



# Mémoire de fin d'études

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

**Filière : Physique**  
**Option : Physique des Matériaux**

**THÈME :**

*Intégration Monte Carlo multidimensionnelle :  
application de l'approche quantique variationnelle à  
l'atome d'hydrogène.*

**Préparé par :** Deffaf Oussama.

Soutenu le : --/--/2020

**Devant le jury :**

**Président :**

**Rapporteur:** Khalfallah Farid

**Examineur :** Ben Thabet Abdelouahab

Université de BBA

M.C.A Université de BBA

Pr. Université de BBA

**Année Universitaire 2019-2020**

# Dédicace

*Je dédie ce mémoire :*

**A mes parents et mes grands-parents** qui se sont sacrifié pour ma réussite, de par leurs amours immense, leurs soutiens, ainsi que leurs confiances absolues et une éducation dont je suis fière.

**A mes frères** Schaib Aissam Ayoub et Adem , Qui étaient à mes cotes tout le temps  
**A l'esprit de ma petite sœur** (Allah yarhamha) qui restera gravé dans nos mémoire à L'éternel. **A toute ma famille** et **mes chers amis** Y.Saadaoui, A.Sciassi, I.boukhtala, Z.bounab **Je vous dis merci.**

*Oussama*

# Remerciement

- ❖ **Nous** remercions tout d'abord « **ALLAH** » de nous avoir donné la force, la volonté et le courage de mener à bout notre travail.
- ❖ Un remerciement spécial à mon père **Chikh Khmissi** à qui je dois le courage et la volonté de finir ce modeste travail et qui m'a accompagné durant tout les temps de ma vie. Un grand merci à toi mon père..
- ❖ **Nous** remercions notre encadreur « **Mr F. Khalfallah** » pour ses conseils et son suivi du début à la fin de ce travail.
- ❖ Nous remercions l'ensemble **des enseignants 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, on leur dit merci.
- ❖ Encore une foi, un énorme merci aux **amis** et à ma **famille**.

*Merci*

---

# Table des matières

---

Remerciements

Liste des figures

Liste des tableaux

Introduction générale

## CHAPITRE I : Introduction aux méthodes Monte-Carlo

|  |    |
|--|----|
| I-1 Développement historique des méthodes de Monte-Carlo (MC)..... | 1  |
| I-2 Eléments de base de la simulation de Mont- Carlo.....          | 2  |
| I-2-1 Eléments de probabilités : Variable aléatoire.....           | 2  |
| I-2-2 Simulation Monte Carlo.....                                  | 10 |
| I-2-3 Méthodes pour la génération de nombre aléatoires.....        | 11 |
| I-3 Marches aléatoires.....  | 14 |
| I-3-1 Chaines de Markov.....                                       | 14 |
| I-3-2 Algorithme de Metropolis-Hastings.....                       | 15 |

## CHAPITRE II : Intégration Monte Carlo multidimensionnelle.

|   |    |
|---|----|
| II-1 Introduction.....  | 17 |
| II-2 Méthodes d'intégration de Newton-Cotes.....                  | 17 |
| II-2-1 Formules des rectangles à n dimensions.....                | 17 |
| II-2-2 Formule des trapèzes à n dimensions.....                   | 18 |
| II-2-3 Formule de Simpson à n dimensions.....                     | 19 |
| II-3 Méthode d'intégration de Monte Carlo.....                    | 20 |
| II-3-1 Description de la méthode.....                             | 20 |
| II-3-2 Intégration Monte-Carlo avec échantillonnage uniforme..... | 20 |
| II-3-3 Convergence de la méthode.....                             | 21 |
| II-3-4 Vitesse de convergence.....                                | 22 |
| II-3-5 Estimation de la variance.....                             | 23 |

|  |    |
|--|----|
| II-3-6 Méthodes de réduction de variance : échantillonnage préférentiel..... | 23 |
| II-4 Application au calcul d'une intégrale multidimensionnelle.....          | 25 |
| II-4-1 Objectif.....   | 25 |
| II-4-2 Exemple d'une intégrale multidimensionnelle.....                      | 25 |
| II-4-3 Résultats et discussion.....  | 27 |

Chapitre III : Méthode MC quantique variationnelle, application  
à l'atome d'hydrogène.

|   |    |
|---|----|
| III-1 Introduction.....   | 35 |
| III-2 Aperçu de quelques méthodes Monte Carlo quantiques.....       | 35 |
| III-2-1 Monte Carlo quantique variationnelle (VQMC).....            | 35 |
| III-2-2 Monte Carlo par fonction de Green (GFMC).....               | 36 |
| III-2-3 Monte Carlo par diffusion (DMC).....                        | 36 |
| III-2-4 Monte Carlo par intégrale de chemin (PIMC).....             | 37 |
| III-3 Méthode variationnelle en mécanique quantique.....            | 37 |
| III-3-1 Principe de la méthode.....                                 | 38 |
| III-3-2 Propriété du niveau fondamental et théorème de Ritz.....    | 38 |
| III-4 Application de la méthode VQMC à l'atome d'hydrogène.....     | 39 |
| III-4-1 Motivation.....   | 39 |
| III-4-2 Principe de la méthode VQMC.....                            | 39 |
| III-4-3 Echantillonnage par l'algorithme de Metropolis-Hasting..... | 41 |
| III-4-4 Résultats et discussions.....                               | 43 |
| Conclusion générale.....  | 47 |
| Références  |    |

---

# Liste des figures

---

## Chapitre I

- 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.....11
- Figure I.2 :** Méthode d'inversion pour une distribution normale (fonction gaussienne).....12
- Figure I.3 :** L'algorithme de la méthode de rejet.....13

## Chapitre II

- Figure II-1 :** Courbes des fonctions  $f(\vec{r})$  et  $g(\vec{r})$  en dimension  $n = 1$  (à gauche) et  $n = 2$  (à droite)..26
- Figure II-2 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 1$ .....27
- Figure II-3 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 2$ .....27
- Figure II-4 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 3$ .....28
- Figure II-5 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 4$ .....28
- Figure II-6 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 5$ .....28
- Figure II-7 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 6$ . ....29
- Figure II-8 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 7$ .....29
- Figure II-9 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 8$ .....29
- Figure II-10 :** Variations du nombre de points d'intégration en fonction de la dimension ( $n$ ) pour les trois méthodes de Newton-Cotes et pour trois valeurs du nombre de subdivisions  $m=1, 5$  et  $10$ .....31

## Chapitre III

- Figure III-1 :** Surface tridimensionnelle de l'énergie  $E(\alpha, c)$  dans l'espace. L'axe vertical représente la valeur de l'énergie en unité atomique [ua].....43
- Figure III-2 :** Courbes de niveaux de l'énergie  $E(\alpha, c)$  dans le plan  $(\alpha, c)$ . L'échelle de l'énergie est donnée en spectre de couleur (du bleu pour les valeurs minimales jusqu'au rouge).....43
- Figure III-3 :** Courbes de niveaux de la variance  $\sigma^2(\alpha, c)$  de l'énergie dans le plan  $(\alpha, c)$ .....44

---

# Liste des tableaux

---

## Chapitre II

**Tableau II-1** : Les erreurs associées à l'évaluation de l'intégrale de la fonction  $f(\vec{r})$  par les différentes méthodes pour  $N = 10^5$  et pour des dimensions différentes  $n=1, \dots, 8$ .....30

**Tableau II-2** : Variation du nombre de points (N), du temps de calcul T et de l'erreur relative en fonction de la dimension  $n$  pour les méthodes des trapèze et Simpson.....32

**Tableau II-3** : Variation du nombre de points (N), du temps de calcul T et de l'erreur relative en fonction de la dimension  $n$  pour les méthodes de Monte-Carlo.....33

# Introduction générale

Les méthodes de Monté Carlo sont une classe de techniques qui peuvent être utilisées pour simuler le comportement d'un système physique ou mathématique. Elles se distinguent des autres méthodes de simulation par leur aspect stochastique, c'est-à-dire non déterministe. Le traitement statistique de ce comportement stochastique est à la base des méthodes de Monte Carlo et se traduit par l'utilisation de séquences de nombres aléatoires dans les calculs. Bien qu'il ne soit pas surprenant qu'une telle approche puisse être utilisée pour modéliser des processus aléatoires, les méthodes de Monté Carlo s'avèrent très efficaces dans la résolution de beaucoup de problèmes mathématiques d'analyse numérique et de physique dont certains sont déterministes. On peut citer l'estimation des surfaces, le calcul des intégrales multiples et la résolution des équations différentielles partielles, les problèmes de diffusion et de transport ainsi que les problèmes à  $n$ -corps en mécanique quantique où ces méthodes sont fréquemment appliquées dans l'étude des systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté et fortement couplés ce qui rend les méthodes de simulation Monte Carlo un choix judicieux.

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, il s'agit de l'algorithme de Métropolis-Hasting qui est un élément très important dans notre étude.

