



Mémoire de fin d'études

PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE: Master

Filière: Physique
Option: Physique des Matériaux

THÈME:

***Calcul de quelques propriétés quantiques de l'atome
d'hélium par intégration
Monte Carlo.***

Préparé par: Boulahlib Brahim.

Soutenu le :--/06/2020

Devant le jury:

Président: Sahnoune Yassine

Rapporteur: Khalfallah Farid

Examineur: Kahoul Abdelhalim

M.C.A Université de BBA

M.C.A Université de BBA

Pr. Université de BBA

Année Universitaire 2021-2022

Mémoire de Master

Calcul de quelques propriétés quantiques de l'atome d'hélium par
intégration Monte Carlo

Département des Sciences de la Matière
Faculté des sciences et de la technologie
Université de BBA

BOULAHLIB B.

July 4, 2022

Dédicace et remerciements

Ce travail n'aurait pas pu être réalisé sans la précieuse aide de plusieurs personnes que je tiens à remercier.

- *Tout d'abord, je tiens à remercier ALLAH le tout puissant de m'avoir donné le courage, la volonté, et la patience pour réaliser ce modeste travail de recherche.*
- *Je tiens à remercier infiniment mon directeur de mémoire Dr. Khalfallah Farid, pour son encadrement de qualité, pour ces précieux conseils, pour ses corrections pour sa gentillesse, pour sa présence tout au long de ma recherche, j'ai eu l'honneur et la chance de bénéficier de ses connaissances, et ses compétences, ces judicieux conseils pour réaliser cet humble travail.*
- *Ensuite, mes remerciements vont également aux membres du jury Dr. Sahnoune Yassine (Président), Pr. Kahoul Abdelhalim (Examineur) pour la lecture attentive de ce mémoire et pour les éventuelles remarques qu'ils m'adresseront lors ma soutenance.*
- *Nous remercions l'ensemble des enseignants et les étudiants du département science de la matière et à tous ceux qui nous ont aidés de près ou de loin par un geste, une parole ou un conseil.*

Je dédie entièrement cet humble travail:

- *A l'âme de ma mère, que son âme repose en paix, elle sera toujours présente dans mon cœur.*
- *A mon père, que Dieu lui accorde une bonne santé.*
- *A ma femme, pour la patience et le soutien dont elle a fait preuve pendant toute la durée de cette thèse, Je tiens à la remercier surtout pour son soutien moral ininterrompu et ses nombreux conseils tout le long de ma thèse.*
- *A mes enfants Ayoub, Mouhamed Al-Seddik, Ahmed Amine, les deux jumeaux Wassim et Wail.*
- *A ma belle fille Amina, que je remercie infiniment, pour son soutien et sa sympathie.*
- *A mes Frères et sœurs pour leurs encouragements durant tout mon parcours.*

Table des Matières

Dédicace et remerciements	i
Table des Matières	ii
Liste des Figures	iv
Liste des Tableaux	v
Introduction	1
1 Méthode de Monte Carlo	3
1.1 Développement historique de la méthode Monte Carlo	4
1.2 Éléments de base de la simulation Monte Carlo	4
1.2.1 Rappel de la théorie des probabilités	5
1.2.2 Lois de probabilité usuelles	9
1.2.3 Convergence	11
1.3 Méthode de simulation Monte Carlo	12
1.3.1 Nombres Pseudo-aléatoires	13
1.3.2 Méthode de génération	13
2 Intégration Monte Carlo : Étude comparative	17
2.1 Introduction	18
2.2 Intégration de Gauss-Legendre	18
2.2.1 Formules de Gauss-Legendre à 2 nœuds à une dimension	18
2.2.2 Formules de Gauss-Legendre à 2 nœuds à n dimension	19
2.3 Formules d'intégration Monte Carlo	20
2.3.1 Principe de la méthode	20
2.3.2 Intégration Monte Carlo avec échantillonnage uniforme	20
2.3.3 Intégration Monte Carlo avec échantillonnage non-uniforme	22
2.3.4 Intégration Monte Carlo avec échantillonnage préférentiel (réduction de la variance)	23
2.4 Étude comparative MC vs Gauss	25
2.4.1 Calcul d'une intégrale multidimensionnelle	25
2.4.2 Résultats et discussion	26

3	Intégration Monte Carlo : Atome d'Hélium	32
3.1	Introduction	33
3.2	Rappel théorique	33
3.2.1	Équation de Schrödinger pour l'atome d'hélium	34
3.2.2	Approximation des électrons indépendants	35
3.2.3	Méthode variationnelle	36
3.2.4	Cas de l'atome d'He	37
3.3	Application de l'intégration MC à l'atome d'He	37
3.3.1	Calcul du potentiel inter-électronique moyen	39
3.3.2	Calcul de la distance inter-électronique moyenne	40
3.3.3	Résultats et discussion	41
	Conclusion	44
	Bibliographie	47

Liste des Figures

1.1	Densité de probabilité $\rho(x)$ et Fonction de répartition $F(x)$ pour une lois uniforme . . .	9
1.2	Densité de probabilité $\rho(x)$ et Fonction de répartition $F(x)$ pour la lois exponentielle. .	10
1.3	Densité de probabilité $\rho(x)$ et fonction de répartition $F(x)$ pour une lois normale centrée réduite.	11
1.4	Fonction de répartition $F_X(x)$	15
1.5	fonction de répartition inverse $F_X^{-1}(\mu)$	15
1.6	L'algorithme de la méthode de rejet.	15
1.7	Histogramme d'une distribution uniforme avec 20000 événements	16
1.8	Histogramme d'une distribution gaussienne avec 20000 événements	16
2.1	Représentation graphique de la fonction $f(\vec{r}), g(\vec{r})$ à $n = 1$ dimension [12]	26
2.2	Représentation graphique de la fonction $f(\vec{r}), g(\vec{r})$ à $n = 2$ dimensions [12]	26
2.3	Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 3$	27
2.4	Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 6$	27
2.5	Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 9$	28
2.6	Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 12$	28
2.7	Nombre de points d'intégration de Gauss en fonction de la dimension de l'intégrale n pour trois valeurs de subdivision des axes : $m = 1, 2$ et 5 (en échelle log)	30
3.1	variables décrivant l'atome d'hélium	33
3.2	Principe de la méthode variationnelle.	37
3.3	Potentiel moyen e-e $\langle V_{12} \rangle$ avec barres d'erreurs en fonction de N (ua)	42
3.4	Distance moyenne e-e $\langle r_{12} \rangle$ avec barres d'erreur en fonction de N (ua)	42
3.5	Erreur relative du potentiel moyen e-e $\langle V_{12} \rangle$ en fonction de N	43
3.6	Erreur relative de la distance moyenne e-e $\langle r_{12} \rangle$ en fonction de N	43

Liste des Tableaux

2.1	Valeurs des erreurs relatives Er_p en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 3$	27
2.2	Valeurs des erreurs relatives Er_p en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 6$	27
2.3	Valeurs des erreurs relatives Er_p en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 9$	28
2.4	Valeurs des erreurs relatives Er_p en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 12$	28
3.1	Valeurs de l'intégration MC pour le potentiel moyen $\langle V_{12} \rangle$ en (ua)	42
3.2	Valeurs de l'intégration MC pour la distance moyenne $\langle r_{12} \rangle$ en (ua)	42
3.3	Erreur MC relative pour le potentiel moyen $\langle V_{12} \rangle$ en (%)	43
3.4	Erreur MC relative pour la distance moyenne $\langle r_{12} \rangle$ en (%)	43

Introduction

De manière générale, la simulation permet d'étudier et expérimenter un système donné parfois gouverné par des interactions complexes, de mesurer les effets de certains changements dans les interactions sur le comportement du système et d'expérimenter de nouvelles situations. Certaines techniques de simulation vont permettre d'approcher numériquement des calculs dans un grand nombre de domaines de la physique. Parmi ces méthodes, il y a la méthode Monte Carlo.

Dans le domaine de la physique numérique, la méthode de Monte Carlo désigne une famille de méthodes algorithmiques visant à calculer une valeur numérique approchée en utilisant des procédés aléatoires, c'est-à-dire des techniques probabilistes. Elle se distingue des autres méthodes de simulation par son aspect stochastique, c'est-à-dire non déterministe, elle est basée sur des tirages aléatoires par l'utilisation de séquences de nombres aléatoires adéquatement distribués dans ces calculs.

Les méthodes de Monte Carlo sont particulièrement utilisées pour calculer des intégrales en dimensions multiples, elles sont également couramment utilisées en physique des particules pour la simulation de détecteurs. En calcul numérique, ces méthodes peuvent aussi servir à la résolution d'équations aux dérivées partielles et des systèmes linéaires à la résolution de problèmes d'optimisation, à la résolution des problèmes à N corps en mécanique quantique, la résolution des problèmes de diffusion et de transport pour ne citer que quelques uns. Lorsque la complexité et la dimensionnalité d'un problème deviennent conséquentes, on peut dire que les méthodes de simulation Monte Carlo se présentent comme un choix judicieux.

Dans ce mémoire, nous avons présenté la méthode d'intégration de Monte-Carlo et son avantage par rapport aux méthodes déterministes ainsi que son application pour l'estimation numérique de propriétés quantiques de l'atome d'hélium. Ce mémoire est divisé en trois chapitres:

Le premier chapitre décrit le développement historique et les éléments de base de la méthode de Monte Carlo, où nous avons abordé certains des concepts théoriques en théorie des probabilités dont dépend la méthode de Monte Carlo notamment le concept d'espérance à la base de l'intégration Monte Carlo. Nous avons aussi abordé les outils de la simulation Monte Carlo dont les nombres pseudo-aléatoires et les différentes méthodes de génération de ces nombres.

Dans le deuxième chapitre, nous réalisons une étude comparative entre l'intégration Monte Carlo et une technique d'intégration déterministe robuste qui est la quadrature de Gauss-Legendre à n dimension. La méthode de Monte Carlo a été abordée avec échantillonnage uniforme, non uniforme et préférentiel. A la fin de ce chapitre, le calcul concret d'une intégrale multidimensionnelle à l'aide du logiciel Maple a été réalisé dans l'optique d'une comparaison entre les deux méthodes. Les résultats de ces calculs sont analysés et discutés ce qui nous a amené à constater le problème de la dimensionnalité avec les méthodes déterministes.

Le troisième chapitre est consacré à l'application de la méthode d'intégration Monte Carlo à l'atome d'hélium (système à trois corps) et plus précieusement à l'estimation numérique de deux quantités liées à l'atome d'He et qui se présentent sous la forme d'intégrales 6-dimensionnelles, il s'agit du potentiel électronique moyen et de la distance inter-électronique en utilisant une fonction d'onde simple basée sur l'approximation des électrons indépendants. Ce chapitre s'achève par une discussion des résultats obtenus et une comparaison avec les valeurs exactes est présentée.

Nous terminons notre mémoire par une conclusion générale où seront rapportés nos principaux résultats ainsi que les futures perspectives de travail à effectué.

Chapitre 1

Méthode de Monte Carlo

1.1 Développement historique de la méthode Monte Carlo

La simulation Monte Carlo, également appelée méthode stochastique, est une technique mathématique utilisée pour estimer les résultats possibles d'un phénomène complexe ou d'un calcul numérique à grand nombre de paramètres. La naissance de la méthode de Monte-Carlo remonte au comte de Buffon qui en 1777, a décrit une méthode restée célèbre de calcul de π basée sur la réalisation d'expériences répétées. Mais la vraie méthode de Monte-Carlo est née au Laboratoire national de Los Alamos dans les premières années après la seconde guerre mondiale, et est liée à l'apparition des premiers ordinateurs et à leur utilisation dans le cadre des projets secrets du département de la défense des États Unis dans les années 40-45 en vue de la conception des premières bombes atomiques par les scientifiques de Los Alamos. Fin 1946, Stanislaw Ulam suggéra l'utilisation de l'échantillonnage aléatoire pour simuler les trajectoires de vol des neutrons, et John von Neumann a développé une proposition détaillée au début de 1947, en vue de la conception des premières bombes atomiques (un article sur le sujet fut publié en 1949 [1]).

Le nom de la méthode vient d'une ville de Monaco, célèbre pour ses casinos. Stanislaw Ulam, Nicholas Metropolis et John von Neumann ont été parmi les pionniers de la méthode Monte-Carlo dans les années 40. La publication de base est un ouvrage de Metropolis, Edward Teller, Augusta H. Teller, Marshall Rosenbluth et Arianna W. Rosenbluth de 1953, les pionniers de l'étude de la matière par simulation sur ordinateur.[2]

Depuis, la méthode de Monte-Carlo s'est répandue à pratiquement toutes les disciplines où apparaissent la simulation numérique de problèmes à haute dimensionnalité : Physique statistique et quantique, astrophysique, météorologie, chimie, mathématiques financières, télécommunication, etc...

1.2 Éléments de base de la simulation Monte Carlo

La simulation Monte Carlo est un outil statistique qui utilise des procédés stochastiques basés sur les principes de la théorie des probabilités et statistiques des variables aléatoires. La quantité que l'on souhaite calculer n'a pas nécessairement de composantes aléatoires, mais peut être transformée sous cette forme. Cette première étape, la modélisation, est la plus importante. Ensuite, la simulation du modèle consiste à effectuer des expériences successives, à utiliser la moyenne obtenue comme estimation, et à évaluer la précision de l'estimateur. De nombreux algorithmes permettent de générer des variables aléatoire ayant un comportement difficilement différentiable du hasard ont été ainsi mis au point.

1.2.1 Rappel de la théorie des probabilités

Les probabilités sont une branche des mathématiques dont l'objet est l'étude des phénomènes aléatoires. Historiquement, il s'agissait essentiellement des jeux de hasard et des problèmes d'espérance de vie. Bien que le calcul des probabilités sur des questions liées au hasard existe depuis longtemps, la formalisation mathématique n'est que récente. Elle date du début du XXe siècle avec Kolmogorov qui a axiomatisé le calcul des probabilités (fondements du calcul des probabilités, 1933) et a permis en particulier l'utilisation de la théorie de la mesure.

