement les conditions initiales de l'équation différentielle originale. On constate que la fonction $K(x, t)$ joue un rôle similaire à la fonction de Green d'une équation différentielle. Celle-ci apparait comme le noyau de l'équation intégrale équivalente.

2.3.2 Application à l'oscillateur harmonique classique

Considérons l'oscillateur harmonique classique à une dimension obéissant à l'équation différentielle :

$$y'' + \omega^2 y = 0 \tag{2-29}$$

Trouvons une équation intégrale équivalente à cette équation avec les conditions aux limites suivantes :

$$y(0) = 0, \quad y'(0) = 1$$

En utilisant la méthode précédente et par comparaison avec (2-24) , on a dans ce cas :

$$A(x) = 0, \quad B(x) = \omega^2, \quad g(x) = 0.$$

En substituant dans l'Eq. (2-27), nous trouvons que l'équation intégrale correspondant à l'oscillateur harmonique avec les conditions initiales ci-dessus devient :

$$y(x) = x + \omega^2 \int_0^x (t-x)y(t)dt$$

2-30

Cette équation intégrale (2.30) est équivalente à l'équation différentielle originale avec les conditions initiales.

Par la suite, on va résoudre numériquement cette équation intégrale en utilisant l'intégration MC et on va comparer le résultat avec la solution exacte de l'équation différentielle (2-29). Cette solution exacte est connue et donnée par :

$$y(x) = \left(\frac{1}{\omega}\right) \sin \omega x$$

Dans nos calculs on va considérer $\omega = 1$. La solution exacte est alors

$$y(x) = \sin x$$

Pour notre calcul Monte Carlo, la fonction $y(x)$ va être traitée comme une densité de probabilité. Connaissant les conditions initiales sur la fonction $y(x)$ et sa dérivée, cette densité va être approximée dans un premier temps par un développement de Taylor d'ordre 1 et normalisé sur l'intervalle $[0, x]$.

Dans un 2^{ème} calcul on utilisera un développement de Taylor d'ordre 3 et pour finir on verra le cas d'une approximation de la densité de probabilité par un fit polynomiale de degré 5.

Pour ces trois cas, l'intégration MC a été réalisée à l'aide d'une programme Maple avec des échantillons de $N = 10^2$, $N = 10^3$ et $N = 10^5$ points d'intégration.

2.3.2.1 Approximation de Taylor d'ordre 1

Après normalisation de la densité $\rho(t)$ sur $[0, x]$ on obtient :

$$y(x) = x + \frac{x^2}{2} \int_0^x (t-x)\rho(t)dt$$

Avec :

$$\rho(t) = y(t) \simeq \frac{2}{x^2} t$$

Dans ce cas l'intégrale va être approximée par la moyenne numérique et on obtient :

$$y(x) \simeq x + \frac{x^2}{2} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (t_i - x)$$

Les t_i étant générés aléatoirement dans l'intervalle $[0, x]$ selon la distribution $\rho(t)$. Après calcul à l'aide de Maple on obtient les trois figures suivantes :

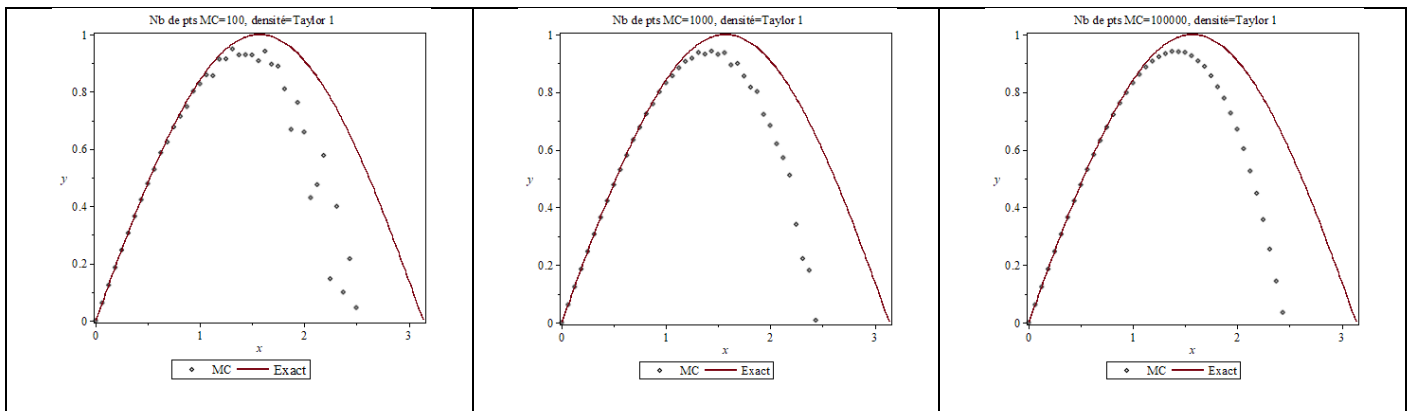


Figure 2-1 : Calcul MC de la solution de l'EDO (2-30) pour trois échantillons avec une densité approximée par un développement de Taylor de degré 1. La courbe en continue représente la solution exacte de l'EDO de l'oscillateur harmonique.