Dans le deuxième chapitre on présente une utilisation classique et efficace des méthodes Monte Carlo, il s'agit de l'évaluation des intégrales et en particulier les intégrales multidimensionnelles. On réalise dans la deuxième partie du chapitre une comparaison entre ces méthodes et les méthodes classiques d'intégration numérique. Comme on va le voir dans ce chapitre, l'utilisation de Monte Carlo est avantageuse dans l'évaluation d'intégrales multidimensionnelles où les méthodes classiques de subdivision deviennent inefficaces et impossibles à appliquer en raison de l'augmentation rapide du nombre de points d'intégration avec la dimension.

# Introduction générale

---

Le troisième chapitre est consacré à aux méthodes Monte Carlo en mécanique quantique. Notre travail se focalisera sur l'approche Monte Carlo variationnelle et son application à la résolution de l'équation de Schrödinger pour un système simple qui est l'atome d'hydrogène. On réalisera des calculs de simulation Monte-Carlo en utilisant les chaînes de Markov et l'Algorithme de Métropolis-Hasting pour calculer l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. Ces calculs ont été réalisés à l'aide d'un programme Fortran.

Enfin, ce travail s'achèvera par une conclusion dans laquelle nous résumons l'essentiel de notre mémoire et les résultats obtenus.



# **Chapitre I**

## **Introduction aux méthodes Monte-Carlo**

### I-1 Développement historique des méthodes de Monte Carlo (MC)

La méthode Monte-Carlo est relativement ancienne et son développement ainsi que son usage n'est pas récents. En effet durant la deuxième moitié du 19<sup>ème</sup> siècle, nombre de gens ont réalisé des expériences dans lesquelles ils jetaient au hasard une aiguille sur un tableau rayé de droite parallèles, et déduisaient la valeur de  $\pi$  de leurs observations, sur la base du nombre d'intersections entre l'aiguille et les lignes.

C'est au début du 20<sup>ème</sup> siècle que l'on a commencé à l'utiliser pour étudier l'équation de Boltzmann et c'est ainsi que des écoles statistiques anglaises se sont livrées à une bonne quantité de travaux de Monte Carlo dites MC de base. Dès l'année 1908 un fameux statisticien (W. S. Gosset) s'aida d'un échantillonnage expérimental dans sa recherche de la distribution du coefficient de corrélation de certains phénomènes physiques.

L'appellation Monte-Carlo est due à Metropolis, inspiré de l'intérêt d'Ulam pour le poker, car Monte Carlo est un grand centre de casinos. Ce nom a donc pour origine les liens avec les jeux de hasard. Plus tard, la méthode a été démocratisée et améliorée par Von Neumann et Ulam au moyen de certaines techniques de réduction de variance durant la deuxième guerre mondiale dans le travail secret lié à la bombe atomique à Los Alamos. C'est donc à partir de 1944 que les méthodes de Monte Carlo ont connu un véritable essor lorsqu'elles ont été appliquées aux problèmes liés à la physique nucléaire des neutrons, en simulant directement le comportement de la diffusion aléatoire des neutrons dans les matériaux fissiles.

Il a fallu cependant attendre Harris et Hermarkahn en 1948 pour un développement systématique de ces idées par une méthode déterministe. Vers la fin 1948, Fermi, Metropolis et Ulam obtinrent des estimations de Monte Carlo pour les valeurs propres de l'équation de Schrödinger. Ces dernières années, avec le développement des ordinateurs puissants, les méthodes de Monte Carlo sont revenues en force et ces techniques ont été utilisées fréquemment et dans de nombreux domaines. Aujourd'hui, elles occupent une place majeure dans la panoplie des outils disponibles pour calcul sur ordinateur.

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. Ces méthodes donnent un cadre de résolution numérique très général, sans contraintes théoriques et un cadre pour évaluer l'incertitude liée aux résultats. C'est pourquoi elles sont appliquées à une grande variété de problèmes [1].

### I-2 Eléments de base de la simulation 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 basés sur les principes de la théorie des probabilités et statistiques [2].

#### I-2-1 Eléments de probabilités : Variable aléatoire

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. Il est important de noter que le terme « nombre aléatoire » est quelque peu trompeur, un nombre n'est pas aléatoire en lui-même, c'est plutôt la relation entre les nombres dans un ensemble qui est aléatoire. Une variable aléatoire peut être soit discrète ou continue. Dans notre étude nous allons nous concentrer uniquement sur les variables continues.

##### I-2-1-1 Densité de probabilité et fonction de répartition

###### Variable aléatoire continue

Soit  $X$  une variable aléatoire réelle définie sur un espace probabilisé  $(\Omega)$ . Nous disons que la variable aléatoire  $X$  est continue s'il existe une fonction  $\rho$  définie sur  $R$  telle que

1.  $\rho(x) \geq 0$  pour tout  $x \in R$  ;
2. L'ensemble des points de discontinuités de  $\rho$  est finie et ces discontinuités sont de première espèce (la limite à gauche et à droite en chaque point existe) [3].

###### Fonction de densité de probabilité $\rho(x)$ :

La fonction de densité de probabilité  $\rho$  d'une variable aléatoire  $X$  est la fonction qui décrit la densité de probabilité de trouver la variable autour du point  $x$ .

$$\rho(x) = \frac{dP}{dx} \quad (\text{I} - 2)$$

$dP$  étant la probabilité de trouver  $x$  dans l'intervalle  $[x, x+dx]$ . L'intégrale des probabilités doit être convergente et égale à l'unité, c'est-à-dire :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = 1 \quad (\text{I} - 3)$$

### Fonction de répartition $F(t)$ :

La fonction de répartition d'une variable aléatoire  $X$  est la probabilité qu'une valeur choisie à partir de la distribution de la variable soit inférieure ou égale à un nombre  $t$ , c-à-dire la probabilité de trouver  $x \in ]-\infty, t]$  :

$$F(t) = P\{X \leq t\} = \int_{-\infty}^t \rho(x) dx \quad (\text{I} - 4)$$

Cette fonction est croissante sur  $\mathbb{R}$ , elle varie de 0 à 1, autrement dit :

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} F(x) = 0 \quad \text{et} \quad \lim_{x \rightarrow +\infty} F(x) = 1$$

### Propriétés

Soit  $X$  une variable aléatoire continue admettant une densité de probabilité  $\rho$ .

1. Pour tout  $X \in \mathbb{R}$ ,  $P([X = a]) = 0$  ;
2. Pour tout  $(a, b)$  avec  $-\infty \leq a \leq b \leq +\infty$ , nous avons :

$$P(a < X < b) = P(a \leq X \leq b) = \int_a^b \rho(x) dx \quad (\text{I} - 5)$$

### Fonction d'une variable aléatoire continue

Soit  $X$  une variable aléatoire continue admettant une densité de probabilité  $\rho$  et  $I$  un intervalle d'extrémités  $a$  et  $b$ , ( $-\infty \leq a < b \leq +\infty$ ), contenant  $X(\Omega)$ . Soit  $\phi$  de classe  $C^1$  sur  $I$ , telle que pour tout  $x$  de  $I$ ,  $\phi'(x) > 0$  ou  $\phi'(x) < 0$  [3].

1.  $\phi(x)$  est une variable aléatoire continue ;
2. une densité de probabilité  $g_{\phi(x)}$  de  $\phi(x)$  est donnée par :

$$g_{\phi(x)}(x) = \frac{\rho(\phi^{-1}(x))}{|\phi'(\phi^{-1}(x))|} \quad \text{si} \quad x \in \phi(I) \quad (\text{I} - 6)$$

$$g_{\phi(x)}(x) = 0 \quad \text{si} \quad x \notin \phi(I) \quad (\text{I} - 7)$$

### I-2-1-2 Espérance et variance

#### Espérance d'une variable aléatoire $E(X)$

Soit  $X$  une variable aléatoire continue admettant une densité de probabilité  $\rho$ . Nous disons que  $X$  admet une espérance mathématique (ou moyenne) si l'intégrale  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx$  converge absolument [3].

Nous appelons alors espérance mathématique de  $X$ , la valeur notée  $E(X)$  ou  $\mu(X)$  définie par

$$\mu(X) = E(X) = \langle X \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x)dx \quad (\text{I-8})$$

Si deux variables aléatoires réelles  $X$  et  $Y$  admettent une espérance alors, pour tout  $(a, b) \in \mathbb{R}^2$ ,

$$E(aX + bY) = aE(X) + bE(Y) \quad (\text{I-9})$$

#### Espérance d'une fonction d'une variable aléatoire $E[f(X)]$ :

Soit  $I$  un intervalle d'extrémités  $a$  et  $b$ ,  $(-\infty \leq a < b \leq +\infty)$ . Soit  $f$  une fonction à valeur dans  $\mathbb{R}$  définie et continue sur  $I$ .