Définition:

Nous appelons probabilité sur $(\Omega; F)$ une application P de l'ensemble Ω dans l'ensemble F (généralement \mathbb{R}) vérifiant les deux propriétés suivantes (axiomes de Kolmogorov) :

1. $P(\Omega) = 1$.
2. pour tout suite $(A_i)_{i \in I}$ finie ou infinie dénombrable d'événements de F deux à deux incompatibles, nous avons

$$P(\bigcup_{i \in I} A_i) = \sum_{i \in I} P(A_i) \quad (1.1)$$

c-à-d que la probabilité d'un événement qui est la réunion disjointe d'événements est égale à la somme des probabilités de ces événements [3].

Densité de probabilité:

Définition:

En théorie des probabilités ou en statistiques, on dit qu'une fonction ρ : de $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ est une densité de probabilité qui permet de représenter une loi de probabilité sous forme d'intégrales d'une variable aléatoire réelle X si, pour tout réel x ,

$$\rho(x) = \frac{dp}{dx} \quad (1.2)$$

1. dp étant la probabilité de trouver x dans l'intervalle $[x, x + dx]$.
2. L'intégrale totale de probabilité doit être convergente et égale à l'unité c-a-d:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(t) dt = 1 \quad (1.3)$$

3. $\rho(x)$ est toujours positive, $\rho(x) \geq 0$; $\forall x \in \mathbb{R}$.

Fonction de répartition:

Soit X une valeur aléatoire réelle, de densité ρ sa fonction de répartition P est définie par:

$$\forall x \in \mathbb{R}, P(t) = \int_{-\infty}^t \rho(x) dx \quad (1.4)$$

et représente la probabilité de trouver X dans l'intervalle $] - \infty, t]$.
avec:

1. ρ possède un nombre fini de points de discontinuité.
2. $\lim_{x \rightarrow -\infty} P(x) = 0$ et $\lim_{x \rightarrow +\infty} P(x) = 1$. (cette fonction est croissante sur \mathbb{R} , elle varie de 0 à 1). [4]

Remarque: La fonction de répartition P est vérifiée par toutes les propriétés générales de ces fonctions (limites, régularité...), est par définition continue et possède les propriétés suivantes qui la relie à la fonction de densité ρ :

1. $P'(x_0) = \rho(x_0)$
2. $P(a < x \leq b) = \int_a^b \rho(t) dt$, pour tout $(a; b) \in \mathbb{R}^2$, tel que $(a \leq b)$

Variable aléatoire:**Définition:**

Une variable aléatoire (ou v.a.) est une application $X : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Si $X(\Omega)$ est eu plus dénombrable, on dit que X est un v.a. discrète sinon on dit qu'elle est continue.

Différents types de variables aléatoires:

Variable aléatoire discrète: Si une variable aléatoire X prend un nombre de valeurs fini ou dénombrable (son ensemble de définition est inclus dans \mathbb{N}), on parle de variable discrète.

Définition: La loi d'une variable aléatoire discrète X est une probabilité P_X définie sur ses événements élémentaires par l'application:

$$P_X : X(\Omega) \mapsto [0, 1]$$

$$x \mapsto P_x = P[X = x]$$

Variable aléatoire continue: Une variable aléatoire est dite continue si elle peut prendre toutes les valeurs d'un intervalle. En particulier, dans le cas où la variable aléatoire peut prendre toute valeur réelle (son ensemble de définition contient un intervalle de \mathbb{R}), on parle de variable aléatoire réelle c.à.d s'il existe une fonction ρ définie sur l'espace (Ω) telle que:

1. $\rho(x) \geq 0$ pour $x \in R$
2. L'ensemble des points de discontinuités de ρ est fini et ces discontinuités sont de première espèce. (les deux limites droite et à gauche existes)
3. Pour tout x réel la fonction de répartition F_x de la variable X est donnée par:

$$F_X(x) = \int_{-\infty}^x \rho_x(t) dt$$

avec la fonction $\rho_x(t)$ est une densité de probabilité de X ou:

$$\rho_x(t) = \frac{dp}{dt} \quad (1.5)$$

Espérance et variance

Espérance : Soit X une valeur aléatoire (v.a) définie sur Ω fini. si X est une (v.a) discrète alors l'espérance, ou moyenne, de X est le nombre réel noté $E(X)$ et défini par:

$$E(X) = \langle X \rangle = \sum_{x_i \in X(\Omega)} x_i P(X = x_i) \quad (1.6)$$

On peut dire aussi c'est la moyenne d'une série statistique fréquente. La valeur observée x_i de la variable statistique X est remplacée par la probabilité de la valeur x_i pour la valeur aléatoire X .

Si X est (v.a) continue et distribué selon la densité $\rho(x)$ et si l'intégrale $\int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx$ converge absolument, on dit que la variable aléatoire (v.a) X admet une espérance mathématique (ou valeur moyenne) $E(X)$ elle est donnée par:

$$E(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx \quad (1.7)$$

sous réserve de convergence absolue de cette intégrale.

- Si l'intégrale précédente n'est pas convergente, alors l'espérance de X n'est pas définie.
- $E(X)$ est une moyenne pondérée des valeurs que peut prendre X .

Propriétés: soit X et Y deux v.a définies sur Ω fini et α, β deux nombres réels on a:

$$E(X + Y) = E(X) + E(Y)$$

$$E(\alpha X + \beta) = \alpha E(X) + \beta$$

Si X et Y sont deux v.a discrètes indépendantes, admettant une espérance alors:

$$E(XY) = E(X)E(Y)$$

Espérance d'une fonction d'une variable aléatoire continue: Soit X une variable aléatoire définie sur $[\alpha, \beta]$ tel que $(-\infty \leq \alpha < \beta \leq +\infty)$ et distribuée selon une densité $\rho(x)$, soit f définie et continue sur l'intervalle $[\alpha, \beta]$. On peut dire que $f(X)$ admet un espérance mathématique noté $E[f(X)]$ si et seulement si la quantité $E(f(X)) = \int_{\alpha}^{\beta} x f(x) \rho(x) dx$ existe et est absolument convergente [5]:

$$E[f(X)] = \langle f(X) \rangle = \int_{\alpha}^{\beta} f(x) \rho(x) dx \quad (1.8)$$

Variance et écart-type: Soit X une v.a distribuée selon une densité $\rho(x)$. La variance de X est le nombre réel noté $Var(X)$ et défini par [3]:

$$Var(X) = E([X - E(X)]^2) = \int_{\alpha}^{\beta} [X - E(X)]^2 \rho(x) dx \quad (1.9)$$

on peut dire que la variance est la moyenne des carrés des écarts à la moyenne.

Nous appelons écart-type de X la valeur $\sqrt{Var(X)}$, notée σ ou σ_X .

$$\sigma(X) = \sigma_x = \sqrt{Var(X)} \quad (1.10)$$

- On appelle variable centrée toute variable X telle que: $E(X) = 0$.
- On appelle variable réduite toute variable X telle que: $Var(X) = 1$.

D'après l'équation (1.9) par un simple calcul on peut écrire (*formule de Huygens*):

$$\boxed{\sigma^2(X) = Var(X) = E(X^2) - E(X)^2}. \quad (1.11)$$

La variance est égale à la moyenne des carrés diminuée du carré de la moyenne.

On appelle moment d'ordre k [?] l'espérance, si elle existe, de la v.a.r X^k tel-que :

$$E(X^k) = \sum_i^k x_i^k P(X = x_i) \quad (1.12)$$

La variance est aussi appelée moment centré d'ordre 2.

On appelle moment d'ordre 2 l'espérance, si elle existe, de la variable aléatoire (v.a) X^2 , telle-que:

$$E(X^2) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x) dx \quad (1.13)$$

Propriétés de la variance : Soit X et Y deux v.a, alors on a :

$$Var(X + Y) = Var(X) + Var(Y)$$

$$Var(\alpha X + \beta) = \alpha^2 Var(X)$$

1.2.2 Lois de probabilité usuelles

Loi continue uniforme: La variable aléatoire X est distribuée uniformément sur l'intervalle $[a, b]$ si sa densité de probabilité est constante sur cet intervalle et normalisée sur l'ensemble des nombres réels c'est à dire [6]:

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

On dit que X suit la loi uniforme et on note $X \sim U[a, b]$. Par conséquent, sa fonction de répartition est donnée par:

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

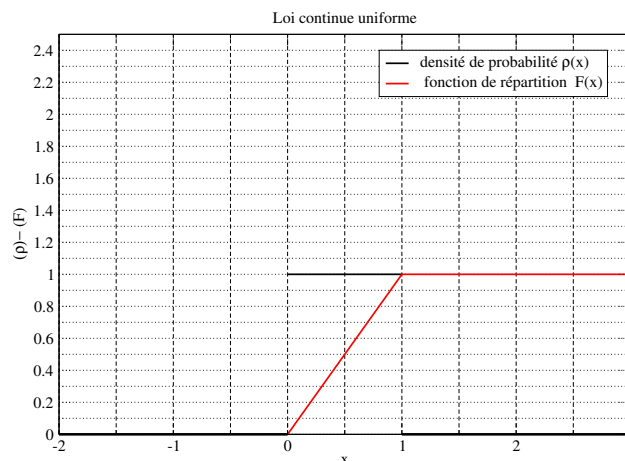


Figure 1.1: Densité de probabilité $\rho(x)$ et Fonction de répartition $F(x)$ pour une lois uniforme

Nous avons pour l'espérances et la variance:

$$E(X) = \frac{a+b}{2} \quad \text{et} \quad \text{Var}(X) = \frac{(b-a)^2}{12}$$

Loi Exponentielle: Une variable aléatoire X à valeurs dans $[0, +\infty[$ suit une loi exponentielle de paramètre λ , et on note $\varepsilon(\lambda)$, tel que ($\lambda > 0$), si X est une variable continue et admet pour densité de probabilité la fonction ρ_x suivante [6]:

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

Sa fonction de répartition est donnée par:

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

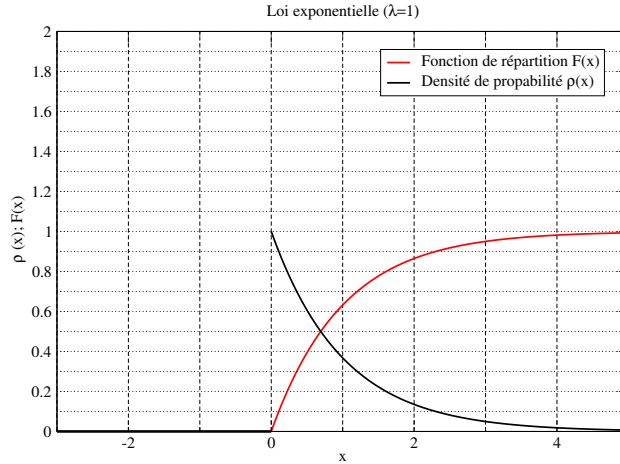


Figure 1.2: Densité de probabilité $\rho(x)$ et Fonction de répartition $F(x)$ pour la lois exponentielle.

Son espérance et sa variance sont données par:

$$E(X) = \frac{1}{\lambda} \quad \text{et} \quad \text{Var}(X) = \frac{1}{\lambda^2}$$

Loi normale, ou loi de Laplace-Gauss: On dit que X suit la loi normale de paramètres (μ, σ^2) avec $\sigma > 0$, et on note $X \mapsto \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, ssi X admet pour densité la fonction $\rho_{\mu, \sigma}(x)$ telle que, pour tout $x \in \mathbb{R}$ [6] :

$$\rho_{\mu, \sigma}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (1.14)$$

et sa fonction de répartition est donnée par:

$$F_{\mu, \sigma}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} dx \quad (1.15)$$

L'espérance et la variance sont:

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

Caractéristiques:

1. La fonction de densité $\rho_{\mu, \sigma}(x)$ d'une loi normale $\mathcal{N}(\mu, \sigma)$ vérifie:
 $\rho_{\mu, \sigma}(\mu + x) = \rho_{\mu, \sigma}(\mu - x)$

2. La fonction de répartition $F_{\mu,\sigma}(x)$ d'une loi normale $N(\mu, \sigma)$ vérifié:

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

On note: $X \sim N(\mu, \sigma)$ pour dire que X suit la distribution normale (μ, σ) .

On revient à la loi normale centrée réduite grâce à la propriété suivante:

$$X \sim N(\mu, \sigma) \Leftrightarrow \frac{x - \mu}{\sigma} \sim N(0, 1)$$

Dans le cas de la loi normale centrée réduite $\mu = 0$ et $\sigma^2 = 1$, la densité 1.14 devient:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \quad (1.16)$$

et sa fonction de répartition :

$$F(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{x^2}{2}} dx \quad (1.17)$$

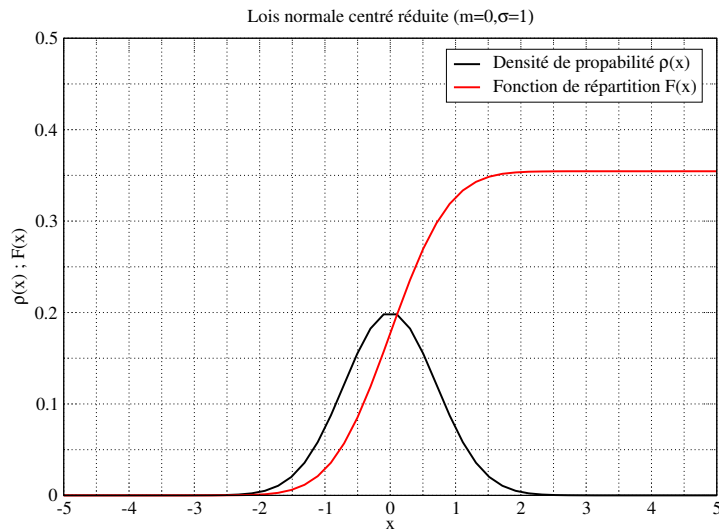


Figure 1.3: Densité de probabilité $\rho(x)$ et fonction de répartition $F(x)$ pour une loi normale centrée réduite.

1.2.3 Convergence

La notion de convergence est très importante en théorie des probabilités, elle repose essentiellement sur deux théorèmes limites qui garantissent la convergence des estimateurs vers leurs valeurs théoriques :

1. La loi faible des grandes nombres qui énonce la convergence de la moyenne empirique $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j$ d'une suite (X_j) de variables aléatoires identiquement distribuées.