2.3.2.2 Approximation de Taylor d'ordre 3

Pour améliorer la précision du calcul, nous avons essayé une densité de probabilité donnée par le développement de Taylor d'ordre 3. Après normalisation de la densité sur $[0, x]$ on obtient alors :

$$y(x) = x + \left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{24} \right)^{-1} \int_0^x (t - x) \rho(t) dt$$

Avec :

$$\rho(t) = y(t) \simeq \left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{24} \right)^{-1} \left(t - \frac{t^3}{6} \right)$$

Dans ce cas aussi l'intégrale va être approximée par la moyenne empirique et on obtient :

$$y(x) \simeq x + \left(\frac{x^2}{2} - \frac{x^4}{24} \right)^{-1} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (t_i - x)$$

Après calcul à l'aide de Maple on obtient les trois figures suivantes :

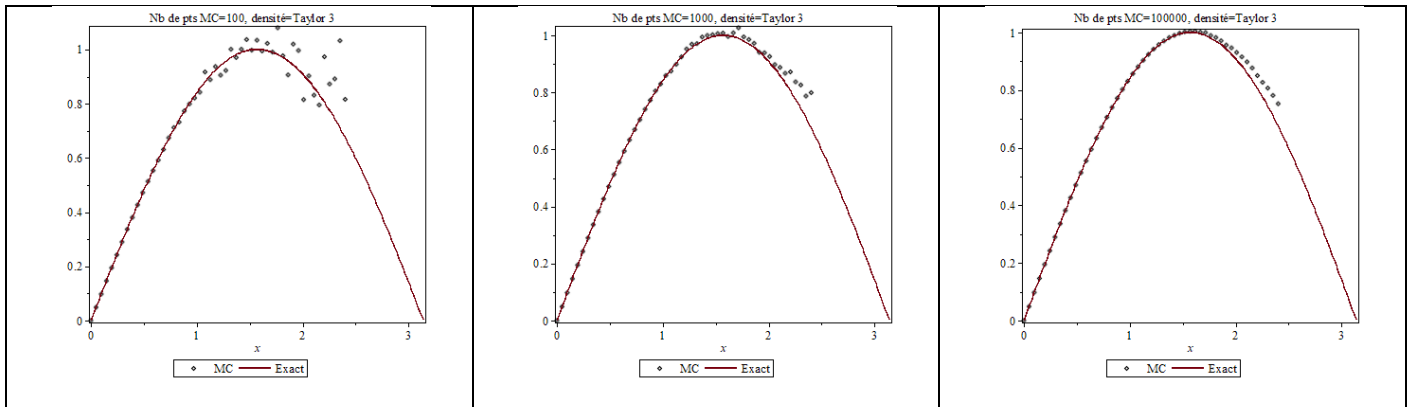


Figure 2-2 : Calcul MC de la solution de l'EDO (2-30) pour trois échantillons avec une densité approximée par un développement de Taylor d'ordre 3. La courbe en continue représente la solution exacte de l'EDO de l'oscillateur harmonique.

2.3.2.3 Régression polynomiale de degré 5

Pour améliorer encore plus le calcul, on utilise comme densité de probabilité pour ce 3^{ème} cas un fit polynomial (régression par les moindres carrés) de degré 5. Ce fit est mis à jours à chaque itération. Ainsi, à l'itération m , le polynôme est réajusté sur les points des itérations précédents (1,2, ... $m - 1$). On obtient ainsi les figures suivantes

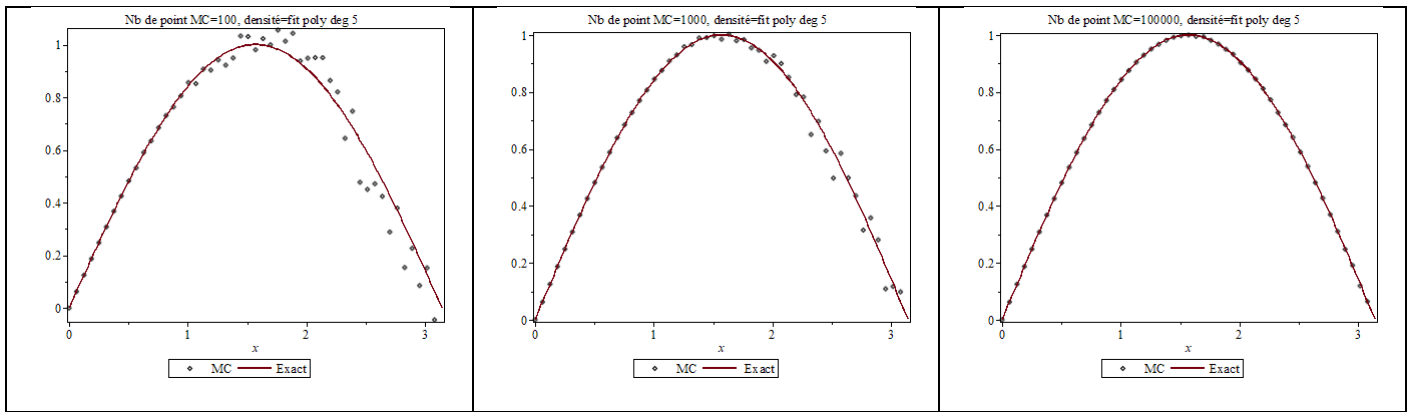


Figure 2-3 : Calcul MC de la solution de l'EDO (2-30) pour trois échantillons avec une densité approximée par un fit polynomial de degré 5. La courbe en continue représente la solution exacte de l'EDO de l'oscillateur harmonique.

Discussion des résultats :

Comme on peut le remarquer sur les trois figures ci-dessus et pour les trois types de densité $\rho(t)$ l'augmentation du nombre de point d'intégration N permet d'améliorer l'approximation de la solution de l'équation différentielle.

On remarque aussi que si l'on compare maintenant les trois cas d'approximation de la densité, on voit bien que le troisième cas avec un fit polynomial de degré 5 présente un meilleur choix pour la densité que les deux cas d'un polynôme de Taylor de degré 1 ou 3 pour lesquelles les valeurs calculés commencent à s'éloigner de la solution exacte à partir de $x \sim 1$ alors que pour le cas du fit l'approximation reste de bonne qualité dans toute l'intervalle $[0, \pi]$. Ce constat est facilement expliqué par le fait qu'un développement de Taylor de petit ordre ne permet d'approximer la fonction qu'autour du voisinage du point en considération alors qu'un fit permet de le faire sur toute une région.