$f(X)$  admet une espérance mathématique  $E[f(X)]$  si et seulement si  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx$  est absolument convergente et nous avons [3] :

$$E[f(X)] = \langle f(X) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx \quad (\text{I-10})$$

#### Variance $\sigma^2$ et écart-type $\sigma$

Soit  $X$  une variable aléatoire continue admettant une densité de probabilité  $\rho$ . On appelle variance de  $X$ , notée  $\sigma^2$ , l'espérance de la variable  $(X - E(X))^2$ , c'est le réel :

$$\sigma^2 = \text{Var}(X) = \langle (X - E(X))^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - E(X))^2 \rho(x)dx \quad (\text{I-11})$$

L'écart-type de la variable aléatoire  $X$ , notée  $\sigma$ , est la racine carrée de la variance :

$$\sigma(X) = \sqrt{\text{Var}(X)} \quad (\text{I} - 12)$$

Il est possible de tirer une expression plus simple pour la variance :

$$\boxed{\text{Var}(X) = E(X^2) - (E(x))^2} \quad (\text{I} - 13)$$

En effet on a :

$$\begin{aligned} \text{Var}(X) &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x - E(X))^2 \rho(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} (x^2 - 2xE(X) + (E(x))^2) \rho(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \rho(x) dx - 2E(X) \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx + (E(x))^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx \\ &= E(X^2) - 2E(X)E(X) + (E(x))^2 \\ \text{Var}(X) &= E(X^2) - (E(x))^2 \end{aligned}$$

*propriétés*

Pour tous réels  $a$  et  $b$  et pour toute variable aléatoire  $X$  admettant une variance, nous avons

$$\text{Var}(aX + b) = a^2 \text{Var}(X) \quad (\text{I} - 14)$$

*Vocabulaire*

1. Si  $E(X) = 0$ , alors  $X$  est une variable aléatoire centrée.
2. Si  $\text{Var}(X) = 1$ , alors  $X$  est une variable aléatoire réduite.
3. Si  $X$  admet une variance non nulle et une espérance  $\mu$ , la variable  $X^* = \frac{X - \mu}{\sigma}$  est appelée variable centrée et réduit associée à  $X$ .

### I-2-1-3 Quelques lois de probabilité

#### Loi uniforme continue $U[a, b]$

Une variable aléatoire  $X$  suit une loi uniforme continue sur  $[a, b]$ , si elle a pour densité  $\rho(x)$  définie par [4]

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{Sinon} \end{cases} \quad (\text{I} - 15)$$

On note alors :  $X \sim U[a, b]$

On obtient sans difficulté, La fonction de répartition d'une loi uniforme  $U[a, b]$  est égale à :

$$F(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < a \\ \frac{x-a}{b-a} & \text{si } a \leq x \leq b \\ 1 & \text{si } x > b \end{cases} \quad (\text{I} - 16)$$

Soit  $X$  une variable aléatoire qui suit une loi uniforme  $U[a, b]$ . Nous avons :

$$E(x) = \frac{a+b}{2} \text{ et } Var(x) = \frac{(b-a)^2}{12} \quad (\text{I} - 17)$$

La loi uniforme continue de référence est la loi  $U[0,1]$ , correspondant au générateur de base des nombres aléatoires de la plupart des logiciels. à partir d'un tel générateur, des nombres aléatoires uniformément distribués sur  $[a, b]$  sont produits par la transformation  $y = (b-a)x + a$ .

### Loi normale centrée-réduite $N(0, 1)$ ou loi Gaussienne

Une variable aléatoire  $X$  à valeur dans  $R$  suit une loi normale centrée-réduite, notée  $N(0,1)$ , si  $X$  est une variable continue et admet pour densité de probabilité la fonction  $\rho(x)$  suivante [3]:

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad (\text{I} - 18)$$

La fonction de répartition de la loi normale centrée-réduite est :

$$F(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^t \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \quad (\text{I} - 19)$$

### Propriétés

1. Le graphe de la fonction de densité de probabilité «  $\rho$  » a l'allure d'une courbe en cloche connue sous le nom de Gaussienne.
2. Le graphe de la fonction de répartition «  $F$  » est symétrique par rapport au point  $(0, 1/2)$ .
3. Soit  $X$  une variable aléatoire qui suit la loi normale  $N(0,1)$ . Nous avons :

$E(X) = 0$  et  $Var(X) = 1$ . C'est la raison pour laquelle la loi est appelée centrée-réduite.

4. Nous avons, pour tout  $n \in N$  :

$$E(X^{2n}) = \frac{(2n)!}{2^n n!} \text{ et } E(X^{2n+1}) = 0 \quad (\text{I} - 20)$$

### Loi normale de paramètres $\mu$ et $\sigma$ $N(\mu, \sigma)$

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 [3] :

$$\rho_{\mu, \sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] \quad (I-21)$$

Et admet la fonction de répartition suivante :

$$F_{\mu, \sigma}(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \int_{-\infty}^t \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right] dx \quad (I-22)$$

#### Propriétés

1. Le graphe de  $\rho_{\mu, \sigma}$  a l'allure d'une courbe en cloche symétrique par rapport à  $x = \mu$ , pointue pour  $\sigma$  petit, aplatie pour  $\sigma$  grand.

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

$$\rho_{\mu, \sigma}(\mu + u) = \rho_{\mu, \sigma}(\mu - u) \quad (I-23)$$

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

$$F_{\mu, \sigma}(\mu - x) = 1 - F_{\mu, \sigma}(\mu + x) \quad (I-24)$$

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

$$E(X) = \mu \quad \text{et} \quad \text{Var}(X) = \sigma^2 \quad (I-25)$$

### Loi exponentielle $\mathcal{E}_\lambda$

Soit  $\lambda$  ( $\lambda > 0$ ), une variable aléatoire  $X$  suit une loi exponentielle de paramètre  $\lambda$  si continue et admet si elle a pour densité [4] :

$$\rho(x) = \begin{cases} \lambda \exp(-\lambda x), & \text{pour } x \geq 0 \\ 0, & \text{pour } x < 0 \end{cases} \quad (I-26)$$

La fonction de répartition d'une loi exponentielle est égale à

$$F(t) = \begin{cases} 1 - \exp(-\lambda t) & \text{pour } t \geq 0 \\ 0 & \text{pour } t < 0 \end{cases} \quad (I-27)$$

#### Propriété

Soit  $X$  une variable aléatoire qui suit une loi exponentielle. Nous avons :

$$E(X) = \frac{1}{\lambda} \quad \text{et} \quad \text{Var}(X) = \frac{1}{\lambda^2} \quad (I-28)$$



**I-2-1-4 Généralisation à n dimensions**

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

Nous avons vu quelques éléments de probabilité pour une seule variable. Pour plusieurs variables, la généralisation est directe [5]. Si  $\vec{r} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  est un point de l'espace  $\mathbb{R}^n$ , 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 dans un volume infinitésimal n-dimensionnel  $dv$  est :

$$dP = \rho(\vec{r})dv \tag{I-29}$$

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

$$\iiint \rho(\vec{r})dv = 1 \tag{I-30}$$

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

$$\rho(\vec{r}) = \prod_{\alpha} g(x_{\alpha}) \tag{I-31}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} g(x_{\alpha})dx_{\alpha} = 1 \tag{I-32}$$

On a donc

$$\iiint_{\Omega} \rho(\vec{r})dv = \prod_{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} g(x_{\alpha})dx_{\alpha} = 1 \tag{I-33}$$

**Espérance et variance**

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

$$E[f(\vec{r})] = \langle f(\vec{r}) \rangle = \iiint f(\vec{r})\rho(\vec{r})dv \tag{I-34}$$

Et la variance par :

$$Var(f(\vec{r})) = \langle (f(\vec{r}) - E(f(\vec{r})))^2 \rangle = \iiint (f(\vec{r}) - E(f(\vec{r})))^2 \rho(\vec{r})dv \tag{I-35}$$

### I-2-1-5 Convergence et théorèmes limites

#### Convergence en loi

Soit  $(X_n, n \geq 1)$  une suite de variables aléatoires définies sur un même espace probabilisé et  $F_n$  la suite des fonctions de répartition correspondantes. Soit  $X$  une variable aléatoire définie sur le même espace probabilisé et  $F$  sa fonction de répartition. Nous disons que la suite  $(X_n, n \geq 1)$  converge en loi vers  $X$  si, en tout point  $x$  de continuité de  $F$ , nous avons [3] :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_n(x) = F(x) \quad (\text{I} - 41)$$

Aussi, la suite  $(X_n, n \geq 1)$  converge en loi vers  $X$  si et seulement si pour tout couple de points  $a$  et  $b$  de continuité de  $F$ , nous avons :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(a < X_n \leq b) = P(a < X \leq b) \quad (\text{I} - 42)$$

#### Loi faible des grands nombres

Soit  $(X_n, n \geq 1)$  une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées (iid), ayant une espérance  $\mu$  et une variance  $\sigma^2$  [3].

Soit  $\bar{X}_n$  la valeur moyenne empirique (ou arithmétique) de  $X_n$ .

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (\text{I} - 43)$$

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 :

$$\boxed{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \xrightarrow{n \rightarrow \infty} E(x)} \quad (\text{I} - 44)$$

#### Théorème central-limite

Soit  $(X_n, n \geq 1)$  une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, ayant une espérance  $\mu$  et une variance  $\sigma^2$ .