2. Le théorème de la limite centrale qui indique à quelle vitesse cette convergence a lieu.

Loi faible des grands nombres:

Théorème: soit (X_N) une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribués (iid) donc ayant une même espérance mathématique $E(X)$ et une même variance $Var(X)$. Soit

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j$$

la moyenne arithmétique de X_N . La loi faible des grands nombres stipule que la moyenne \bar{X} converge en probabilité vers l'espérance commune $E(X)$, c-à-d :

$$\bar{X} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j \xrightarrow{N \rightarrow \infty} E(X) \quad (1.18)$$

Théorème central limite: Soit une suite X_N de v.a iid dont l'espérance $\mu = E(X)$ et l'écart-type $\sigma \neq 0$ existent et sont finis [5]

Soit

$$S_N = X_1 + X_2 + \dots + X_j + \dots + X_N$$

Alors :

- L'espérance de S_N est $E(S_N) = N\mu$
- L'écart-type de S_N est $\sigma(S_N) = \sigma\sqrt{N}$

Ainsi S_N converge vers une variable aléatoire normale d'espérance $N\mu$ et d'écart-type $\sigma\sqrt{N}$

Si on définit la nouvelle variable aléatoire $Y_N = \frac{\bar{X}_N - \mu}{\sigma\sqrt{N}}$, alors celle-ci converge vers une variable aléatoire normale centrée réduite $\mathcal{N}(0, 1)$

1.3 Méthode de simulation Monte Carlo

La simulation informatique, ou simulation numérique, est une série de calculs effectués sur un ordinateur et reproduisant un phénomène physique. Elle aboutit à la description du résultat de ce phénomène, comme s'il s'était réellement déroulé. Cette représentation peut être une série de donnée par calcul théorique, une image ou même un film vidéo.

La méthode de simulation Monté Carlo peut représenter des phénomènes physiques complexes, dont la description repose sur un modèle mathématique comportant des équations aux dérivées partielles. Elle utilisent des nombres pseudo-aléatoires (générés par un algorithme) pour simuler des phénomènes comportant une ou plusieurs variables, visant à évaluer l'espérance et la variance d'une variable aléatoire en générant un grand nombre

d'échantillons qui suivent la même loi de probabilité que la variable aléatoire, on veut estimer une mesure de performance définie par une espérance mathématique (une intégrale) [7]. On distingue deux grands domaines où la méthode de Monte Carlo peut être utilisée avec succès:

Problèmes déterministes : Ce sont des problèmes de nature déterministe faisant appel aux calculs numériques. On cite comme exemple de ces problèmes : Estimation des surfaces, calculs d'intégrales multiples, mouvement de particules, résolution d'équations différentielles, ect...

Phénomènes et processus aléatoires : On cite comme exemple de ces problèmes: Systèmes de commande décrits par des équations complexes, systèmes stochastiques de gestion ou de production, problèmes de transport, problèmes à haute dimensionnalité en physique statistique et quantique, astrophysique et météorologie, reconnaissance de formes (analyse d'images, de paroles) ect...[8].

1.3.1 Nombres Pseudo-aléatoires

On ne peut pas trouver un algorithme mathématique qui peut générer des nombres parfaitement aléatoires, on obtient uniquement des nombres qui se rapprochent de l'aléatoire, dit des nombres pseudo-aléatoires. Un algorithme déterministe produit une séquence ayant des propriétés statistiques proches d'une séquence de nombres parfaitement aléatoire. Cet algorithme est dit générateur de nombres pseudo-aléatoires (PRNG, en anglais pseudo-random number generator).

Un générateur de nombres pseudo-aléatoire démarre à partir d'un état de départ arbitraire. De nombreux nombres sont générés en peu de temps et peuvent également être reproduits plus tard, si le point de départ de la séquence est connu. Par conséquent, les nombres sont déterministes et efficaces mais pas parfaits, de ce fait, il est toujours nécessaire d'appliquer des tests de qualité et vérifier les programmes dans lesquels ils sont utilisés [2].

1.3.2 Méthode de génération

Nous allons présenter quelques méthodes utilisées pour la génération de nombres pseudo-aléatoires à l'aide d'un ordinateur. Ces outils appelés générateurs utilisent la puissance des ordinateurs est des transformations mathématiques qui permettent de simuler des nombres pseudo-aléatoires fiables distribués selon une loi donnée (non-uniforme en général).

Loi Uniforme : méthode des congruences

La méthode la plus simple et la plus couramment utilisée est la méthode des congruences linéaires. on considère une suite (x_n) avec $n \geq 0$ de nombres entiers compris (0 et $m - 1$)

de la façon suivante:

$$x_{n+1} = ax_i + b[\text{modulo } m], \quad (1.19)$$

avec x_0 (valeur initiale) $\in \{0, 1, \dots, m - 1\}$, et (a, b, m) des entiers.

Les congruences sont très utiles car elles permettent de ramener des calculs avec de très grands nombres à des calculs avec des nombres raisonnables [9]. Les générateurs les plus utilisés correspondent à des nombres sous la forme de séquences binaires et conduit à s'intéresser aux paramètres m s'écrivant sous la forme $m = 2^N$ et sont donc du type:

$$x_{n+1} = ax_i + b[\text{modulo } m = 2^N], \quad (1.20)$$

Loi Non Uniforme :

1- Méthode d'inversion: On suppose que l'on sait simuler la réalisation d'un échantillon de loi uniforme sur $[0, 1]$, c-à-d. de (v.a) indépendante $(X_n; n \geq 1)$ de même loi $\mathcal{U}[0, 1]$

Notons $F^{-1} :]0, 1[\rightarrow R$, la pseudo-inverse de F défini par:

$$F^{-1}(u) = \inf\{t : F(t) \geq u\} \quad \text{pour tout } u \in]0, 1[\quad (1.21)$$

Alors si la variable aléatoire U suit une loi uniforme $\mathcal{U}[0, 1]$, alors la variable aléatoire $F^{-1}(U)$ suit la loi de fonction de répartition F .

En effet, considérons la v.a $X = F^{-1}(U)$, sa fonction de répartition est donné par:

$$P(X \leq x) = P[F^{-1}(U) \leq x] = P[U \leq F(x)] = F(x) \quad (1.22)$$

Donc U suit la loi uniforme \rightarrow la fonction de répartition de la v.a X est $F(x)$.

Exemple: Pour la loi exponentielle on a la fonction de répartition [8]:

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

sa fonction de répartition inverse $F_X^{-1}(x)$ est:

$$F_X^{-1}(u) = -\frac{1}{\lambda} \ln(1 - u)$$

Les deux figure 1.4 et 1.5 représentent les fonctions de répartition $F_X(x)$ et sa fonction inverse $F_X^{-1}(u)$

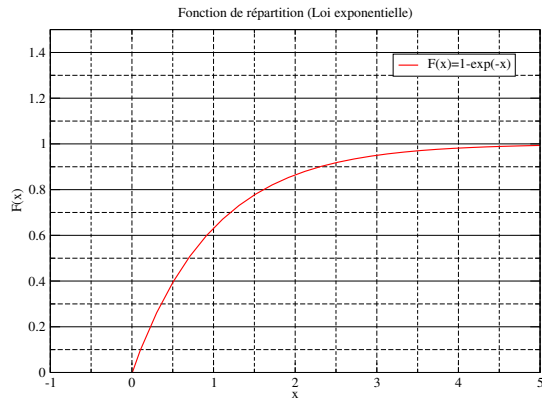


Figure 1.4: Fonction de répartition $F_X(x)$.

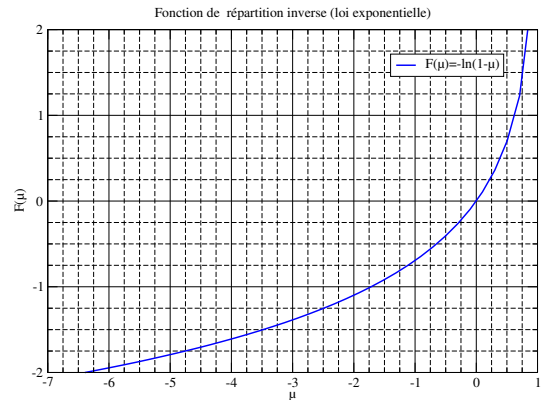


Figure 1.5: fonction de répartition inverse $F_X^{-1}(\mu)$.

2- Méthode de rejet: Pour simuler une variable de densité $f(x)$, on peut commencer par chercher une loi plus simple à simuler de densité $g(x)$ telle que : $f(x) \leq cg(x)$ [10]. Puis on simule donc des variables α_n uniformes sur $[0; 1]$ et des variables X_n de densité $g(x)$ (indépendantes) jusqu'à ce que :

$$c\alpha_n g(X_n) \leq f(X_n)$$

ou

$$\alpha_n(x) \leq \frac{f(X_n)}{cg(X_n)}$$

et soit

$$\alpha_n(x) = \frac{f(X_n)}{cg(X_n)} \in [0, 1]$$

On prend alors pour réalisation de la loi f la variable X_n correspondante.

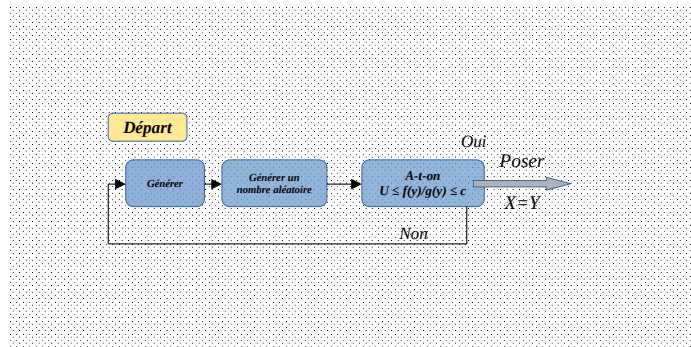


Figure 1.6: L'algorithme de la méthode de rejet.

On montre dans les figures 1.7 et 1.8 sous forme d'histogrammes deux exemples de génération à l'aide du logiciel Maple, de distribution aléatoire, le nombre d'événements générés est de 20000 événements [11]

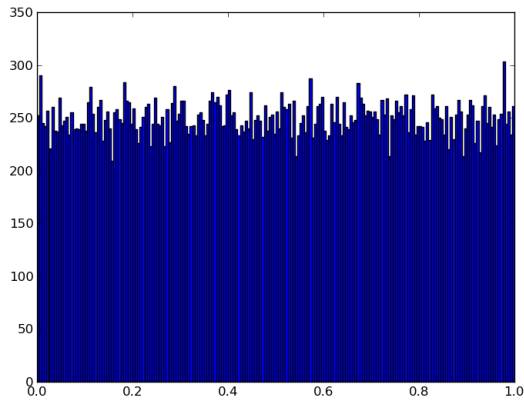


Figure 1.7: Histogramme d'une distribution uniforme avec 20000 événements

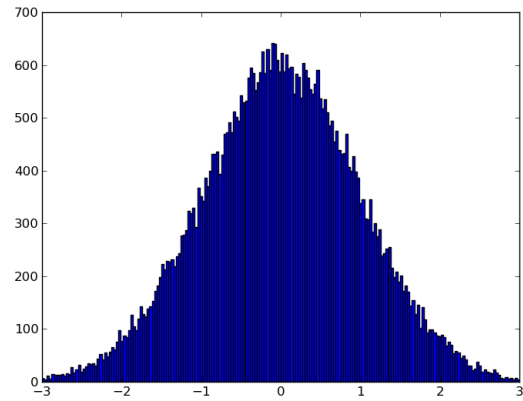


Figure 1.8: Histogramme d'une distribution gaussienne avec 20000 événements

la première figure (à gauche) représente une distribution uniforme sur $[0, 1]$, et la deuxième figure (à droite) représente une distribution gaussienne avec $\sigma = 1$ sur $[-3, 3]$. d'après ces figures, on observe dans la distribution uniforme que le nombre des points est quasiment constant sur tout l'intervalle $[0, 1]$, alors que pour la distribution gaussienne on observe un pic où une majorité des points est située au voisinage du milieu de l'intervalle $[-3, 3]$ et diminue vers les limites de l'intervalle.

Chapitre 2

Intégration Monte Carlo : Étude comparative

2.1 Introduction

Dans ce chapitre et dans le cadre de l'estimation d'intégrales multidimensionnelles, nous avons réalisé une étude comparative entre deux méthodes d'intégration : La méthode de Gauss qui est de type déterministe de grande efficacité et largement utilisée dans l'estimation numérique d'intégrales et la méthode de Monte Carlo qui est de type stochastique et plus adapté comme nous allons le voir pour les intégrales à haute dimension. Une étude similaire a été réalisé dans un mémoire de Master précédent [12] entre la méthode MC et une méthode moins efficace que celle de Gauss, c'est la méthode de Newton-Cotes (Trapèze et simpson). Dans un premier temps, nous présentons les deux méthodes MC et Gauss et leurs formules d'intégration à n dimension. Nous réaliserons par la suite le calcul sur un exemple concret d'une intégrale multidimensionnelle dans l'objectif de comparer les deux méthodes.