Avantage des méthodes MC :

Il faut noter que la résolution numérique des équations intégrales ainsi que le calcul d'intégrales peut tout aussi se faire par les méthodes d'intégration classiques (dites déterministes, tel que les méthodes de Newton-Cotes ou de Gauss). L'avantage des méthodes de Monte Carlo ne se fait apprécier que pour des dimensions grandes pour lesquels un partitionnement du domaine d'intégration implique, pour les méthodes déterministes, une augmentation exponentielle du nombre de points d'intégration et du temps de calcul.

En effet, et pour avoir une idée de l'importance de ce phénomène (appelé parfois malédiction de la dimensionnalité) pour des intégrales à haute dimension, on montre dans les figures ci-dessous les graphes représentant le nombre de point d'intégration N en fonction de la dimension de l'intégrale n pour les trois méthodes classiques de Newton-Cotes (Rectangles, Trapèzes et Simpson) avec une subdivision d'intervalle de $m=10$.

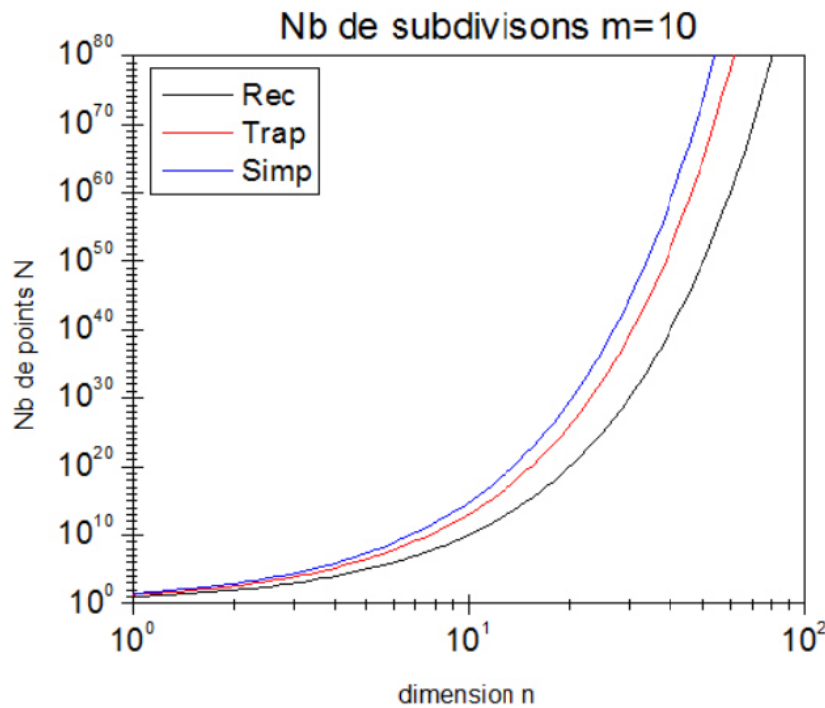


Figure 2-4 : Variations exponentielle du nombre de points d'intégration en fonction de la dimension (n) pour les trois méthodes de Newton-Cotes et pour un nombre de subdivisions $m=10$ (4).

On voit bien qu'à partir des dimensions $n \sim 30$ (nombre de degrés de liberté spatiales pour une dizaine de particules par exemple) le nombre de points d'intégration atteint les $N \sim 10^{30}$ ce qui nécessite un temps de calcul très long.

Ce qui est remarquable c'est que ce phénomène de la malédiction de la dimensionnalité ne se produit pas avec les méthodes de MC qui ne nécessitent pas de partitionnement particulier mais juste un échantillonnage sur le domaine d'intégration dont la taille N peut être contrôlée évitant ainsi des temps de calculs exorbitants. Même si la convergence des méthodes MC est relativement lente, la qualité de l'approximation peut être par ailleurs améliorée en utilisant un certain nombre de techniques tel que l'échantillonnage préférentiel.

3 Chapitre III : Méthode Monte Carlo quantique par diffusion

3.1 Introduction

Il existe plusieurs variétés de méthodes Monte Carlo dites quantiques (4) où les calculs de simulation de problèmes physiques (notamment les problèmes à n -corps) se basent sur un schéma d'intégration de Monte Carlo plus ou moins différent. Dans notre travail, on s'est focalisé sur la méthode Monte Carlo quantique par diffusion (QDMC). Celle-ci a été largement utilisée dans l'étude des systèmes à n -corps que soit pour des systèmes de bosons ou de fermions. Par exemple, pour utiliser la méthode dans l'approximation dite à nœud fixe pour les systèmes à fermions, le développement de très bonnes fonctions d'onde d'essai est nécessaire. Un exemple de système de fermions est le gaz d'électrons homogène (12). Les résultats pour le gaz d'électrons sont importants pour deux raisons ; ce sont les premières données très fiables pour l'équation d'état d'un système à plusieurs électrons, et elles forment la base d'une méthode d'approximation concurrente et très largement utilisée, la "théorie de la fonctionnelle de la densité" (DFT).

Parmi d'autres applications de QDMC et qui ont fait leurs preuves assez tôt on peut citer le calcul des énergies des molécules di-atomiques des éléments légers (allant du Li_2 au F_2) (13). Pour apprécier la nature de ces calculs, il faut comprendre que les différences d'énergie qui sont importantes pour la chimie sont de l'ordre de 10^{-5} de l'énergie totale du système. Atteindre cette précision dans un calcul Monte Carlo est la preuve d'une méthodologie sophistiquée. Le deuxième point est que la précision est très élevée, comparable aux méthodes « traditionnelles » (basées sur de très grands ensembles de base) ou même meilleure dans certains cas lorsque l'usage d'une fonction d'onde d'essai de qualité et bien optimisée est possible.