Posons

$$Y_n = \frac{\bar{X}_n - \mu}{\sigma/\sqrt{n}} \quad (\text{I} - 45)$$

Alors la suite  $(Y_n, n \geq 1)$  converge en loi vers une variable aléatoire de loi normale centrée réduite  $\mathcal{N}(0,1)$  [3].

### I-2-2 Simulation Monte Carlo

#### I-2-2-1 Définition

Dans son Dictionnaire encyclopédique de la statistique (Dunod 1997), Yadolah Dodge donne la définition de la simulation que nous reproduisons ici : La simulation est une méthode permettant la reconstitution fictive de l'évolution d'un phénomène. C'est une expérimentation virtuelle qui suppose la constitution d'un modèle théorique présentant une similitude de propriétés ou de relations avec le phénomène faisant l'objet de l'étude.

En effet, il n'est pas toujours possible d'étudier le comportement de certains phénomènes ou de modèles en raison de leur complexité. Dans ces cas, nous aurons alors recours à des simulations pour combler l'absence d'éléments expérimentaux ou théoriques [3].

#### I-2-2-2 Génération de nombres aléatoires

La méthode Monte Carlo repose sur la simulation d'une suite de variable aléatoire  $(X_n)_{n \geq 1}$  indépendantes et identiquement distribuées selon une loi donnée. Pour obtenir ces nombres, on peut se référer à des tables préétablies à partir par exemple de phénomènes physiques très complexes ou un quelconque processus qui a une tendance aléatoire. Lorsqu'on utilise un ordinateur, on construit des nombres produits par le hasard à l'aide d'un algorithme mathématique adéquat. Le problème est que l'on ne peut être sûr que les nombres générés de cette façon sont parfaitement aléatoires.

#### I-2-2-3 Nombres pseudo-aléatoires

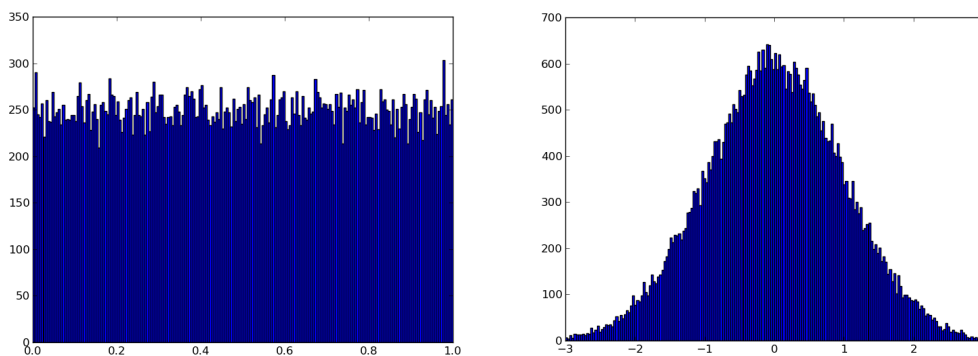
Actuellement, tous les logiciels de calcul possèdent un générateur de nombres aléatoires qui en général correspondent à des échantillons provenant d'une loi uniforme continue sur l'intervalle  $[0,1]$ . Ce sont ces échantillons que nous qualifions de nombres pseudo-aléatoires puisqu'elles sont engendrées par un mécanisme complètement déterministe. Les deux raisons principales pour lesquelles nous nous contentons d'un comportement pseudo-aléatoire sont :

- Il est très difficile d'obtenir de « vrai » nombres aléatoires et que, dans certaines situations, il n'est possible d'utiliser que des nombres pseudo-aléatoires, en lieu et place de vrais nombres aléatoires ;
- Ce sont des générateurs particulièrement adaptés à une implémentation informatique, donc plus facilement et plus efficacement utilisables [3].

En effet, il n'existe pas d'algorithme mathématique qui permet de générer des nombres réellement aléatoires. On obtient uniquement des nombres qui se rapprochent de l'aléatoire dit nombres pseudo-aléatoires, les nombres pseudo-aléatoires générés par ordinateur diffèrent des nombres aléatoires par le

fait que lorsque le premier est arbitrairement choisi, toute la suite est complètement déterminée et reproductible. Par cet effet, on peut appliquer des tests de qualité et vérifier les programmes dans lesquels ils sont utilisés.

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 le deuxième pour une distribution gaussienne avec une variance  $\sigma=1$  sur l'intervalle  $[-3, 3]$ , le nombre d'évènements générés est de 20000 évènements [1].



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

On voit bien que le nombre de points par bin dans la distribution uniforme est quasiment constant sur tout l'intervalle  $[0,1]$ , alors que dans la distribution gaussienne on a un pic où une majorité des points sont situées dans le centre de l'intervalle  $[-3, 3]$ , dans le reste de l'intervalle ce nombre diminue en s'éloignant du centre[1].

### I-2-3 Méthodes pour la génération de nombres aléatoires

Nous allons présenter ici quelques méthodes numériques utilisés pour la génération des variables aléatoire.

#### I-2-3-1 lois uniformes

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 :

$$x_i = a.x_{i-1} + c \text{ [modulo } m] \quad (I - 46)$$

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.

Le cas le plus fréquent est  $c = 0$ ,  $m = 2^N$  (un calculateur travaille facilement en binaire),  $N$  étant généralement supérieur à 30. Ainsi, pour  $c = 0$ , On obtient :

$$x_i = a.x_{i-1} [\text{modulo } m = 2^N] \tag{I - 47}$$

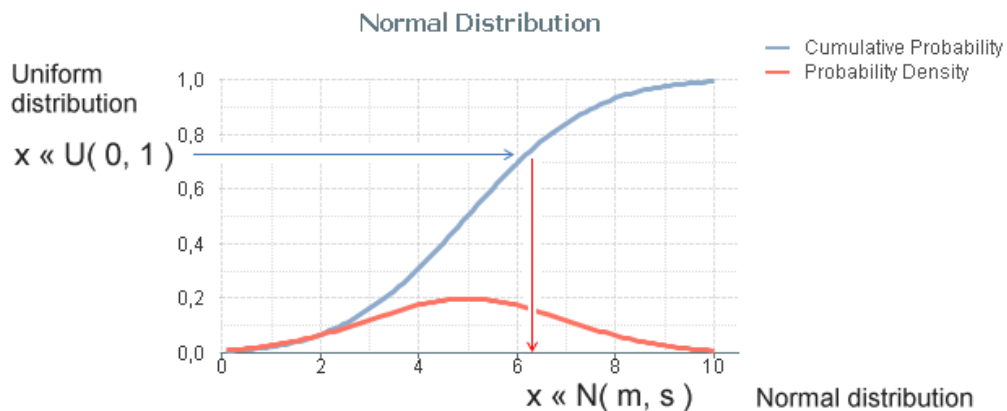
Les nombres obtenus ont une distribution uniforme (dite aussi rectangulaire). La plupart des calculateurs utilisent cet algorithme pour donner des séquences de nombres pseudo-aléatoires à distribution uniforme sur  $[0,1]$  [1].

**I-2-3-2 loi non uniforme**

Souvent, on a besoin d'une distribution non uniforme. Il existe de nombreuses méthodes que l'on peut utiliser pour générer des distributions particulières. Nous présentons deux approches : la méthode d'inversion et la méthode de rejet [6].

**Méthode d'inversion**

La simulation par inversion de la fonction de répartition constitue la méthode de simulation la plus directe.



**Figure I.2 :** Méthode d'inversion pour une distribution normale (fonction gaussienne)

Soit  $F$  une fonction de répartition définie sur un intervalle  $[a, b]$ , de fonction inverse

$$F^{-1} = \inf\{t: F(t) \geq u\} \text{ Pour tout } u \in ]0,1[ \tag{I - 48}$$

Etant donné une variable aléatoire, notée  $U$ , qui suit la loi uniforme sur l'intervalle  $[0,1]$ . Considérons la variable aléatoire  $X = F^{-1}(U)$  et déterminons sa fonction de répartition. Nous avons

$$P(X \leq x) = P(F^{-1}(U) \leq x) = P(U \leq F(x)) = F(x) \quad (I - 49)$$

Puisque  $U$  suit la loi uniforme. Donc la fonction de répartition de la variable aléatoire  $X$  est égale à  $F(x)$ .

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  $x_1 \dots \dots x_n$  simulant les réalisations d'une variable aléatoire de fonction de répartition  $F(x)$ [3].