2.2 Intégration de Gauss-Legendre

La quadrature de Gauss-Legendre est une méthode d'intégration puissante qui utilise les nœuds des polynômes de Legendre dans l'intervalle $[-1, 1]$. Elle est donnée par la formule à $p + 1$ nœuds :

$$\int_{-1}^1 f(x)dx = \sum_{j=0}^p w_j f(x_j) \quad (2.1)$$

Où w_j sont les poids de Gauss-Legendre et x_j les nœuds du polynôme de Legendre. Cette formule peut se généraliser à n'importe quelle intervalle $[\alpha, \beta]$ en utilisant la transformation linéaire :

$$x = \frac{\beta - \alpha}{2}t + \frac{\alpha + \beta}{2}$$

On obtient alors

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx = \frac{\beta - \alpha}{2} \sum_{j=0}^p \omega_j f\left(\frac{\beta - \alpha}{2}x_j + \frac{\alpha + \beta}{2}\right) \quad (2.2)$$

2.2.1 Formules de Gauss-Legendre à 2 nœuds à une dimension

Pour limiter la lourdeur des calculs, nous avons utilisé dans notre simulation deux nœuds de Legendre ($p = 1$). La formule de Gauss devient alors :

$$\int_{\alpha}^{\beta} f(x)dx \simeq \frac{\beta - \alpha}{2} \sum_{j=0}^1 \omega_j f\left(\frac{\beta - \alpha}{2}x_j + \frac{\alpha + \beta}{2}\right) \quad (2.3)$$

Avec : $w_0 = 1, w_1 = 1, x_0 = -1/\sqrt{3}, x_1 = 1/\sqrt{3}$

Avec ces notations, la formule de Gauss à une dimension avec deux nœuds et m subdivisions s'écrit :

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2m} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^1 f\left(a + \frac{h}{2}(x_j + 2i + 1)\right) \quad (2.4)$$

Formule de l'erreur

Pour une intégration de Gauss-Legendre à $p + 1$ nœuds et avec m subdivisions, si \mathcal{P} est le polynôme qui interpole ces nœuds, alors l'erreur de la méthode est donnée par l'expression (voir [13] et [14]) :

$$\mathcal{R}_1 = \frac{(b-a)^{2p+3}}{2^{2p+3}(2p+2)!} \frac{f^{(2p+2)}(\eta)}{m^{2p+2}} \int_{-1}^1 \mathcal{P}_{p+1}^2(x)dx \quad (2.5)$$

où η est un nombre inconnu appartenant à l'intervalle $[-1, 1]$. Pour 2 nœuds $p = 1$, le calcul permet de simplifier l'expression de l'erreur à :

$$\mathcal{R}_1 = \frac{(b-a)^5}{4320} \frac{f^{(4)}(\eta)}{m^4} \quad (2.6)$$

2.2.2 Formules de Gauss-Legendre à 2 nœuds à n dimension

à 2 dimension il est aisé de généraliser la formule à :

$$\int_a^b \int_a^b f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \simeq \left(\frac{b-a}{2m}\right)^2 \sum_{i_1=0}^{m-1} \sum_{i_2=0}^{m-1} \sum_{j_1=0}^1 \sum_{j_2=0}^1 f\left(a + \frac{h}{2}(x_{j_1} + 2i_1 + 1), a + \frac{h}{2}(x_{j_2} + 2i_2 + 1)\right) \quad (2.7)$$

et dans le cas d'une dimension $n \geq 2$ la formule se généralise à :

$$\iiint f(\vec{r})dv \simeq \left(\frac{b-a}{2m}\right)^n \left(\sum_{i_1=0}^{m-1} \cdots \sum_{i_n=0}^{m-1}\right) \left(\sum_{j_1=0}^1 \cdots \sum_{j_n=0}^1\right) f\left(a + \frac{h}{2}(x_{j_1} + 2i_1 + 1), \dots, a + \frac{h}{2}(x_{j_n} + 2i_n + 1)\right) \quad (2.8)$$

Ici sur chaque axe d'une dimension quelconque on utilise 2 nœuds de Legendre dans chaque subdivision. Pour la formule à n dimensions, il n'existe pas de forme analytique simple pour l'erreur de la méthode de Gauss.

2.3 Formules d'intégration Monte Carlo

2.3.1 Principe de la méthode

La méthode d'intégration Monte Carlo exploite la propriété de l'espérance mathématique d'une fonction (ou valeur moyenne) [15]. Comme on a vu au chapitre 1 (formule 1.8), si X est une variable aléatoire distribuée selon une densité de probabilité $\rho(x)$ alors l'espérance de la variable aléatoire $Y = f(X)$ est donnée par l'intégrale :

$$E[f(x)] = \langle f(x) \rangle = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \quad (2.9)$$

Ainsi, l'utilisation de la méthode Monte Carlo exige de mettre l'intégrale à calculer sous forme d'une espérance comme dans l'équation 2.9. Ceci permet alors d'approximer l'intégrale par l'estimateur de l'espérance. Selon la loi des grands nombres, avec N tirages de la variable aléatoire X , cet estimateur est donné par:

$$E[f(x)] = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i) = \bar{Y} \quad (2.10)$$

Appelée aussi moyenne arithmétique de Y . Ainsi un choix adéquat de la distribution de tirage $\rho(x)$ permet d'estimer l'intégrale.

Pour estimer statistiquement l'erreur de l'approximation 2.10, on utilise la variance de l'intégrale qui dépend de la variance de la distribution de $Y = f(X)$. Cette dernière est donnée par la formule mathématique :

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

Le calcul de cette variance se base lui aussi sur l'utilisation d'un estimateur sur l'échantillon des N tirages aléatoires et dépend évidemment de la nature de la fonction de distribution $\rho(x)$. Cet estimateur est donné par [15] :

$$Var[f(x)] = \sigma^2[Y] \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2 = \overline{(Y_i - \bar{Y})^2} \quad \text{avec : } Y_i = f(X_i) \quad (2.11)$$

Nous détaillons par la suite le cas d'un tirage uniforme et non-uniforme.

2.3.2 Intégration Monte Carlo avec échantillonnage uniforme

Formules MC à une dimension

Considérons l'intégrale à une dimension :

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

Si la densité de probabilité $\rho(x)$ est une fonction à une dimension constante dans l'intervalle $[a, b]$, alors elle s'écrit après normalisation :

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & x \in [a, b] \\ 0, & x \notin [a, b] \end{cases}, \quad \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1$$

L'espérance de $Y = f(X)$, où X est une variable aléatoire distribuée selon $\rho(x)$, devient alors :

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

et l'intégrale de f à une dimension peut être approximée par :

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx \simeq \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i) = (b-a)\bar{Y}, \quad Y = f(X)$$

La variance de I_1 est :

$$\begin{aligned} \text{Var}(I_1) &\simeq \text{Var}\left(\frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i)\right) = \left(\frac{b-a}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^N \text{Var}(f(X_i)) \\ &= \left(\frac{b-a}{N}\right)^2 N \text{Var}(f(x)) = (b-a)^2 \frac{\text{Var}(f)}{N} \end{aligned}$$

C'est à dire d'après 2.11

$$\sigma^2(I_1) \simeq \left(\frac{b-a}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2 \quad (2.12)$$

et l'écart-type de la formule d'intégration est donné en fonction de l'écart-type de la fonction par :

$$\sigma(I_1) = (b-a) \frac{\sigma(Y)}{\sqrt{N}} \quad (2.13)$$

On voit que l'erreur d'intégration est proportionnelle à la longueur de l'intervalle et inversement proportionnelle à \sqrt{N} , l'erreur décroît donc avec l'augmentation de la taille N de l'échantillon, et croît avec la longueur de l'intervalle d'intégration.

Formules MC à n dimensions

Considérons l'intégrale à n dimensions sur un domaine D :

$$I_n = \int_D f(\vec{r}) dv, \quad \vec{r} = (x_1, \dots, x_n)$$

Si la distribution $\rho(x)$ est uniforme sur le domaine cubique $D = ([a, b], \dots, [a, b])$ de volume $V = (b - a)^n$, on peut l'écrire après normalisation :

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{(b-a)^n}, & \vec{r} \in ([a, b], \dots, [a, b]) \\ 0, & \vec{r} \notin ([a, b], \dots, [a, b]) \end{cases}, \quad \int_{R^n} \rho(\vec{r}) dv = \int_a^b \cdots \int_a^b \rho(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n = 1$$

L'espérance est alors :

$$E[f(x)] \simeq \frac{1}{(b-a)^n} \int_D f(\vec{r}) dv \quad \Rightarrow \quad \int_D f(\vec{r}) dv = (b-a)^n E[f(\vec{r})]$$

et l'intégrale de f à n une dimension peut être approximée par :

$$I_n = \int_D f(\vec{r}) dv \simeq \frac{(b-a)^n}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{r}_i) = V\bar{Y}, \quad Y = f(\vec{r}) \quad (2.14)$$

Variance de I_n :

$$\begin{aligned} Var(I_n) &\simeq Var\left(\frac{(b-a)^n}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{r}_i)\right) = \left(\frac{(b-a)^n}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^N Var(f(\vec{r}_i)) \\ &= \left(\frac{(b-a)^n}{N}\right)^2 N Var(f(\vec{r})) = V^2 \frac{Var(f)}{N} \\ \sigma^2(I_n) &\simeq \left[\frac{(b-a)^n}{N}\right]^2 \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

et

$$\sigma(I_n) = V \frac{\sigma(Y)}{\sqrt{N}} \quad (2.16)$$

Qui est toujours inversement proportionnelle à \sqrt{N} , mais proportionnelle au volume du domaine d'intégration.

2.3.3 Intégration Monte Carlo avec échantillonnage non-uniforme

Formules MC à une dimension

Comme on déjà vu dans la section 2.3.1, pour une distribution $\rho(x)$ quelconque, la formule d'intégration de Monte Carlo à une dimension est donné par :

$$I_1 = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(X_i) = \bar{Y} \quad (2.17)$$

L'erreur statistique ou variance de I_1 se calcul aisément :

$$\begin{aligned} Var(I_1) &\simeq Var\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N f(x_i)\right) = \left(\frac{1}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^N Var(f(x_i)) = \left(\frac{1}{N}\right)^2 NVar(f(x)) = \frac{Var(f)}{N} \\ Var(I_1) &\simeq \left(\frac{1}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2 \end{aligned} \quad (2.18)$$

et l'écart type :

$$\sigma(I_1) = \frac{\sigma(Y)}{\sqrt{N}} \quad (2.19)$$

Formules MC à n dimension

Dans ce cas l'intégrale est de la forme :

$$I_n = \int_D \rho(\vec{r}) f(\vec{r}) dv = E[f(x)]$$

et son estimation est donnée par :

$$I_n = \int_D \rho(\vec{r}) f(\vec{r}) dv \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{r}_i) = \bar{Y}, \quad Y = f(\vec{r}) \quad (2.20)$$

Variance de I_n :

$$\begin{aligned} Var(I_n) &\simeq Var\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^N f(\vec{r}_i)\right) = \left(\frac{1}{N}\right)^2 \sum_{i=1}^N Var(f(\vec{r}_i)) = \left(\frac{1}{N}\right)^2 NVar(f(\vec{r})) = \frac{Var(f)}{N} \\ \sigma^2(I_n) &\simeq \left[\frac{1}{N}\right]^2 \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2 \end{aligned} \quad (2.21)$$

et son écart-type :

$$\sigma(I_n) = \frac{\sigma(Y)}{\sqrt{N}} \quad (2.22)$$

2.3.4 Intégration Monte Carlo avec échantillonnage préférentiel (réduction de la variance)

Pour améliorer la précision des méthodes d'intégration de Monte Carlo on utilise des techniques de réduction de la variance [1], [15]. Le but est de réduire l'erreur en réduisant l'écart-type (ou la variance) de l'intégrale. L'idée générale de ces méthodes est de donner une autre représentation de l'espérance $E(Y)$ sous forme d'espérance d'une autre variable aléatoire Z , tout en ayant $E(Y) = E(Z)$ mais avec une variance réduite $Var(Z) < Var(Y)$. L'une de ces méthodes est l'échantillonnage préférentiel (MCEP) qui permet de réduire significativement la variance. En effet, en choisissant des échantillons distribués selon une densité de probabilité $\rho(x)$ qui a une forme proche de la fonction $f(x)$ on peut réduire la variance de l'intégrale.

Formules MC à une dimension

Considérons une fonction $g(x)$ proche de $f(x)$ sur l'intervalle $[a, b]$ et choisissons-la comme densité de probabilité de la variable aléatoire X . $g(x)$ doit être normalisée et doit posséder une forme similaire à $f(x)$ de telle sorte que le rapport $\frac{f(x)}{g(x)}$ reste sensiblement constant (varie peu) sur l'intervalle $[a, b]$

$$g(x) \simeq f(x), \quad \rho(x) = g(x), \quad \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = 1$$

Calculons l'espérance de la fonction rapport $\frac{f(x)}{g(x)}$:

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

Et donc en utilisant l'estimateur on obtien l'approximation MCEP :

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{g(x_i)} = \overline{\mathcal{Y}}, \quad \mathcal{Y} = \frac{f(x)}{g(x)} \quad (2.23)$$

Pour la variance de I_1

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

$$\sigma^2(I_1) \simeq \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (\mathcal{Y}_i - \overline{\mathcal{Y}})^2, \quad \mathcal{Y}_i = \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \quad (2.24)$$

et pour l'écart-type :

$$\sigma(I_1) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma(\mathcal{Y}) \quad (2.25)$$

Formules MC à n dimension

De même, nous choisissons une distribution $\rho(\vec{r}) = g(\vec{r})$ avec $g(\vec{r})$ proche de $f(\vec{r})$ sur $D = [a, b]^n$ (i.e. $f/g \simeq Cte$) . On obtient alors la même formule l'approximation :

$$I_n = \int_D f(\vec{r}) dv \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(\vec{r}_i)}{g(\vec{r}_i)} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{Y}_i = \overline{\mathcal{Y}}, \quad \mathcal{Y}_i = \frac{f(\vec{r}_i)}{g(\vec{r}_i)} \quad (2.26)$$

Variance de I_n

$$Var(I_n) \simeq Var \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathcal{Y}_i \right) = \left(\frac{1}{N} \right)^2 \sum_{i=1}^N Var(\mathcal{Y}_i) = \frac{1}{N} Var(\mathcal{Y})$$

$$\sigma^2(I_n) \simeq \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (\mathcal{Y}_i - \overline{\mathcal{Y}})^2 \quad (2.27)$$

et l'écart-type:

$$\sigma(I_n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma(\mathcal{Y}) \quad (2.28)$$

2.4 Étude comparative MC vs Gauss

Nous présentons ici un exemple concret de calcul d'une intégrale multidimensionnelle avec des dimension $n = 3, 6, 9,$ et 12 en utilisant les deux techniques d'intégration : Gauss-Legendre avec deux nœuds et Monte-Carlo avec échantillonnage préférentiel (MCEP). On présentera ensuite une comparaison entre les deux méthodes. Le calcul a été réalisé à l'aide du logiciel Maple et le choix de s'arrêter à la dimension $n = 12$ est dicté par les capacités informatiques en temps de calcul à notre disposition.