Comme on va le voir, l'approche QDMC en mécanique quantique permet de calcul l'état fondamental d'un système et implique l'échantillonnage d'une fonction de Green approximative (5). En partant de l'équation de Schrödinger dépendant du temps, l'usage d'un temps « imaginaire » permet d'aboutir à une équation de diffusion dont la forme intégrale est traitée par intégration Monte Carlo à l'aide de marches aléatoires.

3.2 Equation de Schrödinger sous forme intégrale

Considérons une particule décrite par la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ obéissant à l'équation de Schrödinger dépendante du temps :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle \quad 3-1$$

Cette équation donne l'évolution dans le temps de la fonction d'onde $\psi(\vec{r}, t)$ en utilisant un point de vue différentiel. Il est possible d'adopter un point de vue intégral équivalent mais plus global et qui permette de déterminer directement la valeur $\psi(\vec{r}_2, t_2)$ prise par la fonction d'onde en un point \vec{r}_2 et à un instant t_2 donnés, à partir de la connaissance de toute la fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, t_1)$ à un instant t_1 antérieur.

Comme on le sait, pour les systèmes conservatifs (où le potentiel V ne dépend pas explicitement du temps) l'opérateur d'évolution :

$$U(t_1, t_2) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_2-t_1)} \quad 3-2$$

Permet de relier l'état du système $|\psi(t_2)\rangle$ à l'instant t_2 à son état $|\psi(t_1)\rangle$ à un instant antérieur t_1 .

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_1, t_2)|\psi(t_1)\rangle \quad 3-3$$

3.2.1 Propagateur (fonction de Green) de l'équation de Schrödinger

Sachant qu'en représentation position $|\vec{r}\rangle$ la fonction d'onde est donnée par :

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle$$

On a

$$\psi(\vec{r}_2, t_2) = \langle \vec{r}_2 | \psi(t_2) \rangle = \langle \vec{r}_2 | U(t_1, t_2) | \psi(t_1) \rangle$$

En introduisant la relation de fermeture

$$\int |\vec{r}_1\rangle \langle \vec{r}_1| dv_1 = 1$$

On obtient :

$$\psi(\vec{r}_2, t_2) = \int \langle \vec{r}_2 | U(t_2, t_1) | \vec{r}_1 \rangle \langle \vec{r}_1 | \psi(t_1) \rangle dv_1 = \int \langle \vec{r}_2 | U(t_2, t_1) | \vec{r}_1 \rangle \psi(\vec{r}_1, t_1) dv_1$$

C'est-à-dire :

$$\psi(\vec{r}_2, t_2) = \int G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t_2, t_1) \psi(\vec{r}_1, t_1) d\nu_1 \quad 3-4$$

Avec :

$$G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t_2, t_1) = \langle \vec{r}_2 | U(t_2, t_1) | \vec{r}_1 \rangle \quad 3-5$$

L'équation (3.4) représente l'équivalent de l'équation de Schrödinger (3-1) mais sous forme intégrale. La fonction $G(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t_2, t_1)$ qui s'exprime en fonction de l'opérateur d'évolution est appelée propagateur (ou fonction de Green) de l'équation de Schrödinger (14). C'est cette équation intégrale que l'on va résoudre numériquement en utilisant l'intégration Monte Carlo.

3.3 Formalisme de la méthode Monte Carlo quantique par diffusion (QDMC)

Dans le but de calculer l'énergie et la fonction d'onde de l'état fondamental d'un système quantique, l'idée de base de la méthode QDMC est d'éliminer le nombre imaginaire i de l'équation de Schrödinger pour la transformer en une équation de diffusion par un changement de variable temporelle adéquat (temps imaginaire) puis à l'aide de la forme intégrale de l'équation, appliquer les méthodes d'intégration MC à l'aide d'une fonction de Green approximative.

Considérons donc l'équation de Schrödinger dépendante du temps (3-1). En effectuant le changement de variable : $t \rightarrow \tau = it$ (la motivation de ce changement apparaîtra plus loin) et en décalant l'origine des énergies d'une quantité positive $E_T : E_n \rightarrow E_n - E_T$ (qui n'affecte pas les propriétés du système) on obtient une équation différentielle de type diffusion (15) :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi &\rightarrow i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, \tau)}{-i\partial \tau} = (H - E_T)\psi(\vec{r}, \tau) \\ \rightarrow \frac{\partial \psi(\vec{r}, \tau)}{\partial \tau} &= -D(H - E_T)\psi(\vec{r}, \tau) \end{aligned} \quad 3-6$$

Cette équation est une équation de diffusion avec une constante de diffusion : $D = \frac{1}{\hbar}$

3.3.1 Approximation de l'état fondamental

Utilisons la base des fonctions propre φ_n de l'hamiltonien $H : H\varphi_n = E_n\varphi_n$

Soit $c_n(t)$ les composantes de l'état $|\psi(t)\rangle$ sur la base $|\varphi_n\rangle$

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\varphi_n\rangle$$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |\varphi_n\rangle$$

La relation de fermeture de cette base appliquée à l'équation d'évolution de l'état du système entre l'instant 0 et t

$$|\psi(t)\rangle = U(t, 0) |\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} H t} |\psi(0)\rangle$$

permet d'écrire :

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = \int \langle \vec{r} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | \psi(0) \rangle d\nu = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \varphi_n(\vec{r})$$

En termes des nouvelles variables $it \rightarrow \tau$, $E_n \rightarrow E_n - E_T$ et on obtient :

$$\psi(\vec{r}, \tau) = \sum_n c_n(0) e^{-\frac{\tau}{\hbar} (E_n - E_T)} \varphi_n(\vec{r})$$

Si $E_T < E_0 < E_1 < E_2 < \dots$ l'exposant dans l'exponentielle est négatif et le terme dominant de la somme est le premier terme de l'état fondamental ($n=0$), tout les autres termes vont décroître plus rapidement et peuvent être négligés. On obtient ainsi l'approximation :

$$\Psi(\vec{r}, \tau) \simeq \mathbf{c}_n(0) e^{-\frac{\tau}{\hbar} (E_0 - E_T)} \varphi_0(\vec{r}) = \mathbf{Cte} \varphi_0(\vec{r})$$

3-7

L'état fondamental du système peut donc être approximé par l'état évolué à l'instant τ . C'est la motivation principale de l'élimination du nombre complexe dans l'exponentielle permettant de négliger les termes des états excités.