**Méthode de rejet**

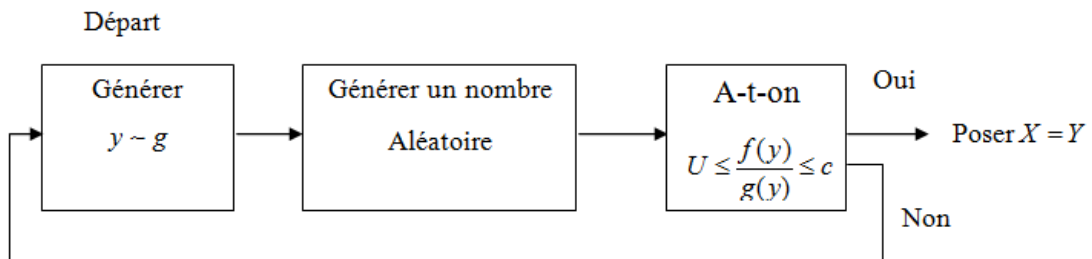
Supposons que l'on dispose d'une méthode pour simuler une variable aléatoire de fonction de densité  $g(x)$ . A partir de cela, on peut simuler une variable aléatoire continue d'une autre fonction de densité  $f(x)$ . En effet, on simule d'abord la variable  $y$  ayant la densité  $g$  puis on accepte cette valeur générée avec une probabilité proportionnelle à  $\frac{f(y)}{g(y)}$  [7]. Soit un constante  $c \geq 1$  telle que :

$$\frac{f(y)}{g(y)} \leq c \text{ pour tout } x$$

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 densité  $g$  et on recommence.



**Figure I.3 :** L'algorithme de la méthode de rejet

### I-3 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 modélisés 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.

#### I-3-1 Chaines de Markov

Une grande partie des calculs Monte Carlo, notamment en mécanique quantique avec les méthodes Monte Carlo quantiques (QMC), sont basés sur des marches aléatoires désignées mathématiquement par chaînes de Markov. Il s'agit d'une classe générale d'algorithmes pour la génération de nombres aléatoires (on parle aussi de vecteurs aléatoires) et l'échantillonnage à partir d'une distribution de probabilité donnée.

Les méthodes de Monte Carlo par chaîne de Markov (MCMC) créent des échantillons à partir d'une variable aléatoire continue, avec une densité de probabilité proportionnelle à une fonction connue. Pratiquement, une chaîne d'états est générée à partir d'un ensemble de points arbitrairement choisis et suffisamment éloignés les uns des autres. Cette chaîne représente un processus stochastique de «marcheurs» qui 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 est un processus stochastique possédant 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 antérieure.

Ainsi une chaîne d'événements  $(X_n, n \geq 0)$  est une chaîne de Markov [8] 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 antérieures à  $X_n$ .

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

$$P(X_{n+1} = x/X_0 = x_0, X_1 = x_1, \dots, X_n = x_n) = P(X_{n+1} = x/X_n = x_n) = Q(x_n, x) \quad (I - 50)$$

### I-3-2 Algorithme de Metropolis-Hastings (MH)

Utilisé notamment en statistique et physique statistique, 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  $\pi$  pour laquelle l'échantillonnage direct est difficile à obtenir à condition que l'on connaisse une fonction  $f$  proportionnelle à  $\pi$ . 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.

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  $\pi$ . 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  $\pi$ .

**Algorithme MH:** Soit  $E$  un espace probabiliste et  $\pi$  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 [8].

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  $y$ ,  $P(X_n = y) = Q(x_n, y)$ ).

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



On définit la probabilité d'acceptance :

$$\alpha(x, y) = \min\left(1, \frac{\pi(y) \cdot Q(y, x)}{\pi(x) \cdot Q(x, y)}\right) \quad (\text{I} - 51)$$

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  $\pi$  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 :

$$\alpha(x, y) = \min\left(1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)}\right) \quad (\text{I} - 52)$$

**Chapitre II**  
**Intégration Monte Carlo**  
**multidimensionnelle**

### II-1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons réaliser une étude comparative entre l'une des méthodes d'intégration numérique classique (dite déterministe), à savoir la méthode de Newton-Cotes, et la méthode de Monte Carlo (qui est une méthode stochastique) dans le cadre de l'estimation d'intégrales multidimensionnelles. Dans un premier temps on va présenter les méthodes de quadrature composites de Newton-Cotes pour l'intégration numérique par morceaux (Rectangle, Trapèze et Simpson) ainsi que deux méthodes d'intégration de Monte Carlo et leurs généralisations à  $n$  dimensions. Nous réaliserons par la suite le calcul d'une intégrale multidimensionnelle dans l'objectif de comparer les deux approches.

### II-2 Méthodes d'intégration de Newton-Cotes

En analyse numérique, il existe une vaste famille d'algorithmes dont le but principal est d'estimer la valeur numérique d'une intégrale définie sur un domaine particulier pour une fonction donnée. Ces techniques déterministes consistent à approcher une intégrale

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (\text{II} - 1)$$

Par une formule de quadrature, qui est simplement une somme de la forme :

$$I(f) = \sum_{i=0}^k w_i f(x_i) \quad (\text{II} - 2)$$

Les méthodes de Newton-Cotes pour le calcul numérique d'une intégrale consiste à remplacer la fonction à intégrer par son polynôme d'interpolation aux points d'intégration  $x_i$  qui dépendent de la méthode. Nous obtenons ainsi une valeur numérique approchée de l'intégrale définie (II-1), en intégrant le polynôme d'interpolation sur l'intervalle  $[a, b]$ . Cette méthode peut être améliorée en subdivisant  $[a, b]$  en  $m$  sous-intervalles et en appliquant la méthode sur chaque sous intervalle, c'est les méthodes composites. Dans ce qui suit nous désignons par :

$m$  : nombre de subdivisions (équidistantes) de l'intervalle  $[a, b]$

$X_0 = a, X_m = b, h = (b - a)/m$  et  $X_i = a + ih$ .

#### II-2-1 Formules des rectangles à $n$ dimensions

La formule des rectangles pour le calcul d'une intégrale à une dimension et sans subdivision est donnée par :

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx \simeq (b-a)f(b) \quad (\text{II-3})$$

Pour  $m$  subdivisions l'équation (II-3) peut s'écrire sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{X_i}^{X_{i+1}} f(x) dx \simeq \sum_{i=0}^{m-1} (X_{i+1} - X_i) f(X_{i+1}) \\ I_1 &= \int_a^b f(x) dx \simeq \frac{b-a}{m} \sum_{i=1}^m f(a + ih) \end{aligned} \quad (\text{II-4})$$

C'est la formule des rectangles composite. En deux dimensions la formule (II-4) devient :

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_a^b \int_a^b f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \simeq \int_a^b \frac{b-a}{m} \sum_{i_1=1}^m f(X_{1i_1}, x_2) dx_2 \\ &= \frac{b-a}{m} \sum_{i_1=1}^m \int_a^b f(X_{1i_1}, x_2) dx_2 = \left(\frac{b-a}{m}\right)^2 \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^m f(X_{1i_1}, X_{2i_2}) \\ I_2 &= \int_a^b \int_a^b f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \simeq \left(\frac{b-a}{m}\right)^2 \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^m f(a + i_1 h, a + i_2 h) \end{aligned} \quad (\text{II-5})$$

On peut généraliser l'expression (II-4) pour  $n$  dimensions par :

$$I_n = \int_a^b \int_a^b \dots \int_a^b f(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2 \dots dx_n \simeq \left(\frac{b-a}{m}\right)^n \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^m \dots \sum_{i_n=1}^m f(X_{1i_1}, X_{2i_2}, \dots, X_{ni_n})$$

$$I_n \simeq \left(\frac{b-a}{m}\right)^n \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_2=1}^m \dots \sum_{i_n=1}^m f(a + i_1 h, a + i_2 h, \dots, a + i_n h) \quad (\text{II-6})$$

## II-2-2 Formule des trapèzes à n dimensions

La formule des trapèzes pour le calcul d'une intégrale à une dimension et sans subdivision est donnée par :

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx = \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)) \quad (\text{II-7})$$

Pour  $m$  subdivisions on obtient la formule des trapèzes composite

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{X_i}^{X_{i+1}} f(x) dx \simeq \sum_{i=0}^{m-1} \frac{(X_{i+1} - X_i)}{2} (f(x_i) + f(x_{i+1})) \\ &= \frac{b-a}{2m} \sum_{i=0}^{m-1} (f(X_i) + f(X_{i+1})) = \frac{b-a}{2m} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^1 f(X_{i+j}) \end{aligned}$$

$$I_1 = \int_a^b f(x)dx \simeq \frac{b-a}{2m} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^1 f(a + h(i+j)) \quad (\text{II} - 8)$$

En deux dimensions la formule (II-8) devient :

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_a^b \int_a^b f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \simeq \int_a^b \frac{b-a}{2m} \sum_{i_1=0}^{m-1} \sum_{j_1=0}^1 f(X_{1(i_1+j_1)}, x_2) dx_2 \\ &= \frac{b-a}{2m} \sum_{i_1=0}^{m-1} \sum_{j_1=0}^1 \int_a^b f(X_{1(i_1+j_1)}, x_2) dx_2 = \left(\frac{b-a}{2m}\right)^2 \sum_{i_1=0}^{m-1} \sum_{j_1=0}^1 \sum_{i_2=0}^{m-1} \sum_{j_2=0}^1 f(X_{1(i_1+j_1)}, X_{2(i_2+j_2)}) \\ I_2 &= \int_a^b \int_a^b f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \simeq \left(\frac{b-a}{2m}\right)^2 \sum_{i_1=0}^{m-1} \sum_{i_2=0}^{m-1} \sum_{j_1=0}^1 \sum_{j_2=0}^1 f(a + (i_1 + j_1)h, a + (i_2 + j_2)h) \end{aligned} \quad (\text{II} - 9)$$