2.4.1 Calcul d'une intégrale multidimensionnelle

Comme exemple d'application, considérons la fonction $f(\vec{r})$ à n variables x_1, \dots, x_n définie sur le domaine cubique n -dimensionnel $V = [0, 1/2]^n$ par :

$$f(\vec{r}) = e^{-r^2} = e^{-(x_1^2 + \dots + x_n^2)} = \prod_{k=1}^n e^{-x_k^2} \quad (2.29)$$

le but est de calculer numériquement l'intégrale de f sur le domaine V

$$I_n = \iiint_V f(\vec{r}) dv = \int_0^{1/2} \dots \int_0^{1/2} e^{-(x_1^2 + \dots + x_n^2)} dx_1 \dots dx_n \quad (2.30)$$

Le choix d'une fonction séparable est volontaire afin de pouvoir calculer sa valeur exacte et la comparer aux estimations numériques. Cette valeur exacte est :

$$I = \left(\int_0^{1/2} e^{-x^2} dx \right)^n = \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf} \left(\frac{1}{2} \right) \right]^n = 0.4612810064^n \quad (2.31)$$

En utilisant le logiciel de simulation et de calcul formel "Maple" nous avons calculé numériquement l'intégrale I_n par les deux méthodes Gauss et Monte-Carlo pour une large gamme des valeurs du nombre N de points d'intégration (les points (x_1, \dots, x_n)) et pour 4 valeurs de la dimension $n = 3, 6, 9,$ et 12 .

Pour la méthode déterministe de Gauss, ce nombre N dépend du nombre de subdivisions m de l'intervalle $[0, 1/2]$ sur chaque axe. Il est aisé de déduire à partir de la formule à deux nœuds 2.8 que N vau :

$$N = (2m)^n = e^{n \ln(2m)} \quad (2.32)$$

L'estimation numérique de l'intégrale I_n se fait alors par la formule de Gauss 2.8.

Pour la méthode MC avec échantillonnage préférentiel (MCEP), la fonction $g(x)$ similaire à $f(x)$ utilisée pour la génération de l'échantillon des nombres aléatoires est le polynôme représentant le développement de Taylor de f à l'ordre 2 au voisinage de $x = 0$ et normalisée sur $[0, 1/2]$. Ce développement limité normalisé est donné à une dimension par :

$$g(x) = \frac{24}{11}(1 - x^2) \quad (2.33)$$

et à n dimensions par :

$$g(\vec{r}) = \left(\frac{24}{11}\right)^n \prod_{k=1}^n (1 - x_k^2) \quad (2.34)$$

Nous avons donc générer notre échantillon des N points MC selon la distribution n -dimensionnelle séparable 2.34 et utiliser la formule d'intégrations MCEP 2.26 pour approximer l'intégrale I_n .

Sur les figures ci-dessous nous avons tracé f et g (multipliée par une constante) en dimension $n = 1$ et $n = 2$. Les figures montrent que les fonctions ont des formes assez proches de sorte que le rapport f/g varie peu sur $[0, 1/2]$

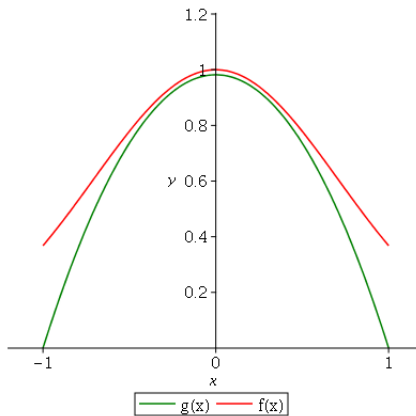


Figure 2.1: Représentation graphique de la fonction $f(\vec{r}), g(\vec{r})$ à $n = 1$ dimension [12]

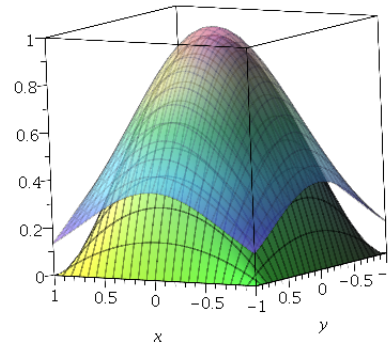


Figure 2.2: Représentation graphique de la fonction $f(\vec{r}), g(\vec{r})$ à $n = 2$ dimensions [12]

2.4.2 Résultats et discussion

Étant donné que nous connaissons la valeur exacte de l'intégrale, nous avons calculé l'erreur relative donnée par :

$$Erp(N) = \frac{I_n - I}{I_n} \quad (2.35)$$

et ce pour chacune des 2 méthodes et pour les 4 dimensions. L'évolution de cette erreur relative (en pourcentage) en fonction du nombre de points d'intégration N est représentée dans les tableaux et les courbes suivantes :

N	8000	64000	216000	512000	1728000	4096000	8000000	13824000	21952000
Erp(Gauss)	$3.6 \cdot 10^{-6}$	$2.3 \cdot 10^{-7}$	$4.8 \cdot 10^{-8}$	$1.4 \cdot 10^{-8}$	$2.7 \cdot 10^{-9}$	$8.7 \cdot 10^{-10}$	$3.5 \cdot 10^{-10}$	$1.69 \cdot 10^{-10}$	$9.15 \cdot 10^{-10}$
Erp(MC)	0,012633	0,004066	0,001536	0,001300	0,001830	0,000433	0,000333	0,000276	0,000180

Table 2.1: Valeurs des erreurs relatives Erp en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 3$

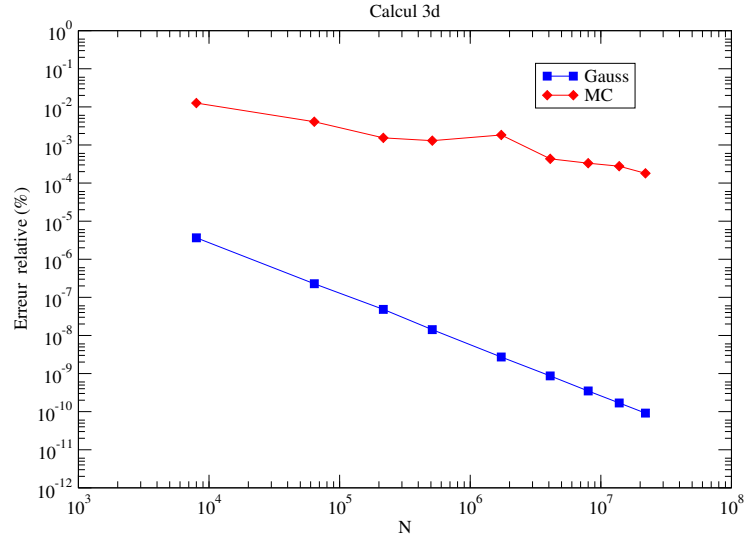


Figure 2.3: Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 3$

N	64	4096	46656	262144	1000000	2985984	7529536	7529536
Erp(Gauss)	0,0784100	0,0046500	0,0009100	0,0002800	0,0001100	0,0000560	0,0000305	0,0000170
Erp(MC)	0,253600	0,053633	0,003800	0,002800	0,001533	0,001766	0,001533	0,000049

Table 2.2: Valeurs des erreurs relatives Erp en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 6$

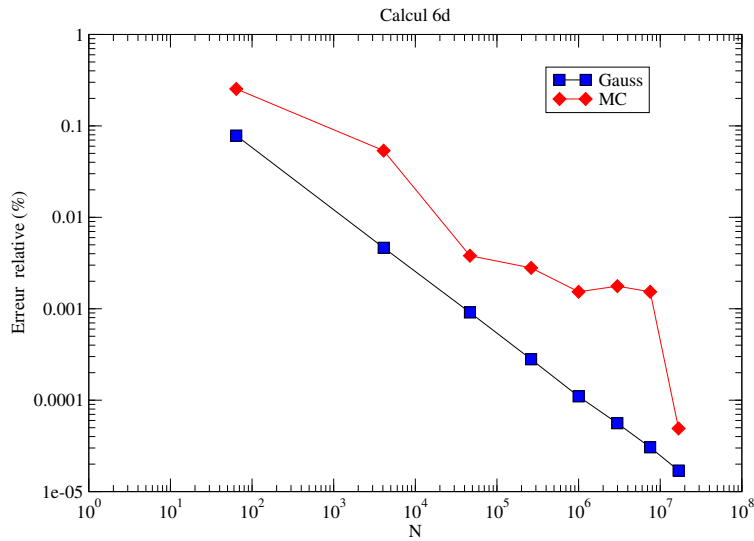


Figure 2.4: Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 6$

N	512	10000	262144	1000000	10077696
Erp(Gauss)	0,11759		0,00698		0,001360
Erp(MC)	0,147860	0,032110	0,002806	0,002090	0,000200

Table 2.3: Valeurs des erreurs relatives Erp en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 9$

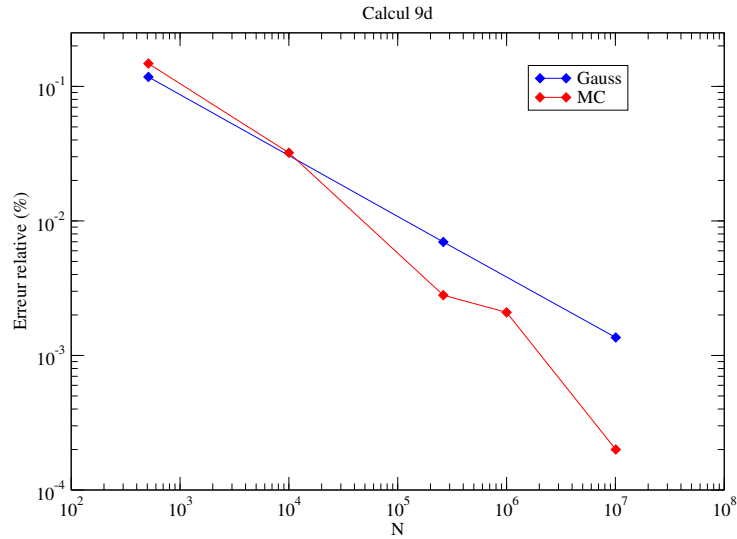


Figure 2.5: Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 9$

N	4096	100000	1000000	16777216
Erp(Gauss)	0,15676			0,00931
Erp(MC)	0,0103396	0,004470	0,003384	0,000235

Table 2.4: Valeurs des erreurs relatives Erp en (%) pour les méthodes de Gauss et MC pour le cas de la dimension $n = 12$

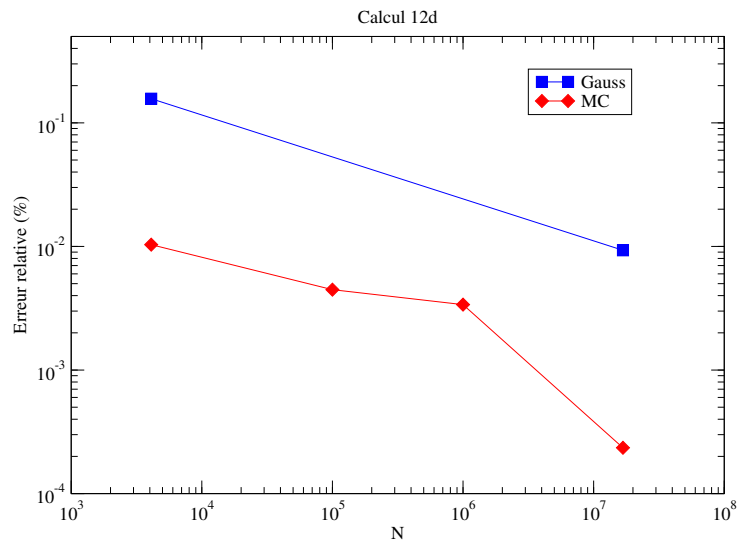


Figure 2.6: Erreur relative Erp (%) en fonction du nombre de points d'intégration N pour la dimension $n = 12$

Discussion des résultats

D'après les courbes précédentes nous remarquons que l'erreur relative décroît avec l'augmentation du nombre de points d'intégration N ce qui est tout à fait normal. La précision augmente avec le nombre de points pour toutes les méthodes. La technique Monte-Carlo avec échantillonnage préférentiel (MCEP) devient plus précise que la méthode de Gauss à partir de la dimension $n = 9$ lorsque le nombre de points d'intégration dépasse $N = 10^4$. On observe par ailleurs qu'à partir de la dimension $n = 12$ la méthode MCEP est un ordre de grandeur plus précise que celle de Gauss. Notons enfin que les fluctuations de l'erreur pour la méthode MC est dues au caractère stochastique de cette méthode.

On remarque aussi que l'évolution de l'erreur pour la méthode déterministe de Gauss est linéaire (en échelle logarithmique). Pour expliquer cela revenons à la formule d'erreur de Gauss à deux nœuds 2.6

$$\mathcal{R}_1 = \frac{(b-a)^5 f^{(4)}(\eta)}{4320 m^4} = C m^{-4} \quad (2.36)$$

Si I_n est l'intégrale totale à n dimensions on a :

$$I_n = \int_V e^{-r^2} dv = \prod_{k=1}^n \int_0^{1/2} e^{-x_k^2} dx_k = \prod_{k=1}^n I_k$$

Notons $\mathcal{R}_n = \delta I_n$ l'erreur de l'intégrale, on a :

$$\mathcal{R}_n = \delta I_n = \delta \prod_{k=1}^n I_k$$

L'erreur relative qui est donnée par $Erp = \frac{\delta I_n}{I_n}$ devient alors :

$$Erp = \frac{\delta I_n}{I_n} = \sum_{k=1}^n \frac{\delta I_k}{I_k} = \sum_{k=1}^n \frac{\mathcal{R}_{1k}}{I_k} = \sum_{k=1}^n \frac{C m^{-4}}{I_k} = \lambda n m^{-4}$$

Nos graphes étant tracés en échelle log, si on calcul $\log Erp$ on obtient

$$\log Erp = \log(\lambda n) - 4 \log m$$

Or on sait que le nombre de points d'intégration N est donné en fonction de la dimension n par : $N = (2m)^n$ il en résulte

$$\log N = n \log 2m = n(\log 2 + \log m) \Rightarrow \log m = \frac{1}{n} \log N - \log 2$$

En remplaçant dans la formule précédente on obtient finalement une relation linéaire entre $\log Erp$ et $\log N$:

$$\log Erp = \log(\lambda n) - \frac{4}{n} \log N + 4 \log 2 = \log(\lambda n) + 4 \log 2 - \frac{4}{n} \log N$$

$$\Rightarrow \log \text{Erp} = \beta - \alpha \log N$$

Pour terminer, notons que l'étude comparative précédente entre MC et Newton-Cotes [12] avait montrer que la méthode MC devenait avantageuse dès la dimension $n = 7$ (pour Simpson).