3.3.2 Intégration Monte Carlo

Connaitre la fonction de Green pour un système quantique donné n'est pas une tâche évidente. Néanmoins, l'utilisation d'une approximation connue sous le nom de formule de Trotter permet de simplifier la tâche.

Si le système évolue à partir de l'instant t pendant une durée δt , la forme intégrale de l'équation de Schrödinger et sa fonction de Green permet d'écrire :

$$\psi(\vec{r}, t + \delta t) = \int G(\vec{r}, \vec{r}', \delta t) \psi(\vec{r}', t) dv' \quad 3-8$$

Avec : $G(\vec{r}, \vec{r}', \delta t) = \langle \vec{r} | U(t + \delta t, t) | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | e^{-\frac{i}{\hbar} H \delta t} | \vec{r}' \rangle$

Si maintenant on raisonne en termes de temps imaginaire $i\delta t = \delta\tau$ et avec le déplacement en énergie introduit plus haut on obtient :

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) = \langle \vec{r} | e^{-D\delta\tau(H-E_T)} | \vec{r}' \rangle$$

Sachant que $H = \frac{p^2}{2m} + V$, on obtient l'expression :

$\mathbf{G(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) = \langle \vec{r} e^{-D\delta\tau\left(\frac{p^2}{2m} + (V-E_T)}\right) \vec{r}' \rangle}$	3-9
--	-----

C'est la fonction de Green pour l'équation de diffusion.

Pour simplifier cette expression de la fonction de Green $G(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau)$, utilisons la formule de Trotter (12) qui stipule que pour 2 opérateurs quelconques A, B et un paramètre réel et petit α on a :

$\mathbf{e^{\alpha(A+B)} \simeq e^{\frac{\alpha}{2}B} e^{\alpha A} e^{\frac{\alpha}{2}B}}$	3-10
--	------

Ce qui donne pour : $\alpha = -D\delta\tau$, $A = \frac{p^2}{2m}$ et $B = V - E_T$

$$e^{-D\delta\tau\left(\frac{p^2}{2m} + (V-E_T)\right)} = e^{\frac{-D\delta\tau}{2}(V-E_T)} e^{-D\delta\tau\frac{p^2}{2m}} e^{-\frac{D\delta\tau}{2}(V-E_T)}$$

Donc :

$$G(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) = \langle \vec{r} | e^{-\frac{D\delta\tau}{2}(V-E_T)} e^{-D\delta\tau \frac{p^2}{2m}} e^{-\frac{D\delta\tau}{2}(V-E_T)} | \vec{r}' \rangle \quad 3-11$$

Et finalement :

$$\mathbf{G}(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) = e^{-\frac{D\delta\tau}{2}(V(\vec{r})-E_T)} \langle \vec{r} | e^{-D\delta\tau \frac{p^2}{2m}} | \vec{r}' \rangle e^{-\frac{D\delta\tau}{2}(V(\vec{r}')-E_T)} \quad 3-12$$

Il reste donc à trouver la fonction de Green du terme de milieu qui représente une particule libre. Celle-ci est connue, elle est donnée par une fonction de Gauss (5) - (15).

$$\rho_G(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1(\vec{r}-\vec{r}')^2}{2\sigma^2}}$$

Avec $\sigma^{-2} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2 D\delta t} \right)$

La fonction de Green (3-12) du système est donc constituée de deux termes, la Gaussienne $\rho_G(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau)$ et un terme dit « rate term » que l'on va noter :

$$\mathbf{W}(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) = e^{-\frac{D\delta\tau}{2}(V(\vec{r})+V(\vec{r}')-2E_T)} \quad 3-13$$

On a donc pour la fonction de Green :

$$\mathbf{G}(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) = \rho_G(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) \mathbf{W}(\vec{r}, \vec{r}', \delta\tau) \quad 3-14$$

Dans une simulation, pour calculer une approximation de l'état fondamental en résolvant numériquement l'équation intégrale 3-4

$$\psi(\vec{r}_2, t_2) = \int \mathbf{G}(\vec{r}_2, \vec{r}_1, t_2, t_1) \psi(\vec{r}_1, t_1) d\mathbf{v}_1$$

Avec la fonction de Green 3-14, on commence par une configuration et une fonction d'onde qui approxime grossièrement l'état fondamental, après un petit pas $\delta\tau$ qui assure l'applicabilité de la

formule de Trotter, la résolution numérique de l'équation intégrale (3-4) s'appuie sur la propagation d'une chaîne de marcheurs aléatoires. Pour chaque vecteur \vec{r}' dans une configuration donnée, un nouveau vecteur \vec{r} est généré à partir de la distribution Gaussienne ρ_G et corrigé par le terme W . Après un grand nombre d'itérations (chacune à pas $\delta\tau$) le calcul converge vers la fonction d'onde de l'état fondamental.