Et a n dimensions l'expression (II-8) se généralise à :

$$\begin{aligned} I_n &= \int_a^b \dots \int_a^b f(x_1, \dots, x_n) dx_1 \dots dx_n \simeq \left(\frac{b-a}{2m}\right)^n \left( \sum_{i_1=0}^{m-1} \dots \sum_{i_n=0}^{m-1} \right) \left( \sum_{j_1=0}^1 \dots \sum_{j_n=0}^1 \right) f(X_{1(i_1+j_1)}, \dots, X_{n(i_n+j_n)}) \\ &\simeq \left(\frac{b-a}{2m}\right)^n \left( \sum_{i_1=0}^{m-1} \dots \sum_{i_n=0}^{m-1} \right) \left( \sum_{j_1=0}^1 \dots \sum_{j_n=0}^1 \right) f(X_{1(i_1+j_1)}, \dots, X_{n(i_n+j_n)}) \end{aligned}$$

$$I_n \simeq \left(\frac{b-a}{2m}\right)^n \left( \sum_{i_1=0}^{m-1} \dots \sum_{i_n=0}^{m-1} \right) \left( \sum_{j_1=0}^1 \dots \sum_{j_n=0}^1 \right) f(a + (i_1 + j_1)h, \dots, a + (i_n + j_n)h)$$

(II - 10)

### II-2-3 Formule de Simpson à n dimensions

La formule de Simpson pour le calcul d'une intégrale à une dimension est donnée par :

$$I_1 = \int_a^b f(x)dx \simeq \frac{(b-a)}{6} \left( f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right) \quad (\text{II} - 11)$$

Posons :  $w_0 = 1, w_1 = 4, w_2 = 1$  et  $X_{ij} = X_i + \frac{h}{2}j = a + ih + j\frac{h}{2}$

avec  $m$  subdivisions l'équation (II-10) peut s'écrire sous la forme :

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{m-1} \int_{X_i}^{X_{i+1}} f(x)dx \simeq \sum_{i=0}^{m-1} \frac{(X_{i+1} - X_i)}{6} \left( f(X_i) + 4f\left(\frac{X_i + X_{i+1}}{2}\right) + f(X_{i+1}) \right) \\ &= \frac{b-a}{6m} \sum_{i=0}^{m-1} \left( f(X_i) + 4f\left(\frac{X_i + X_{i+1}}{2}\right) + f(X_{i+1}) \right) = \frac{b-a}{6m} \sum_{i=0}^{m-1} (w_0 f(X_{i0}) + w_1 f(X_{i1}) + w_2 f(X_{i2})) \\ &= \frac{b-a}{6m} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^2 w_j f(X_{ij}) \\ I_1 &= \int_a^b f(x)dx \simeq \frac{b-a}{6m} \sum_{i=0}^{m-1} \sum_{j=0}^2 w_j f(a + ih + j\frac{h}{2}) \end{aligned} \quad (\text{II} - 12)$$

En deux dimensions la formule (II-12) devient :

$$I_2 = \int_a^b \int_a^b f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \approx \left(\frac{b-a}{6m}\right)^2 \sum_{i_1=0}^{m-1} \sum_{i_2=0}^{m-1} \sum_{j_1=0}^2 \sum_{j_2=0}^2 w_{j_1} w_{j_2} f\left(a + i_1 h + j_1 \frac{h}{2}, a + i_2 h + j_2 \frac{h}{2}\right) \quad (\text{II} - 13)$$

et la généralisation de l'expression (II-12) pour  $n$  dimensions donne :

$$I_n \approx \left(\frac{b-a}{6m}\right)^n \left(\sum_{i_1=0}^{m-1} \dots \sum_{i_n=0}^{m-1}\right) \left(\sum_{j_1=0}^2 \dots \sum_{j_n=0}^2\right) w_{j_1} \dots w_{j_n} f\left(a + i_1 h + j_1 \frac{h}{2}, \dots, a + i_n h + j_n \frac{h}{2}\right) \quad (\text{II} - 14)$$

## II-3 Méthode d'intégration de Monte Carlo

### II-3-1 Description de la méthode

Pour utiliser une méthode de Monte-Carlo pour le calcul d'une intégrale de la forme (II-1)[9], on doit tout d'abord mettre 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 :

$$E[f(x)] = \int_a^b f(x)\rho(x)dx \quad (\text{II} - 15)$$

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  $x_1, \dots, x_n$ .

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx = E[f(x)] \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) = \bar{Y} \quad (\text{II} - 16)$$

Ainsi un choix adéquat de  $\rho(x)$  permet d'estimer l'intégrale (II-1).

### II-3-2 Intégration Monte-Carlo avec échantillonnage uniforme

#### Cas d'une intégrale unidimensionnelle [10]:

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

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{Sinon} \end{cases} \quad (\text{II} - 17)$$

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

Dans ce cas l'intégrale (II-16) se réécrit :

$$E[f(x)] = \int_a^b \frac{1}{b-a} f(x) dx \Rightarrow \int_a^b f(x) dx = (b-a)E[f(x)] \quad (\text{II} - 18)$$

$$\Rightarrow I_1 = \int_a^b f(x) dx \simeq \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i) \quad (\text{II} - 19)$$

**Cas d'une intégrale multidimensionnelle [10]:**

Soit l'intégrale multidimensionnelle suivante :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) dv \quad (\text{II} - 20)$$

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

Pour faire simple on va choisir un domaine cubique  $D = ([a, b], \dots, [a, b]) \in \mathbb{R}^n$  de volume  $V = (b-a)^n$

On définit la fonction de densité de probabilité uniforme  $\rho(\vec{r})$  dans  $\mathbb{R}^n$  par :

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \frac{1}{(b-a)^n}, & a \leq x \leq b \\ 0, & \text{Sinon} \end{cases} \quad (\text{II} - 21)$$

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 :

$$I_n = (b-a)^n \iiint_D f(\vec{r}) \rho(\vec{r}) dv = (b-a)^n E[f(\vec{r})] \quad (\text{II} - 22)$$

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

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) dv \approx \frac{(b-a)^n}{N} \sum_{i=1}^N f(\vec{r}_i) \quad (\text{II} - 23)$$

**II-3-3 Convergence de la méthode**

Pour étudier la convergence de la méthode Monte Carlo, il faut évaluer l'erreur qui est définie par [11]:

$$\varepsilon_N = E(Y) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i = E(Y) - \bar{Y} \quad (\text{II} - 24)$$

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  $x_1, x_2, \dots, x_n$  i.i.d (indépendantes et identiquement distribuées) selon  $\rho(x)$ . Alors, la convergence de l'erreur  $\varepsilon$  est assurée par la loi des grands nombres qui stipule que la moyenne arithmétique :

$$\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i \quad (\text{II} - 25)$$

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  $\epsilon$  donnée :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P(|\varepsilon_N| > \epsilon) = 0 \quad (\text{II} - 26)$$

$P$  étant la probabilité.

### II-3-4 Vitesse de convergence

On étudie la vitesse de convergence d'une intégrale par la méthode Monte-Carlo par le théorème centrale limite.

Soit  $(Y_i, i \geq 1)$  une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées [11]. On suppose que  $E(|Y^2|) < +\infty$ . On note  $\sigma^2$  la variance de  $Y$  :

$$\sigma^2 = E((Y - E(Y))^2) = E(Y^2) - (E(Y))^2 \quad (\text{II} - 27)$$

La suite

$$\frac{\sqrt{N}}{\sigma} \varepsilon_N = \frac{\sqrt{N}}{\sigma} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i - E(Y) \right) = \frac{1}{\sigma\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N (Y_i - E(Y)) \quad (\text{II} - 28)$$

qui est aussi une variable aléatoire, converge en loi vers la loi normale centrée réduite. C'est-à-dire

$$\forall a \leq b \quad \lim_{N \rightarrow \infty} P\left(\frac{\sigma}{\sqrt{N}} a \leq \varepsilon_N \leq \frac{\sigma}{\sqrt{N}} b\right) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_a^b \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) dx \quad (\text{II} - 29)$$

et l'écart type de la variable aléatoire  $\varepsilon_N$  est  $\sigma_\varepsilon = \frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ . En d'autres termes, la vitesse de convergence de la méthode Monte-Carlo est de l'ordre de  $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$ . Ce constat reste valable quelque soit la dimension de l'intégrale. Ce qui est remarquable c'est que la vitesse de convergence ne dépend pas de la dimension  $n$  de l'intégrale, mais dépend uniquement du nombre de points d'intégration  $N$ .