Problème de la dimensionalité avec les méthodes déterministes

Ce problème est rencontré avec toutes méthodes d'intégration de type déterministe. Il s'agit de l'impossibilité d'effectuer des calculs lorsque la dimension du problème atteint un certain degré. En effet d'après la formule 2.32, on sait que le nombre de points d'intégration N pour la formule de Gauss est donné en fonction du nombres de subdivision m et la dimension n par

$$N = (2m)^n = e^{n \ln(2m)}$$

On voit bien que N augmente exponentiellement avec la dimension n , pour illustrer cela nous avons tracé sur la figure suivante N en fonction de la dimension n pour trois valeurs de subdivision de l'intervalle d'intégration sur chaque axe: $m = 1, 2, 5$.

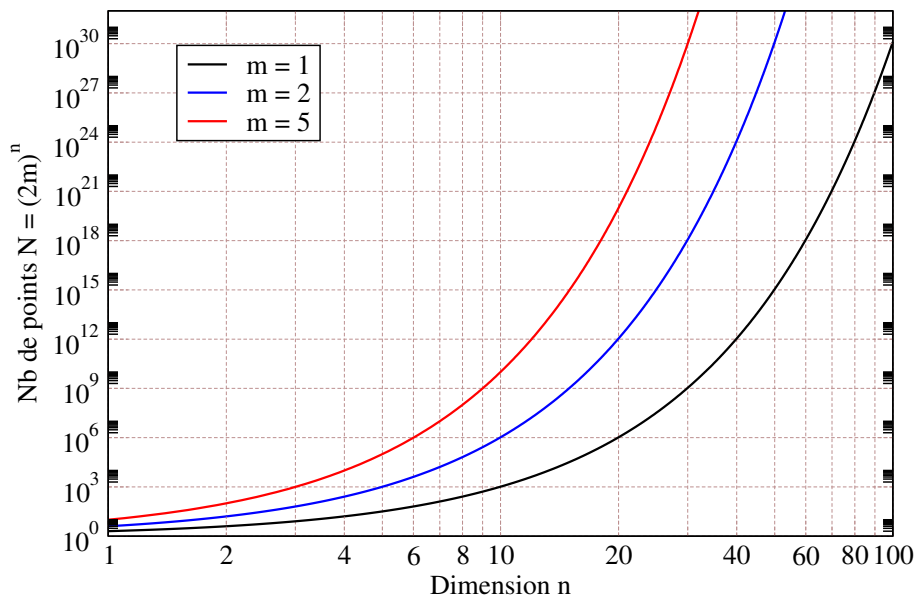


Figure 2.7: Nombre de points d'intégration de Gauss en fonction de la dimension de l'intégrale n pour trois valeurs de subdivision des axes : $m = 1, 2$ et 5 (en échelle log)

A titre d'exemple pour 5 subdivision ($m = 5$), on atteint déjà un nombre très grand de points d'intégration $N = 10^{20}$ ce qui nécessite un temps de calculs très long. Si on diminue le nombre de subdivision le problème persiste à plus haute dimension, par-exemple pour $m = 2$ on atteint $N = 10^{20}$ a la dimension $n \simeq 32$, et même si ou on n'utilise aucune

subdivision ($m = 1$), le problème n'est pas éliminé car on aura toujours $N = 2^n = e^{n \ln(2)}$ qui est toujours une variation exponentielle, dans ce cas le nombre $N = 10^{20}$ est atteint à la dimension $n \simeq 65$.

Par conséquent, ce problème appelé problème (ou malédiction) de la dimensionnalité est un véritable obstacle inhérent aux méthodes déterministes et qui handicape l'utilisation de ces méthodes pour le calcul d'intégrales à haute dimensions. Généralement à partir de quelque dizaines de dimensions, il est préférable d'utiliser d'autres méthodes comme Monte Carlo.

Chapitre 3

Intégration Monte Carlo : Atome d'Hélium

3.1 Introduction

Les méthodes de Monte Carlo, et spécialement l'intégration MC, sont de puissantes méthodes stochastiques qui trouvent d'innombrables applications dans le calcul de certaines propriétés de l'état fondamental des systèmes quantiques. Ils ont connus un franc succès dans un grand nombre de problèmes décrits par un hamiltonien de type Schrödinger [16], [17]. Avec le développement fulgurant de l'informatique et des super-ordinateurs à partir de la fin du siècle dernier, les méthodes Monte Carlo se sont imposé comme une alternative remarquable notamment dans la résolution des problèmes à N corps (lorsque N est relativement grand) en mécanique quantique, en physique statistique et en physique nucléaire [18]. Pour de petits systèmes tel que l'atome d'hélium [19] et les molécules isolées, les méthodes MC ont produit des solutions arbitrairement précises de l'équation de Schrödinger, comme il existe des solutions très précises pour des systèmes à grand nombre de degré de liberté.

Dans ce chapitre et afin de démontrer l'utilité de l'intégration Monte Carlo dans des problèmes physiques à plusieurs corps, nous allons estimer numériquement par intégration Monte Carlo deux quantités relatives à l'atome d'hélium : Le potentiel moyen et la distance moyenne entre les deux électrons de l'atome dans son état fondamental puis comparer nos calculs aux valeurs exactes. Pour se faire nous avons besoin de la fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ de l'He. Sachant que l'He (deuxième élément du tableau périodique) est le premier exemple d'un problème de mécanique quantique qui ne peut pas être résolu exactement, nous allons utiliser une fonction d'onde approximative tiré d'un modèle simple qui est le modèle des électrons indépendants corrigé par un calcul variationnel.

3.2 Rappel théorique

L'atome d'hélium (*He*) a deux électrons liés à un noyau chargé positivement de charge $Z = 2e$.

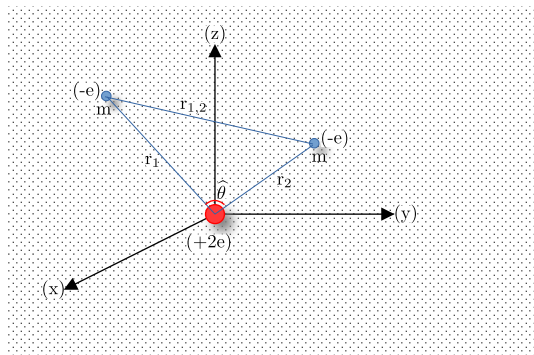


Figure 3.1: variables décrivant l'atome d'hélium

La valeur de l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hélium est :

$$E_0 = -79,02eV = -2,9040 \text{ Hartree} \quad (3.1)$$

Le Hartree fait partie du système des unités atomique, c'est une unité d'énergie égale à deux fois l'énergie de liaison de l'électron dans l'état fondamental de l'atome d'hydrogène.

$$1 \text{ Hartree} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = 27,21eV.$$

3.2.1 Équation de Schrödinger pour l'atome d'hélium

Pour des atomes à N électrons, il faut considérer l'énergie potentielle d'attraction électrons et noyau et l'énergie potentielle de répulsion électron-électron, il s'agit donc d'un problème à $(N + 1)$ corps. Dans notre cas, pour l'atome de l'hélium $N = 2$ (le noyau et deux (2) électrons)

L'équation de Schrödinger s'écrit, en choisissant l'origine sur le noyau immobile et en considérant sa masse infinie (ce qui élimine les coordonnées du noyau):[20]

$$H\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.2)$$

H étant l'hamiltonien du système :

$$H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

Le potentiel contient trois termes d'interaction coulombienne entre l'électron 1 et le noyau, l'électron 2 et le noyau et entre les deux électrons. On obtient alors l'équation :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\Delta_1 + \Delta_2] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \left[-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right] \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.3)$$

où :

- $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ et $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$ sont les vecteurs positions des deux électrons 1 et 2 respectivement.
- $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ est la distance entre les deux électrons.

L'expression du laplacien (termes des énergies cinétiques des électrons) en coordonnées cartésienne est donné par:

$$\Delta_i = \frac{\partial^2}{\partial^2 x_i} + \frac{\partial^2}{\partial^2 y_i} + \frac{\partial^2}{\partial^2 z_i}$$

et en coordonnées sphériques est donné par:

$$\Delta_i = \frac{1}{r_i^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r_i^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin\theta_i} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \left(\sin\theta_i \frac{\partial}{\partial \theta_i} \right) + \frac{1}{r_i^2 \sin^2\theta_i} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_i^2}$$

On observe cinq termes dont est constitué l'hamiltonien.

- $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_1$ et $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_2$: représentent respectivement les énergies cinétiques des électrons.
- $\left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_1}\right)$ et $\left(-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_2}\right)$: représentent respectivement les attractions nucléaires des électrons 1 et 2 par le noyau, termes négatifs.
- $\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}\right)$: représente la répulsion mutuelle des deux électrons

La fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ est une fonction de 6 variables, soit 3 coordonnées spatiales par électron.

3.2.2 Approximation des électrons indépendants

Le terme $\left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}\right)$ qui empêche une solution exacte de l'équation de Schrödinger explique en grande partie la complication de la théorie, en cherchant d'abord une approximation de l'état fondamental en l'absence de ce terme, on peut séparer les variables \vec{r}_1 et \vec{r}_2 pour réduire l'équation à deux problèmes indépendants (cas atome d'hydrogène) [20].

En utilisant les unités atomiques l'hamiltonien s'écrit:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}\right)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = E\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.4)$$

Si on néglige le terme d'interaction électron-électron $\frac{1}{r_{12}}$, l'équation devient une équation séparable:

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_1 - \frac{Z}{r_1} - \frac{1}{2}\Delta_2 - \frac{Z}{r_2}\right)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (E_1 + E_2)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (3.5)$$

$$(H_1 + H_2)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = (E_1 + E_2)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

La fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome se factorise, alors sachant que l'état fondamental d'un atome hydrogénoïde n'a pas de partie angulaire (elle est constante):

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) = C_1 e^{-Zr_1} C_2 e^{-Zr_2} \\ &\Rightarrow \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C e^{-Z(r_1+r_2)} \end{aligned}$$

ou C est une constante de normalisation.

L'énergie de l'état fondamentale ($n = 1$) serait alors égale à ($E = E_1 + E_2 = \frac{-2Z^2}{2} = -4 \text{ Hartree}$), par-apport à la valeur expérimentale de ($-2,90 \text{ Hartree}$), ce qui confirme une erreur importante lorsque on néglige la répulsion entre les deux électrons, et pour

améliorer le résultat on introduit un paramètre ajustable (α) tel que :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = C e^{-\alpha(r_1+r_2)} \quad (3.6)$$

Le paramètre α est alors déterminé par la méthode variationnelle.

3.2.3 Méthode variationnelle

Principe de la méthode: La méthode des variations (ou méthode variationnelle de Rayleigh-Ritz) en mécanique quantique est surtout connue comme procédure de calcul approchée de l'énergie de l'état fondamental E_0 d'un système stationnaire [21]. Considérons un hamiltonien H indépendant du temps, discret et non entièrement dégénéré. On a:

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (3.7)$$

tel que

$$E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_n \quad (3.8)$$

Les vecteurs propres $\{|\varphi_n\rangle\}$ de l'espace des états forment une base orthonormée associée aux énergies propres $\{E_n\}$. Tout ket $|\psi\rangle$ peut être développé sur la base de ces vecteurs :

$$|\psi\rangle = \sum_n a_n |\varphi_n\rangle \quad (3.9)$$

La valeur moyenne de l'énergie du système $\langle H \rangle$ dans l'état $|\psi\rangle$ est:

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_n |a_n|^2 E_n}{\sum_n |a_n|^2} \quad (3.10)$$

En vertu de l'hypothèse 3.8 il est aisé de démontrer que :

$$\langle E \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (3.11)$$

Cette formule est l'équation maîtresse de la théorie des variations. Elle stipule que la valeur moyenne de H pour tout état $|\psi\rangle$ constitue une valeur approchée par excès de l'énergie du niveau fondamental.

Ainsi, si nous choisissons une fonction d'essai de l'état fondamental qui dépend de un ou plusieurs paramètres variationnels α :

$$\psi_f = \psi_f(\alpha), \quad E(\alpha) = \frac{\langle \psi_f | H | \psi_f \rangle}{\langle \psi_f | \psi_f \rangle} = \langle H \rangle(\alpha) \quad (3.12)$$

Les paramètres variationnels α qui minimisent l'énergie (3.12) doivent donc vérifier des équations de type :

$$\frac{\partial E(\alpha)}{\partial \alpha} = 0 \quad (3.13)$$

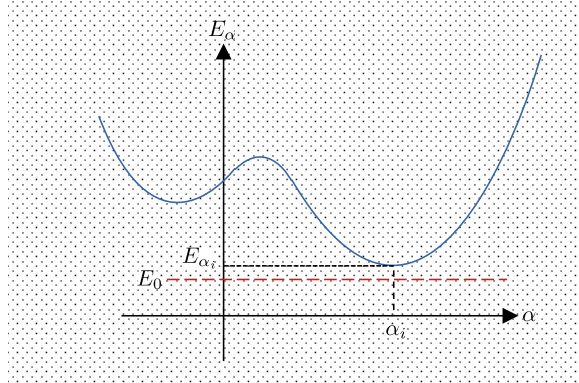


Figure 3.2: Principe de la méthode variationnelle.

3.2.4 Cas de l'atome d'He

Le calcul variationnel pour l'atome d'He avec la fonction d'onde 3.6 permet d'estimer le paramètre α à [13] :

$$\alpha = Z - \frac{5}{16} = \frac{27}{16} = 1.6875 \quad (3.14)$$

C'est cette valeur que l'on va utiliser dans notre application dans la section suivante.