3.4 Application à l'oscillateur harmonique

Pour tester le schéma de Monte Carlo de diffusion et pouvoir faire une comparaison avec la solution exacte, nous choisissons un système quantique connu qui est l'oscillateur harmonique à une dimension dont les fonctions propres et niveaux d'énergies exactes sont disponibles. Pour simplifier les équations, nous utilisons les unités atomiques (énergie mesurée en Hartree et longueur en rayon de Bohr), l'équation de Schrödinger indépendante du temps est alors la suivante :

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}\omega^2x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad 3-15$$

Le spectre d'énergie (valeurs propre de l'hamiltonien) est :

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0,1,2,3, \dots \quad 3-16$$

La fonction d'onde de l'état fondamental ($n = 0$) que l'on cherche à approximer par la méthode DQMC est :

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} e^{-\frac{\omega}{2}x^2} \quad 3-17$$

L'énergie est mesurés en Hartree et x en Bohr. Avec ces unités l'énergie de l'état fondamental à approximer sera : $E_0 = 0.5$

Résolution de l'équation intégrale :

Pour un potentiel harmonique, le terme W dans 3-13 s'écrit :

$$W(x, x', \delta\tau) = e^{-\frac{D\delta\tau}{2}\left(\frac{1}{2}\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}\omega^2 x'^2 - 2E_T\right)} \quad 3-18$$

L'équation intégrale à résoudre par la méthode QDMC est alors la suivante :

$$\psi(x_2, t_2) = \int \rho_G(x_1, x_2, \delta\tau) e^{-\frac{\Delta}{2}\left(\frac{1}{2}\omega^2(x_1^2 + x_2^2) - 2E_T\right)} \psi(x_1, t_1) dx_1 \quad 3-19$$

Avec

$$\rho_G(x_1, x_2, \delta\tau) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1(x_1-x_2)^2}{2\sigma^2}}, \quad \sigma^2 = \left(\frac{2\pi\hbar^2\Delta}{m}\right) \quad \text{et} \quad \Delta = D\delta\tau$$

La procédure de résolution dépend du paramètre $\Delta = D\delta\tau$ où $\delta\tau$ est le temps discret. Pour assurer la convergence, Δ doit donc être petit pour une méthode d'intégration par pas comme décrit précédemment.

Résultats et discussion :

Dans les figures ci-dessous nous montrons les résultats de notre calcul à l'aide d'un programme Fortran développé par Schattke et all (15). Le programme effectue un calcul de l'intégrale 3-19 à l'aide d'un ensemble de marcheurs (chaîne de Markov). La densité (fonction d'onde initiale) est choisie comme une fonction uniforme sur l'intervalle $[x=-4, x=4]$ (unité de rayon de Bohr) avec un nombre total de points calculé égale à 100. La fréquence ω est prise égale à 1Hz. Le pas temporel Δ utilisé est de $\Delta = 0.01$.

Avec ces paramètres, la figure 3-1 représente le calcul de la fonction d'onde pour plusieurs valeurs du nombre de marcheurs $N = 10^4, 2.10^4, 5.10^4, 10^5, 10^6, 10^7$, avec comparaison avec la fonction exacte (ligne continue). La figure 3-2 représente le calcul de l'énergie de l'état fondamental pour chaque valeur de N , ces énergies sont aussi résumées dans le tableau 3-1.