**II-3-5 Estimation de la variance**

On présente l'erreur de la méthode de Monte-Carlo soit en donnant l'écart type de  $\varepsilon_N$ , c'est-à-dire  $\sigma/\sqrt{N}$ , soit en donnant un intervalle de confiance à 95% pour le résultat [12]. Si  $G$  est une loi normale centrée réduite, nous avons  $P(|G| \leq 1.96) = 0.95$ . On en déduit que pour  $N$  assez grand :

$$P\left(|\bar{Y}_N - E(Y)| \leq 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right) \sim 0.95 \tag{II - 30}$$

On est conduit à un intervalle de confiance à **95%** du type :

$$\left[\bar{Y}_N - 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}, \bar{Y}_N + 1.96 \frac{\sigma}{\sqrt{N}}\right] \tag{II - 31}$$

quand  $N \rightarrow \infty$ , on peut obtenir un estimateur de la variance de  $Y$  grâce à la formule :

$$\bar{\sigma}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y}_N)^2 \tag{II - 32}$$

$\bar{\sigma}^2$  est appelée la variance empirique de l'échantillon.

On calcul aussi la variance de  $I_n$  par

$$\boxed{\text{var}(I_n) \simeq \left[ \frac{(b-a)^n}{N} \right]^2 \sum_{i=1}^N (Y_i - \bar{Y})^2} \tag{II - 33}$$

**II-3-6 Méthode de réduction de la variance : échantillonnage préférentiel**

Les techniques de réduction de la variance sont des méthodes utilisées pour améliorer la méthode Monte-Carlo [11], c'est-à-dire réduire l'erreur  $\varepsilon_N$  en réduisant son écart-type (ou sa variance). L'idée générale de ces méthodes est de donner une autre représentation de  $E(Y)$  sous forme d'espérance d'une autre variable aléatoire  $Z$ , tout en ayant  $E(Y) = E(Z)$  mais avec une variance réduite  $\text{Var}(Z) < \text{Var}(Y)$ . L'une de ces méthodes est l'échantillonnage préférentiel décrit ci-dessous.

**II-3-6-1 Monte-Carlo avec échantillonnage préférentiel (MCEP)**

L'échantillonnage préférentiel réduit la variance, en effet sachant que nous avons la liberté de choisir la densité de probabilité utilisée lors de l'intégration, en choisissant des échantillons à partir d'une densité de probabilité  $\rho(x)$  qui a une forme similaire [6] à la fonction  $f(x)$  qui est intégrée. On peut réduire la variance.

**Cas d'une intégrale unidimensionnelle [10]:**

Revenons à l'intégrale (II-1) :

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

Soit  $\rho(x) = g(x)$  une densité de probabilité normalisé avec  $g(x)$  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) :

$$\frac{f(x)}{g(x)} \simeq cte \text{ sur } [a, b].$$

$g$  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 :

$$I_1 = \int_a^b \frac{f(x)}{g(x)} \rho(x) dx = E \left[ \frac{f(X)}{g(X)} \right] \quad (\text{II} - 34)$$

L'estimateur de l'intégral  $I_1$  devient :

$$I_1 = \int_a^b f(x) dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{g(x_i)} = \bar{y}, y(x) = \frac{f(x)}{g(x)} \quad (\text{II} - 35)$$

Où  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  est un échantillon i.i.d. selon la nouvelle densité  $\rho(x) = g(x)$ .

La variance de  $I_1$  est alors :

$$\begin{aligned} \text{Var}(I_1) &\approx \text{Var} \left( \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \right) = \left( \frac{1}{N} \right)^2 \sum_{i=1}^N \text{Var} \left( \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \right) = \left( \frac{1}{N} \right)^2 N \text{Var} \left( \frac{f(x)}{g(x)} \right) \\ \text{Var}(I_1) &= \frac{1}{N} \text{Var}(y) \end{aligned} \quad (\text{II} - 36)$$

Et son estimateur :

$$\text{Var}(I_1) \simeq \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2, \quad y_i = \frac{f(x_i)}{g(x_i)} \quad (\text{II} - 37)$$

Ainsi que son écart type :

$$\sigma(I_1) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sigma(y) \quad (\text{II} - 38)$$

### Cas d'une intégrale multidimensionnelle [10]:

Nous pouvons généraliser cette technique à  $n$  dimensions de façon assez naturelle. Soit l'intégrale multidimensionnelle (II-21) :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) d\mathbf{v}$$

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 :

$$I_n = \iiint_D \frac{f(\vec{r})}{g(\vec{r})} \rho(\vec{r}) dv = E \left[ \frac{f(\vec{r})}{g(\vec{r})} \right] \quad (\text{II} - 39)$$

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

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) dv \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{f(\vec{r}_i)}{g(\vec{r}_i)} = \bar{y} \quad (\text{II} - 40)$$

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:

$$\text{Var}(I_n) = \frac{1}{N} \text{Var}(y) \quad (\text{II} - 41)$$

Ainsi que son estimateur :

$$\text{Var}(I_n) \approx \frac{1}{N^2} \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2 \quad (\text{II} - 42)$$

## II-4 Application au calcul d'une intégrale multidimensionnelle

### II-4-1 Objectif

Nous présentons ici un exemple concret de calcul d'une intégrale multidimensionnelle avec une dimension variant de  $(n=1)$  à  $(n=8)$  dimensions en utilisant les deux approches : Newton-Cotes composites (Rectangle, Trapèze et Simpson) et Monte-Carlo (simple et avec échantillonnage préférentiel), puis on va présenter une comparaison entre ces méthodes. Le calcul a été réalisé à l'aide du logiciel « Maple » et le choix de s'arrêter à la dimension  $(n=8)$  est dicté par les capacités informatiques en temps de calcul à notre disposition.

### II-4-2 Exemple d'une intégrale multidimensionnelle

Soit la fonction  $f(\vec{r})$  à  $n$  variable  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  définie sur  $D = ([0,1/2], [0,1/2], \dots, [0,1/2])$  par

$$f(\vec{r}) = e^{-\vec{r}^2} = e^{-(x_1^2+x_2^2+\dots+x_n^2)} \quad (\text{II} - 43)$$

Nous voulons calculer l'intégrale suivante :

$$I_n = \iiint_D f(\vec{r}) dv = \int_0^{1/2} \int_0^{1/2} \dots \int_0^{1/2} e^{-(x_1^2+x_2^2+\dots+x_n^2)} dx_1 dx_2 \dots dx_n \quad (\text{II} - 44)$$

Cette intégrale peut être calculée de façon exacte en séparant les variables

$$I = \int_0^{1/2} e^{-x_1^2} dx_1 \dots \int_0^{1/2} e^{-x_n^2} dx_n = \left( \int_0^{1/2} e^{-x_1^2} dx_1 \right)^n = \left[ \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erf} \left( \frac{1}{2} \right) \right]^n \quad (\text{II} - 45)$$

$$I = (0.4612810064)^n \quad (\text{II} - 46)$$

A l'aide de logiciel « Maple » on a évalué l'intégrale  $I_n$  pour ( $n = 1, 2 \dots 8$ ) par la méthode des Rectangles, Trapèzes et Simpson et par les méthodes de Monte-Carlo simple (MCS) (ou échantillonnage uniforme) et avec échantillonnage préférentiel (MCEP) pour différentes valeurs du nombre de points d'intégration  $N$  de la fonction  $f(\vec{r})$  (points  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ ). Pour les méthodes de Newton-Cotes composites, ce nombre  $N$  dépend du nombre de subdivisions  $m$  de l'intervalle  $[a, b] = \left[0, \frac{1}{2}\right]$ .

Pour la méthode MCEP, la fonction  $g(x)$  (proche de  $f(x)$ ) utilisée pour la génération de l'échantillon des nombres aléatoires est le polynôme représentant le développement de Taylor de  $f(x)$  à l'ordre 2 au voisinage de  $x = 0$  et normalisée sur  $[a, b] = \left[0, \frac{1}{2}\right]$  :

à une dimension :

$$f(x) = e^{-x^2} \Rightarrow g(x) = \frac{24}{11}(1 - x^2) ; \int_0^{1/2} g(x) dx = 1 \quad (\text{II} - 47)$$

à  $n$  dimensions

$$f(\vec{r}) = e^{-\vec{r}^2} = \prod_{i=1}^n e^{-x_i^2} \Rightarrow g(\vec{r}) = \prod_{i=1}^n \left[ \frac{24}{11}(1 - x_i^2) \right] ; \iiint_D g(\vec{r}) dv = 1 \quad (\text{II} - 48)$$

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

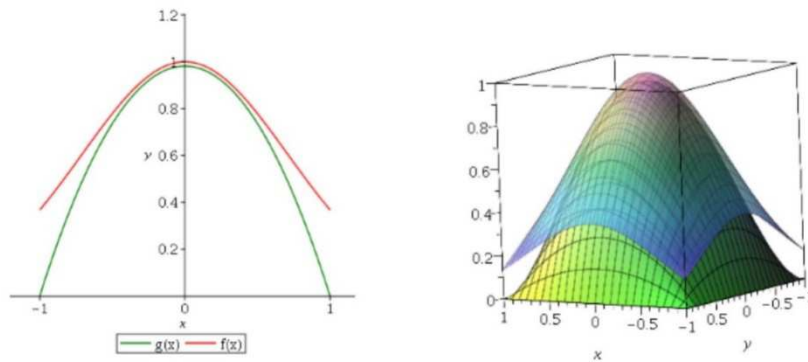


Figure II-1 : Courbes des fonctions  $f(\vec{r})$  et  $g(\vec{r})$  en dimension  $n = 1$  (à gauche) et  $n = 2$  (à droite).