Pour l'énergie minimale correspondante, elle vaut maintenant:

$$\tilde{E} = - \left(Z - \frac{5}{16} \right)^2 = -2,84765 \text{ hartree} \quad (3.15)$$

3.3 Application de l'intégration MC à l'atome d'He

Notre objectif est de calculer numériquement par intégration Monte-Carlo deux grandeurs physiques relatives à l'atome d'hélium dans son état fondamental. La première est le potentiel moyen inter-électronique entre les deux électrons de l'atome et la seconde est la distance moyenne entre ces électrons. Notons que les valeurs exactes de ces quantités sont respectivement [13]:

$$\langle V_{12} \rangle = 1.0546 \text{ Hartree}, \quad \langle r_{12} \rangle = 1.2953 \text{ Rayon de Bohr}$$

Soit $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ la fonction d'onde totale de l'atome et $O_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ la grandeur à calculer, alors il va falloir estimer numériquement une intégrale multi-dimensionnelle du type :

$$\langle O_{12} \rangle = \iiint \psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2) O_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dv_1 dv_2 \quad (3.16)$$

Dans le cadre de l'approximation des électrons indépendants que nous avons abordé plus haut, la fonction d'onde que l'on va utiliser pour nos calculs se factorise en deux fonctions à 1 électrons :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) \quad (3.17)$$

Avec

$$\psi_1(\vec{r}_1) = R_1(r_1)Y_{l_1 m_1}(\theta_1, \varphi_1), \quad \psi_2(\vec{r}_2) = R_2(r_2)Y_{l_2 m_2}(\theta_2, \varphi_2) \quad (3.18)$$

Dans l'état fondamental, nous avons $(l_1, m_1) = 0$ et $(l_2, m_2) = 0$ et

$$Y_{00}(\theta_1, \varphi_1) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_{00}(\theta_2, \varphi_2) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

Et d'après la section précédente, les parties radiales des fonctions d'ondes individuelles (non-normalisées) sont :

$$R_1(r_1) = c_1 e^{-\alpha r_1}, \quad R_2(r_2) = c_2 e^{-\alpha r_2} \quad (3.19)$$

La normalisation de la fonction d'onde se fait en normalisant les fonctions d'ondes individuelles par le biais de leurs parties radiales

$$\begin{aligned} \iiint |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 dv_1 dv_2 &= \iiint |\psi(\vec{r}_1)|^2 dv_1 \iiint |\psi(\vec{r}_2)|^2 dv_2 = 1 \\ \iiint |\psi(\vec{r}_1)|^2 dv_1 = 1 &\Rightarrow \int_0^\infty r_1^2 R_1^2(r_1) dr_1 \Rightarrow c_1 = 2\alpha^{3/2} \\ \iiint |\psi(\vec{r}_2)|^2 dv_2 = 1 &\Rightarrow \int_0^\infty r_2^2 R_2^2(r_2) dr_2 \Rightarrow c_2 = 2\alpha^{3/2} \end{aligned}$$

Les fonctions d'ondes individuelles normalisées s'écrivent finalement :

$$\psi_1(\vec{r}_1) = R_1(1)Y_{00}(1) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}e^{-\alpha r_1} \quad (3.20)$$

$$\psi_2(\vec{r}_2) = R_2(2)Y_{00}(2) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}}\alpha^{3/2}e^{-\alpha r_2} \quad (3.21)$$

La fonction d'onde totale normalisée est alors :

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) = \frac{1}{\pi}\alpha^3 e^{-\alpha(r_1+r_2)} \quad (3.22)$$

et la densité de probabilité de présence :

$$|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = \frac{\alpha^6}{\pi^2} e^{-2\alpha(r_1+r_2)} \quad (3.23)$$

Finalement la valeur moyenne 3.16 à calculer s'écrit lorsque l'atome est dans son état fondamentale :

$$\langle O_{12} \rangle = \iiint \frac{\alpha^6}{\pi^2} e^{-2\alpha(r_1+r_2)} O_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dv_1 dv_2 \quad (3.24)$$

C'est ce type d'intégrale à 6 dimensions que nous allons calculer numériquement par intégration Monte Carlo. Nous allons pour cela utiliser deux approches : Intégration avec densité de probabilité uniforme et non-uniforme.

3.3.1 Calcul du potentiel inter-électronique moyen

Le potentiel inter-électronique est donnée dans le système d'unités atomiques par

$$V_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (3.25)$$

Sa valeur moyenne est d'après la formule 3.24 :

$$\langle V_{12} \rangle = \iiint \frac{|\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dv_1 dv_2 = \iiint \frac{\alpha^6 e^{-2\alpha(r_1+r_2)}}{\pi^2 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dv_1 dv_2 \quad (3.26)$$

Intégration MC avec densité uniforme

L'intégrale 3.26 est une intégrale à $n = 6$ dimensions de la forme :

$$I_6 = \iiint f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dv_1 dv_2 \quad (3.27)$$

Avec

$$f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\alpha^6 e^{-2\alpha(r_1+r_2)}}{\pi^2 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (3.28)$$

Comme on a vu au chapitre 2, la méthode d'intégration MC avec densité uniforme définie et normalisée sur un intervalle $[a, b]$ permet d'approximer cette intégrale par la formule :

$$\iiint f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dv_1 dv_2 \simeq \frac{(b-a)^n}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{r}_{1i}, \vec{r}_{2i}) \quad (3.29)$$

C'est à dire :

$$\langle V_{12} \rangle \simeq \frac{\alpha^6 (b-a)^n}{\pi^2 N} \sum_{i=1}^N \frac{e^{-2\alpha(r_{1i}+r_{2i})}}{|\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{2i}|} \quad (3.30)$$

Les N points d'intégration $(\vec{r}_{1i}, \vec{r}_{2i})$ doivent être générés uniformément dans le volume cubique 6-dimensionnel $[a, b]^6$

Intégration MC avec densité non-uniforme

Le module au carré de la fonction d'onde (densité de probabilité de présence équation (3.23)) de l'atome d'He peut être utilisée comme densité non-uniforme dans l'intégration Monte Carlo.

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\psi_2(\vec{r}_2)|^2 = \frac{\alpha^6}{\pi^2} e^{-2\alpha(r_1+r_2)}$$

de telle sorte que la valeur moyenne du potentiel 3.26 s'écrit :

$$\langle V_{12} \rangle = \iiint \rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) V_{12}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) dv_1 dv_2 = \iiint \frac{\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} dv_1 dv_2 \quad (3.31)$$

Cette intégrale peut être approximée par

$$\langle V_{12} \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N V_{12}(\vec{r}_{1i}, \vec{r}_{2i}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{2i}|} \quad (3.32)$$

Les N points d'intégration $(\vec{r}_{1i}, \vec{r}_{2i})$ doivent être générés selon la densité normalisée $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ 3.23 dans tout l'espace \mathbb{R}^6 . Cette densité peut être factorisée selon les variables indépendantes de chaque électron en deux densités radiales :

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \rho_1(\vec{r}_1)\rho_2(\vec{r}_2) = \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-2\alpha r_1} \times \frac{\alpha^3}{\pi} e^{-2\alpha r_2} \quad (3.33)$$

Ce qui revient à générer les N points dans les 2 sous espaces 3-dimensionnels selon les distributions ρ_1 et ρ_2 . Pour cela écrivons en coordonnées sphériques la probabilité de présence de l'électron 1 dP_1 dans le volume élémentaire $dv_1 = r_1^2 dr_1 d\Omega_1$, ($d\Omega_1 = \sin \theta_1 d\theta_1 d\varphi_1$ étant la partie angulaire) :

$$dP_1 = \rho_1 dv_1 = 4\alpha^3 r_1^2 e^{-2\alpha r_1} dr_1 \times \frac{1}{4\pi} d\Omega_1 = \rho_{1r} dr_1 \times \rho_{\Omega_1} d\Omega_1 \quad (3.34)$$

Donc la coordonnée radiale du point \vec{r}_1 est générée selon la distribution radiale $\rho_{1r} = 4\alpha^3 r_1^2 e^{-2\alpha r_1}$ avec $r_1 \in [0, \infty[$ et la coordonnée angulaire $\Omega_1 = (\theta_1, \varphi_1)$ est générée de façon isotrope dans l'espace. On a évidemment les relations de normalisation des densités :

$$\int_0^\infty \rho_{1r} dr_1 = 1, \quad \iint_{4\pi} \rho_{\Omega_1} d\Omega_1 = 1$$

On a des relations similaires pour l'électron 2.

3.3.2 Calcul de la distance inter-électronique moyenne

La valeur moyenne de la distance $r_{12} = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ entre les 2 électrons de l'atome d'He est donnée par :

$$\langle r_{12} \rangle = \iiint |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| dv_1 dv_2 = \iiint \frac{\alpha^6}{\pi^2} e^{-2\alpha(r_1+r_2)} |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| dv_1 dv_2 \quad (3.35)$$

Intégration MC avec densité uniforme

La formule d'intégration Monte Carlo pour la distance moyenne est :

$$\langle r_{12} \rangle \simeq \frac{\alpha^6 (b-a)^n}{\pi^2 N} \sum_{i=1}^N e^{-2\alpha(r_{1i}+r_{2i})} |\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{2i}| \quad (3.36)$$

De même que pour le cas du potentiel, l'échantillon des N points d'intégration $(\vec{r}_{1i}, \vec{r}_{2i})$ doivent être générés uniformément dans le volume cubique 6-dimensionnel $[a, b]^6$

Intégration MC avec densité non-uniforme

La méthode est similaire au cas du potentiel moyen, on utilise la fonction d'onde comme distribution non-uniforme des points d'intégration. La formule d' de Monte Carlo est alors donnée par :

$$\langle r_{12} \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N r_{12}(\vec{r}_{1i}, \vec{r}_{2i}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\vec{r}_{1i} - \vec{r}_{2i}| \quad (3.37)$$

Dans ce cas l'échantillon des N points d'intégration $(\vec{r}_{1i}, \vec{r}_{2i})$ est distribué selon la densité 3.23 dans l'espace \mathbb{R}^6 et est généré avec la même procédure que l'on a vu précédemment.

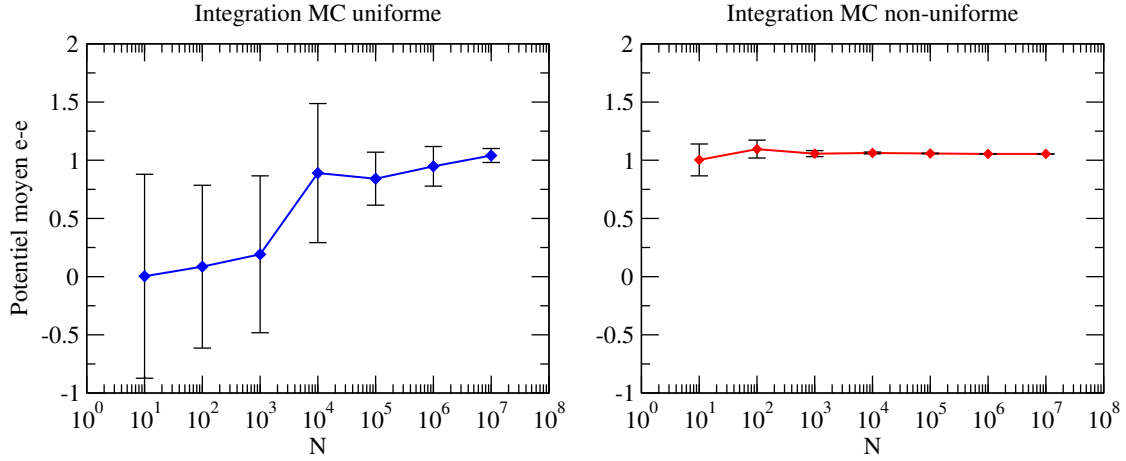
3.3.3 Résultats et discussion

Le calcul Monte Carlo des intégrales 6-dimensionnelles 3.26 et 3.35 a été effectué à l'aide d'un programme Maple de façon analogue au calcul effectué dans le chapitre 2. Maple possède des générateurs de nombres aléatoires robustes pour les cas uniformes et non-uniforme. Les résultats de nos calculs sont présentés dans les tableaux et figures ci-dessous en fonction de la taille de l'échantillon N et pour les deux types de distributions uniforme et non-uniforme.

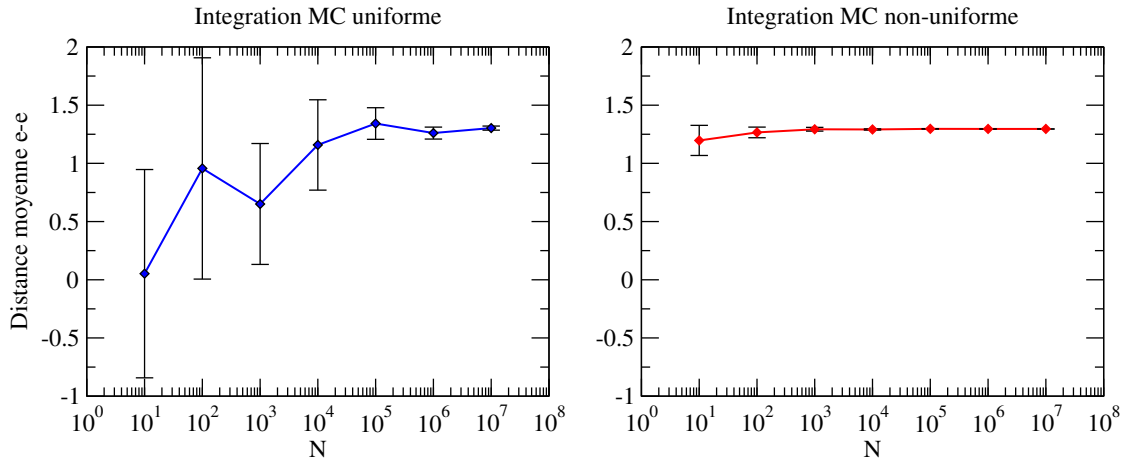
En plus des valeurs des potentiels et des distances moyennes (IMC dans les tableaux), on a aussi tracé les erreurs statistiques (Erp) de ces quantités données par les écarts-type (ou écarts quadratiques moyens).

L'intégration avec densité uniforme nécessite un intervalle d'intégration fini, celle-ci a été effectuée sur $[a, b] = [-4, 4]$ pour chacun des axes de \mathbb{R}^6 c'est à dire sur le domaine cubique $[-4, 4]^6$. Ce cut-off n'influe que très peu sur les résultats du calcul étant donné que la fonction e^{-x^2} est négligeable et décroît rapidement vers 0 à l'extérieur de l'intervalle $[-4, 4]$.