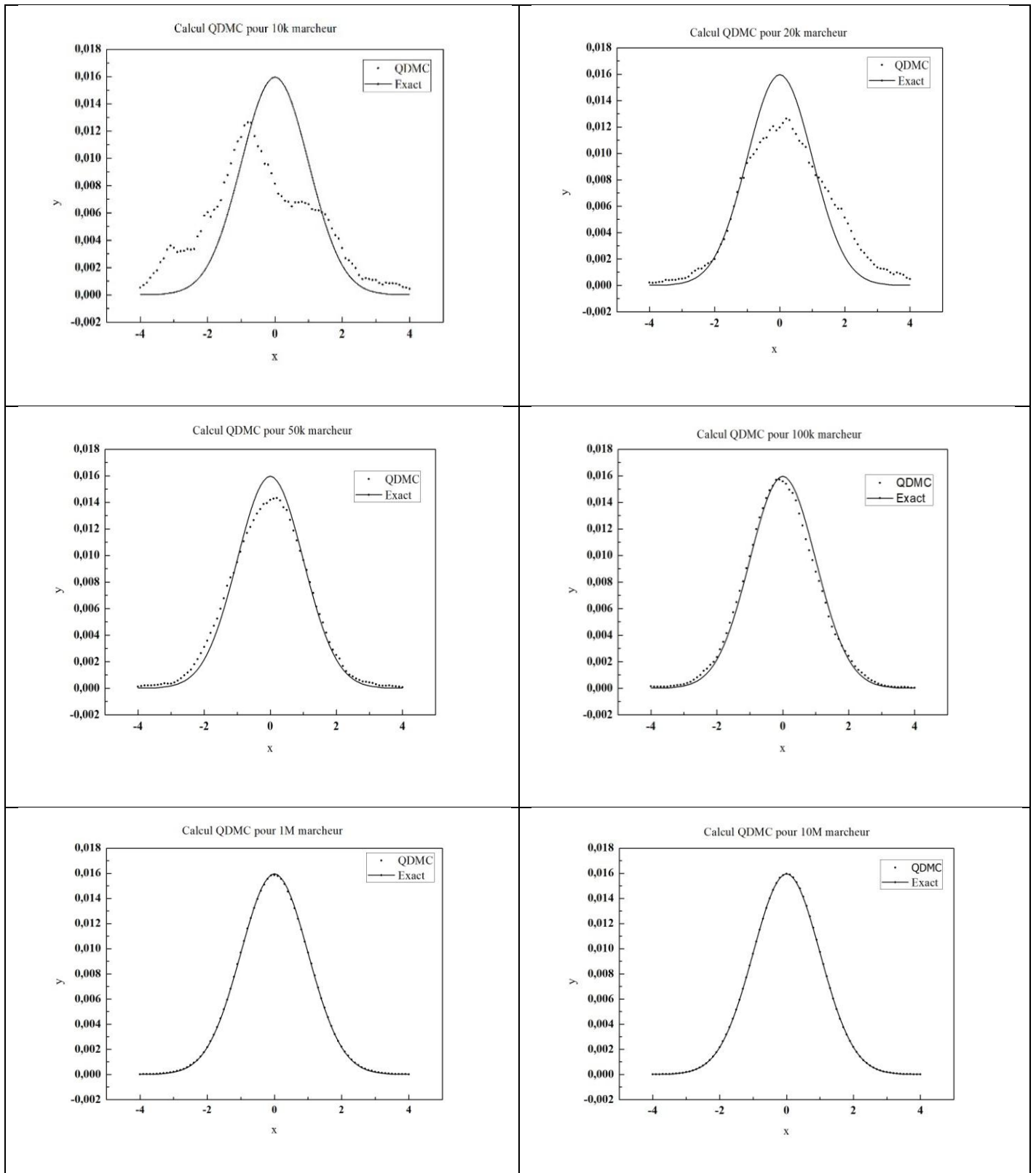


Figure 3-1 : Calcul QDMC de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique pour plusieurs valeurs N du nombre de marcheurs. La courbe en continue représente fonction d'onde exacte.

Nb de Marcheurs MC	10^4	2×10^4	5×10^4	1×10^5	1×10^6	1×10^7
Energie [$\hbar\omega$]	0.69337	0.5493	0.51908	0.48613	0.51376	0.5051

Tableau 3-1 : Valeur obtenu par calcul QDMC de l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique.

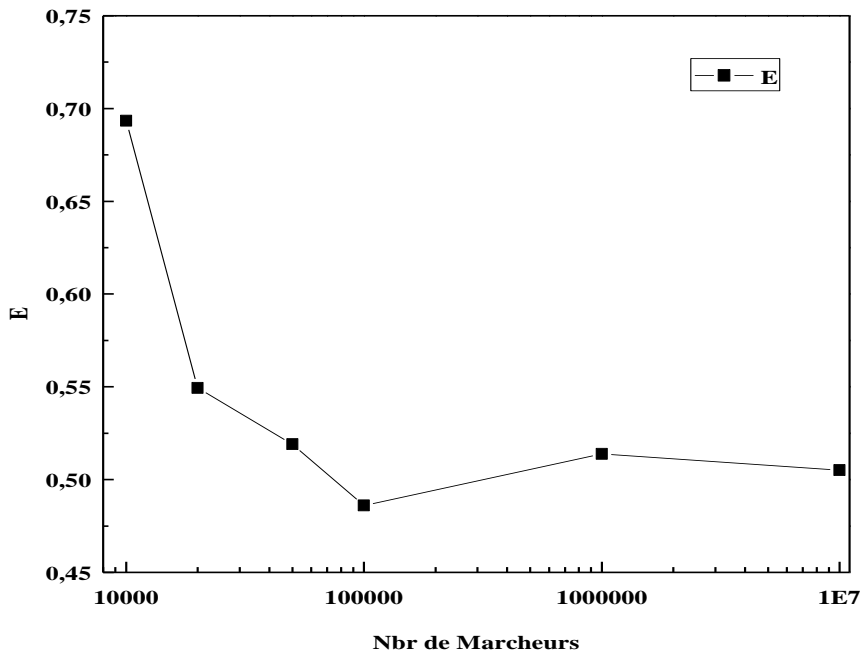


Figure 3-2 : Calcul QDMC de l'énergie de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique

D'après nos calcul et les figures ci-dessous ont peut faire les observations suivantes :

- Le calcul QDMC de la fonction d'onde de l'état fondamental converge effectivement vers sa valeur exacte.
- Le calcul QDMC de l'énergie de l'état fondamental converge elle aussi vers la valeur exacte $E_0=0.5 \hbar\omega$. Ainsi avec un nombre de marcheur de $N=10^7$ on arrive à une énergie $E_0=0.5051 \hbar\omega$
- Une valeur minimale du nombre de marcheur de $N=10^6$ est nécessaire pour une bonne approximation de la fonction d'onde.
- Le pas de calcul Δ est important pour une meilleur convergence rapide, plus Δ est petit plus la convergence est meilleur.
- Un choix plus judicieux de la fonction d'onde initiale permet d'accélérer la convergence.

Conclusion

Les méthodes de Monte Carlo sont une classe de techniques d'approximation stochastiques (dites aussi non-déterministes) basées sur l'utilisation de procédés aléatoires. Le traitement statistique des variables aléatoires mises en œuvre et la théorie des probabilités est à la base des méthodes de Monte Carlo et permet de justifier l'efficacité de ces techniques de calcul. Les domaines d'application de ces méthodes sont nombreux et très riches notamment après le développement d'ordinateurs puissants.

Ce mémoire de master avait deux principaux objectifs. Le premier est l'étude de l'intégration Monte Carlo et son application à la résolution d'équations intégrales. Le deuxième objectif est l'étude de la méthode Monte Carlo quantique par diffusion et son application dans la résolution de l'équation de Schrödinger pour le calcul de l'énergie et de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'oscillateur harmonique.

Après un premier chapitre consacré au principe de la méthode Monte Carlo et à un rappel des notions de base de la théorie des probabilités et notamment la notion de variable aléatoire et sa génération ainsi que la loi des grands nombres, nous avons présenté brièvement dans la première partie du chapitre 2 le formalisme de l'intégration Monte Carlo dont le principe est l'approximation de l'intégrale mise sous forme d'une espérance mathématique par une moyenne arithmétique sur un échantillon de N points. La 2^{ème} partie du chapitre 2 a été consacré aux équations intégrales (qui sont un autre point de vue pour la résolution des équations différentielles) et comment utiliser la méthode Monte Carlo pour résoudre ces équations. Une application à l'oscillateur harmonique classique en utilisant un programme Maple nous a permis d'apprécier l'efficacité de cette technique sous certaines conditions et on a vu comment l'intégration MC est plus efficace que les méthodes classiques lorsqu'il s'agit d'intégrales à haute dimension.

Dans le chapitre 3 nous avons présenté l'une des méthodes Monte Carlo les plus utilisées dans les calculs de simulation en mécanique quantique, il s'agit de l'approche QDMC qui permet de calculer l'état fondamental d'un système en utilisant l'intégration MC par l'échantillonnage d'une fonction de Green approximative. En effet, comme on l'a vu, l'équation de Schrödinger dépendant du temps, peut être transformée en une équation intégrale et l'usage d'un temps « imaginaire » permet d'aboutir à une équation de type diffusion dont la forme intégrale est traitée par intégration Monte Carlo.

Comme application de la méthode QDMC, nous avons traité le cas simple de l'oscillateur harmonique quantique à une dimension. Le but était de retrouver les propriétés de l'état fondamental (énergie et fonction d'onde) à l'aide d'un programme fortran. Comme on a pu le voir, la convergence des calculs de la méthode QDMC est assurée et elle est meilleure avec des échantillons de marcheurs de plus en plus grands ($N > 10^6$) à condition de choisir une petite valeur du pas Δ . Ainsi, à des erreurs statistiques près, les bonnes valeurs de l'énergie et de la fonction d'onde de l'état fondamental ont été obtenues. Un meilleur choix d'une approximation initiale de la fonction d'onde permettra sans doute d'améliorer ce calcul.

Bibliographie

1. **HUBERT-TREMBLAY, V.** *Elaboration des éléments d'une simulation Monte Carlo permettant l'évaluation d'une planification de traitement en radiothérapie externe.* 2006.
2. **Peyre, R .** *Méthode de Monte-Carlo & Application aux Processus Aléatoires.* 2016.
3. **Chia, L.** *simulation Monte Carlo des dispersions angulaires et énergétique des noyaux atomiques par émission de neutrons, thèse de Master, Université Mohamed EL Bachir Elibrahimi-BBA.* 2019.
4. **Oussama, D.** *Intégration Monte Carlo Multidimensionnelle : Application de l'approche quantique variationnelle à L'atome d'hydrogène, mémoire de master, Université BBA.* 2020.
5. **M. H .Kalos, W. A. Paula.** *Monte Carlo Methods.* s.l. : WILEY-VCH, 2008.
6. **Legrand, Frédéric.** *Informatique Appliquée aux Sciences Physiques.*
7. **D .Fredon, M.Maumy-Bertand, F.Bertrand.** *Mathématiques statistique et probabilités DUNOD.* 2009.
8. **wikistat.** *Github.com/wikistat.* [En ligne] 2016.
9. **DUSART, Pierre.** *Cours de Probabilités.* 2013.
10. **E.Harris, George B. Arfken.Hans J. Weber.Frank.** *Mathematcal Methods for Physicists.* s.l. : Elsevier: Academic Preess is an imrint of Elsevier, 2013.
11. *On the product of semi-group of operatores.* **Trotter, H.F.** 545, s.l. : Proceedings of the American Mathematical. society, 1959, Vol. 10.
12. *Effects of backflow correlation in the three-dimensional electron gas: Quantum Monte Carlo study.* **Kwon, Y. Ceperley, D.M. and Martin,R.M.** 6800, s.l. : Physical Review B, 1998, Vol. 58.
13. *Alleviation of the Fermion-sign problem by optimization of many-body wave Functions.* **Umrigar, C.J. Toulouse, J. Filippi, C. et al.** 100201, s.l. : Physical Review Letters , 2007, Vol. 98.
14. **C. K. Tannoudji, B. Diu, F. Laloe.** *Mécanique quantique Tome 1.* s.l. : EDP-Sciences, 2018.
15. **W. Schattke, R. D. Muino.** *Quantum Monte Carlo Programming.* s.l. : Wiley-VCH, 2013.

Résumé :

Ce mémoire est consacré à l'étude de la méthode Monte Carlo et son utilisation dans la simulation en mécanique quantique. L'intégration Monte Carlo d'équations différentielles par des procédés stochastiques est à la base de la technique et de son application à la résolution de l'équation de Schrödinger. Ce travail a 2 objectifs : Le premier est l'étude de l'intégration Monte Carlo et son application à la résolution d'équations intégrales. Le deuxième objectif est l'étude de la méthode Monte Carlo quantique par diffusion (QDMC) et son application dans la résolution de l'équation de Schrödinger dans un cas concret qui est l'oscillateur harmonique.

Mots clés : Monte Carlo, variable aléatoire, équations intégrales, fonction de Green, équation de diffusion, l'oscillateur harmonique

Abstract :

This thesis is dedicated to the study of the Monte Carlo method and its use in simulation in quantum mechanics. The Monte Carlo integration of differential equations by stochastic methods is the basis of the technique and its application to the solution of the Schrödinger equation. This work has 2 objectives: The first is the study of Monte Carlo integration and its application to the solution of integral equations. The second objective is to study the Quantum Diffusion Monte Carlo (QDMC) method and its application in the solution of the Schrödinger equation in a concrete case which is the harmonic oscillator.

Keywords: Monte Carlo ,random variable, integral equations, Green function, diffusion equation, harmonic oscillator.

ملخص:

هذه الرسالة مخصصة لدراسة طريقة مونت كارلو واستخدامها في المحاكاة في ميكانيكا الكم. إن تكامل مونت كارلو للمعادلات التفاضلية بالطرق العشوائية هو أساس التقنية وتطبيقها على حل معادلة شرودنجر. هذا العمل له هدفان: الأول هو دراسة تكامل مونت كارلو وتطبيقه على حل المعادلات التكاملية. الهدف الثاني هو دراسة طريقة مونت كارلو الكمومية بالانتشار وتطبيقها في حل معادلة شرودنجر في حالة ملموسة وهي المذبذب التوافقي.

الكلمات المفتاحية: مونت كارلو , متغير عشوائي , المعادلات التكاملية , دالة غرين , معادلة الانتشار , المذبذب التوافقي.