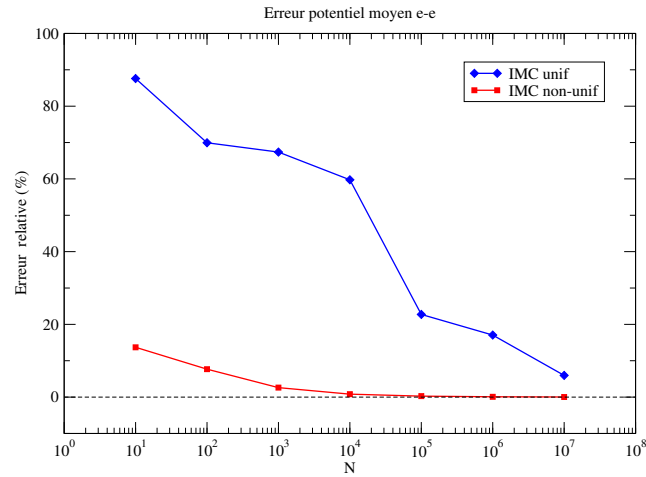
N	10	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶
IMC unif.	0,003246	0,085917	0,191965	0,889667	0,841569	0,947702
IMC non-unif.	1,003128	1,095841	1,056816	1,062829	1,058077	1,054371

Table 3.1: Valeurs de l'intégration MC pour le potentiel moyen $\langle V_{12} \rangle$ en (ua)Figure 3.3: Potentiel moyen e-e $\langle V_{12} \rangle$ avec barres d'erreurs en fonction de N (ua)

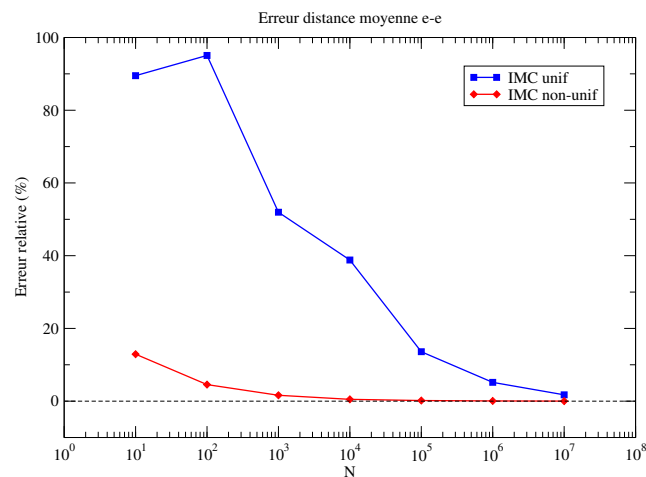
N	10	10 ²	10 ³	10 ⁴	10 ⁵	10 ⁶	10 ⁷
IMC unif.	0,052334	1,591987	0,650898	1,158300	1,342149	1,260126	1,302958
IMC non-unif.	1,197094	1,265814	1,293017	1,291160	1,296290	1,295578	1,295438

Table 3.2: Valeurs de l'intégration MC pour la distance moyenne $\langle r_{12} \rangle$ en (ua)Figure 3.4: Distance moyenne e-e $\langle r_{12} \rangle$ avec barres d'erreur en fonction de N (ua)

N	10	10^2	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7
Erp unif	13,6907	7,6785	2,6102	0,8055	0,2681	0,0827	0,0247
Erp non-unif	0,8759	0,6994	0,6737	0,5975	0,2273	0,1705	0,0597

Table 3.3: Erreur MC relative pour le potentiel moyen $\langle V_{12} \rangle$ en (%)Figure 3.5: Erreur relative du potentiel moyen e-e $\langle V_{12} \rangle$ en fonction de N

N	10	10^2	10^3	10^4	10^5	10^6	10^7
Erp unif	89,5034	95,0675	51,9517	38,8069	13,5945	5,1705	1,7349
Erp non unif	12,9055	4,5574	1,6165	0,5023	0,1595	0,0503	0,0171

Table 3.4: Erreur MC relative pour la distance moyenne $\langle r_{12} \rangle$ en (%)Figure 3.6: Erreur relative de la distance moyenne e-e $\langle r_{12} \rangle$ en fonction de N

Discussion des résultats : D'après les figures 3.4 on peut faire les remarques suivantes :

Pour le potentiel moyen $\langle V_{12} \rangle$, les deux méthodes d'intégration MC uniforme et non uniforme convergent vers la valeur exacte $\langle V_{12} \rangle = 1,0546$ Hartree. Mais on constate d'après les barres d'erreur que la méthode non-uniforme (avec une densité égale au module carré de la fonction d'onde $\psi(r_1, r_2)$) converge plus rapidement que la méthode uniforme.

Par exemple la méthode uniforme semble ne montrer un début de convergence qu'à partir de $N \sim 10^5$, elle fluctue beaucoup pour $N < 10^5$. Alors que pour la méthode non-uniforme, on a une convergence claire à partir de $N \sim 10^2$. Ce constat est confirmé par la figure de l'erreur 3.5.

Pour la distance moyenne entre les deux électrons, on peut faire la même observation, la méthode non-uniforme converge plus rapidement, ce qui est aussi confirmé par la figure de l'erreur 3.6.

Pour expliquer ce résultat, il faut revenir aux formules d'erreurs statistiques (variance) 2.22 et 2.16.

- $\sigma(I_n) = V \frac{\sigma(Y)}{\sqrt{N}}$, pour échantillonnage uniforme.
- $\sigma(I_n) = \frac{\sigma(Y)}{\sqrt{N}}$, pour échantillonnage non uniforme.

D'après ces formules, on voit que celle de la méthode uniforme est proportionnelle au volume V du domaine d'intégration. Dans notre cas ce volume vaut : $V = [4 - (-4)]^6 = 8^6$. Ce terme explique la lenteur de convergence dans le cas non uniforme. Il est difficile de diminuer l'influence de V car si on prend un petit intervalle on risque de négliger des parties importantes de la fonction.

La méthode MC nous a donc permis de retrouver les valeurs exactes des intégrales mais la vitesse de convergence dépend de la densité de probabilité choisie. Une distribution uniforme converge moins lentement et est donc moins adaptée qu'une distribution non-uniforme et comme on a vu au chapitre 2, plus la forme de cette dernière est proche de la fonction à intégrer plus la convergence est rapide et plus les erreurs relatives sont petites avec moins de point d'intégration. Enfin, il faut savoir que MC trouve son importance avec des dimensions plus hautes et nécessite un matériel informatique plus puissant.

Conclusion

Les méthodes de Monte Carlo sont une large classe d'algorithmes de calcul qui reposent sur un échantillonnage aléatoire répété pour obtenir des résultats numériques, se sont des méthodes stochastiques d'approximation. Les domaines d'application de ces méthodes sont nombreux et très riches notamment après le développement des ordinateurs puissants.

Ce travail portait sur deux principaux objectifs. Pour le premier nous avons réalisé une étude comparative entre la méthode d'intégration Monte Carlo multidimensionnelle et celle de Gauss-Legendre. Pour le deuxième objectif, on a étudié un cas pratique d'application de l'intégration Monte-Carlo dans le calcul de deux propriétés quantiques de l'atome d'hélium.

Après un premier chapitre où nous avons présenté la méthode Monte Carlo ainsi que quelques concepts mathématiques dont nous avons besoin pour la compréhension de la méthode, un deuxième chapitre a été consacré à l'intégration Monte Carlo Multidimensionnelle et ses trois variantes avec échantillonnage uniforme, non-uniforme et préférentiel (réduction de la variance) ainsi que la méthode d'intégration de Gauss-Legendre à 2 nœuds à n dimension.

Dans la seconde partie du chapitre 2, nous avons présenté une étude comparative d'un exemple concret de calcul d'une intégrale multidimensionnelle avec des dimension $n = 3, 6, 9$ et 12 en utilisant les deux techniques d'intégration Gauss-Legendre avec deux nœuds et Monte-Carlo avec échantillonnage préférentiel. Nos résultats nous ont permis de conclure à la supériorité de la technique Monte-Carlo pour les hautes dimensions (à partir de la dimension $n = 9$ dans notre exemple). Le calcul a été réalisé à l'aide du logiciel Maple et le choix de s'arrêter à la dimension $n = 12$ est dicté par les capacités informatiques en temps de calcul à notre disposition. On s'est également arrêté au problème de la dimensionnalité avec les méthodes de types déterministes et de l'impossibilité d'effectuer des calculs lorsque la dimension du problème atteint un certain degré .

Dans le troisième chapitre, nous avons présenté deux exemples de l'utilisation des méthodes d'intégration de Monte-Carlo dans les calculs de la mécanique quantique, avec l'atome de l'hélium comme cas pratique. Notre objectif a été de calculer numériquement par intégration Monte-Carlo 6-dimensionnelle deux grandeurs physiques relatives à l'atome d'He dans son état fondamental. La première est le potentiel moyen inter-électronique en-

tre les deux électrons de l'atome et la seconde est la distance moyenne entre ces électrons, puis on a comparé les calculs aux valeurs exactes.

Nos calcul nous ont permis de retrouver les valeurs exactes de ces grandeurs et nous avons constaté que l'utilisation d'un échantillonnage non-uniforme et de forme proche de la fonction à intégrer permettait une convergence plus rapide et des erreurs relatives négligeable avec moins de point d'intégration. Nous avons enfin noté que les méthodes d'intégration de Monte-Carlo sont plus adapté aux dimensions supérieures contrairement aux méthodes déterministe de type Gauss ou Newton-Cotes, mais nécessitent un matériel informatique puissant pour générer des échantillons de points d'intégration multidimensionnelles aléatoires de grand taille et évaluer la fonction à intégrer en ces points.

Bibliographie

- [1] Eric Veach, Monte-Carlo Intégration, Stanford University, 1997.
- [2] Michel Roger. Méthodes de Monte-Carlo, octobre 2008.
- [3] D. Fredon, M Maumy-Bertrand, F Bertrand. Mathématiques Statistique et probabilités, 2009.
- [4] Jérôme Escoffier, Probabilités et statistiques pour le CAPES externe et l'Agrégation interne, 2010.
- [5] Pierre Dusart, Cours de Probabilités, 2013.
- [6] Gabriel Baudrand. Mathématiques résumés du cours ECE, 2008.
- [7] IBM Cloud Education, <https://www.ibm.com/fr-fr/cloud/learn/monte-carlo-simulation>, Août 2020.
- [8] Frédéric Legrand. Magazine scientifique (Informatique Appliquée aux Sciences Physiques), <https://www.f-legrand.fr/scidoc/licence.html>
- [9] Bernard Lapeyre - Etienne Pardoux - Rémi Sentis, Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion, Verlag Berlin Heidelberg, 1998.
- [10] Aldéric Joulin, Méthodes de Monte Carlo, INSA Toulouse, Année universitaire 2019-2020.
- [11] L. Chia, simulation Monte-Carlo des dispersions énergétiques de noyaux atomiques par émission de neutrons, Thèse de Master, Université-BBA, 2019.
- [12] O. Deffaf, Intégration Monte Carlo multidimensionnelle application de l'approche quantique variationnelle à l'atome d'hydrogène, Thèse de Master, Université-BBA, 2020.
- [13] J. V. Lambers, Explorations in numerical analysis, WSPC 2018.
- [14] Ryan G. McClarren, Computational Nuclear Engineering, Academic Press 2018.
- [15] Jinhong Du, Monte Carlo Integration, <https://cran.r-project.org>
- [16] Ceperley D.M and Alder, B.J, Quantum Monte Carlo. Science, 231, 555 (1986).

-
- [17] R. C. Grimm, R. G. Storer, Monte-Carlo solution of Schrödinger's equation, *J. Comput. Phys.* 7, 134-156 (1971).
- [18] Caperley D.M, An Overview of Quantum Monte Carlo Methods *Reviews in Mineralogy and Geochemistry* 71(1):129-135.
- [19] J. B. Anderson, Quantum chemistry by random walk, *J. Chem. Phys.* 65, 4121-4127 (1976).
- [20] Michel Guymont. *Structure de la matière : Atomes, liaisons chimiques et cristallographie*, Belin, 2003.
- [21] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Mécanique quantique (Tom II)*, CNRS, 2018.

Résumé :

Dans ce travail nous présentons la méthode d'intégration Monte Carlo (MC) multidimensionnelle et son application au calcul de quelques propriétés quantiques de l'atome d'He. Nous introduisons d'abord les éléments de base de la méthodes MC et le formalisme mathématique sur lequel est basée la méthode. Nous réalisons ensuite une étude comparative entre cette méthode d'intégration et une méthode déterministe qui est la quadrature de Gauss. Nous montrons la supériorité de la méthode MC pour les dimensions élevés par apport aux autres techniques déterministes. Comme application, à l'aide d'un programme Maple, nous avons calculé deux propriétés de l'atome d'He dans son état fondamental, le potentiel moyen et la distance moyenne inter-électronique dans le cadre du modèle des électrons indépendants corrigé par un calcul variationnel..

Mots clés : Monte Carlo, intégration multidimensionnelle, atome d'He, potentiel et distance inter-électronique, méthode des variations, model des électrons indépendants.

Abstract :

In this work we present the multidimensional Monte Carlo (MC) integration method and its application to the calculation of some quantum properties of the He atom. We first introduce the basic elements of Monte Carlo methods and the mathematical formalism on which the method is based. We then carry out a comparative study between this method of integration and a deterministic method which is the Gaussian quadrature. We show the superiority of the MC method for high dimensions compared to other deterministic techniques. As an application, using a Maple program, we calculated two properties of the He atom in its ground state, the average potential and the average inter-electronic distance within the framework of the independent electrons model corrected by a variational calculus.

Keywords: Monte Carlo, multidimensional integration, He atom, average potential and inter-electronic distance, variational method, independent electrons model.

ملخص:

نقدم في هذا العمل طريقة تكامل مونت كارلو (MC) متعددة الأبعاد وتطبيقها في حساب بعض الخصائص الكمومية لذرة الهيليوم. نقدم أولاً العناصر الأساسية لطريقة مونت كارلو والمعادلات الرياضية التي تستند إليها الطريقة. ثم نجري دراسة مقارنة بين طريقة التكامل هذه وطريقة غاوس. أظهرنا تفوق طريقة MC للأبعاد العالية مقارنة بالتقنيات الأخرى. كتطبيق، باستخدام برنامج Maple، قمنا بحساب خاصيتين لذرة He في حالتها الأساسية، متوسط الكمون ومتوسط المسافة الإلكترونية داخل إطار نموذج الإلكترونات المستقلة المصححة بواسطة حساب تفاضلي.

الكلمات المفتاحية: مونت كارلو، التكامل متعدد الأبعاد، ذرة الهيليوم، متوسط الكمون ومتوسط المسافة الإلكترونية، الحساب التفاضلي، نموذج الإلكترونات المستقلة.