### II-4-3 Résultats et discussion

Connaissant la valeur exacte  $I_n$  de l'intégrale, nous avons calculé l'erreur relative  $\varepsilon_N = \frac{|I - I_n|}{I_n}$  pour chaque méthode pour les 8 dimensions  $n = 1, \dots, 8$ . L'évolution de cette erreur relative pour les différentes méthodes est représentée dans les courbes suivantes en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  :

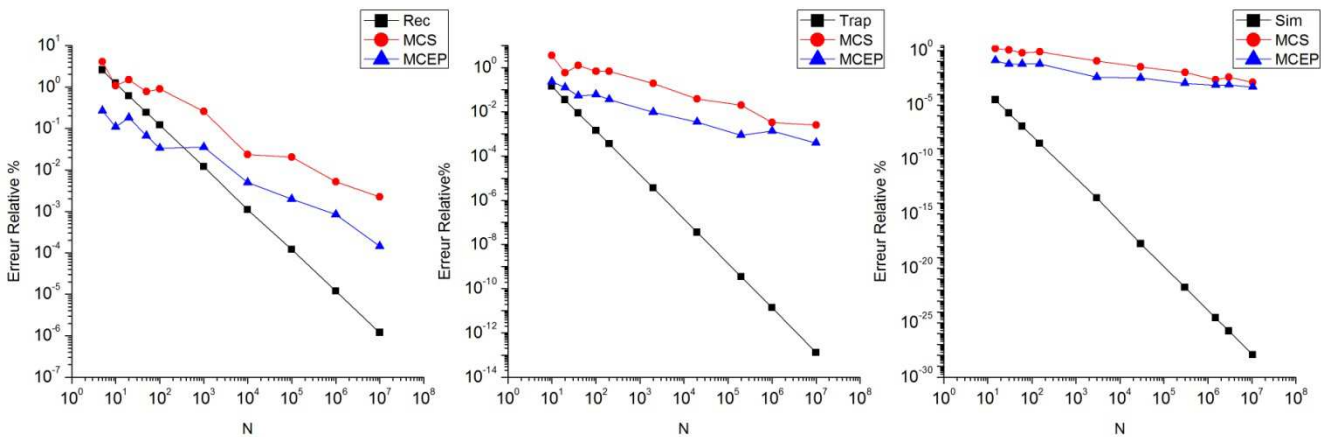


Figure II-2 : Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 1$ .

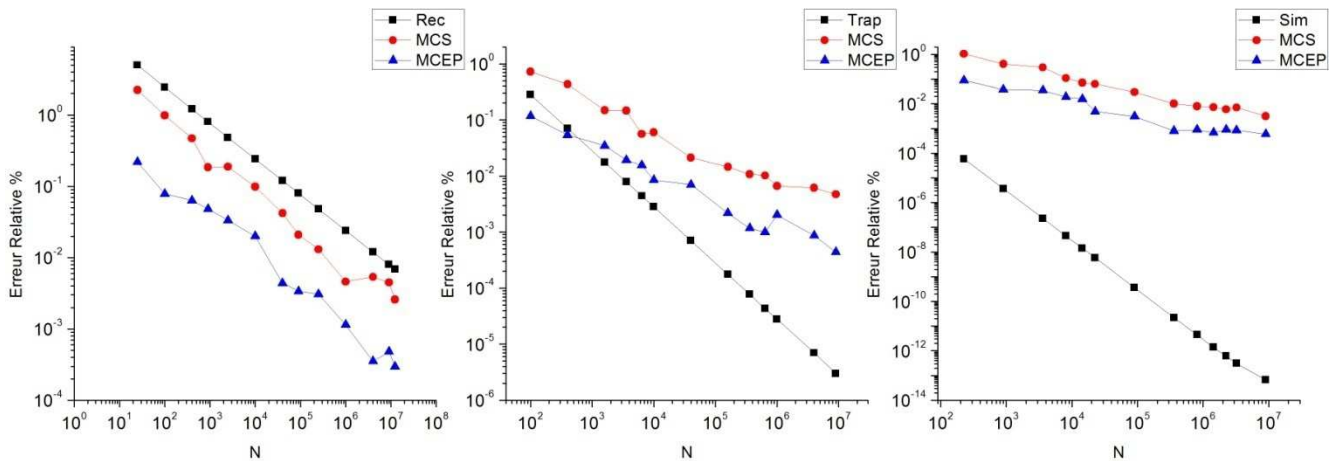


Figure II-3 :Variation de l’erreur relative en fonction du nombre de points d’intégration N en dimension  $n = 2$ .

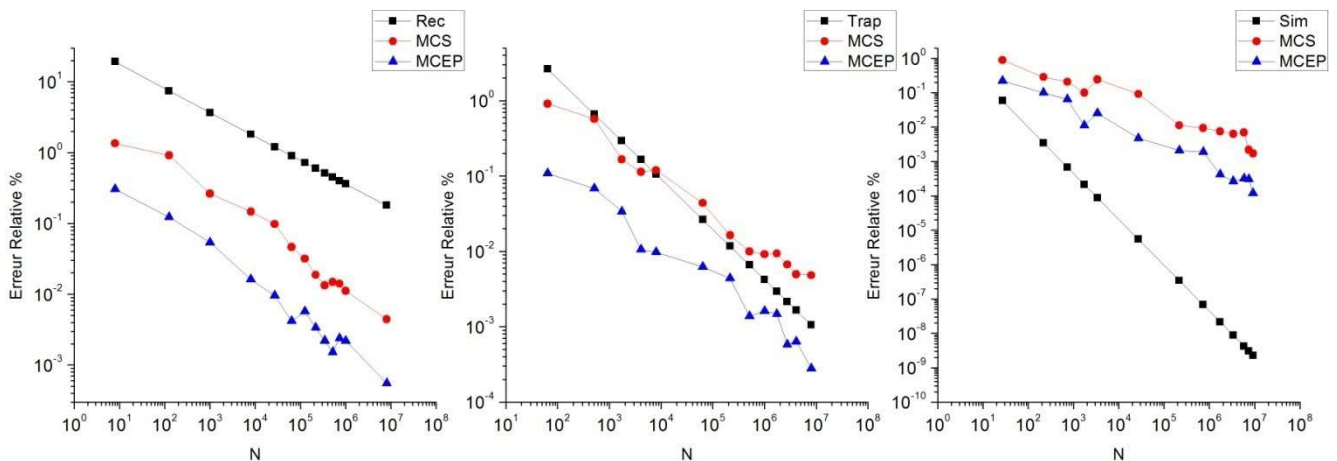


Figure II-4 :Variation de l’erreur relative en fonction du nombre de points d’intégration N en dimension  $n = 3$ .

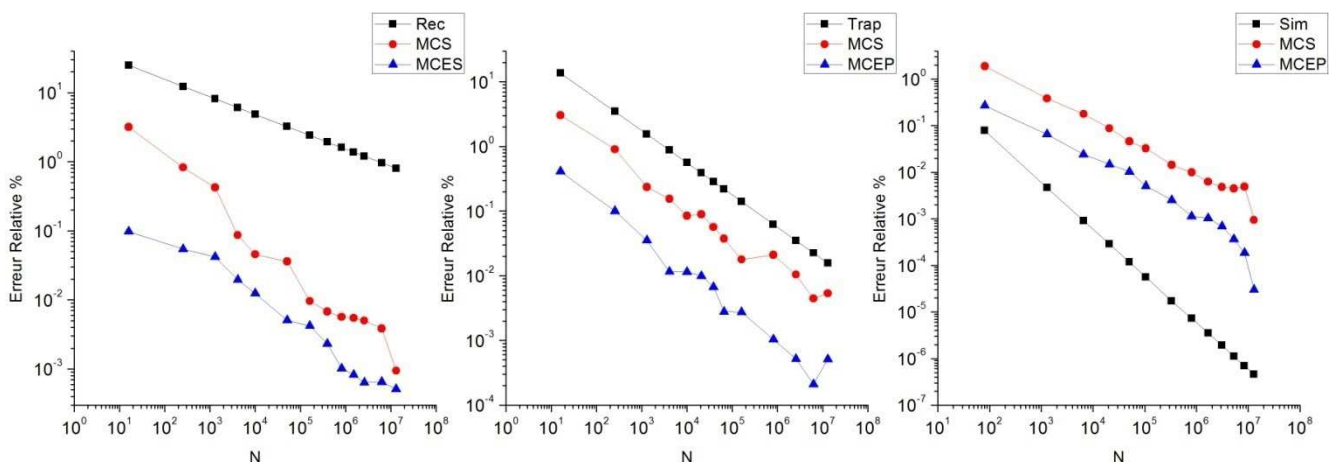


Figure II-5 :Variation de l’erreur relative en fonction du nombre de points d’intégration N en dimension  $n = 4$ .

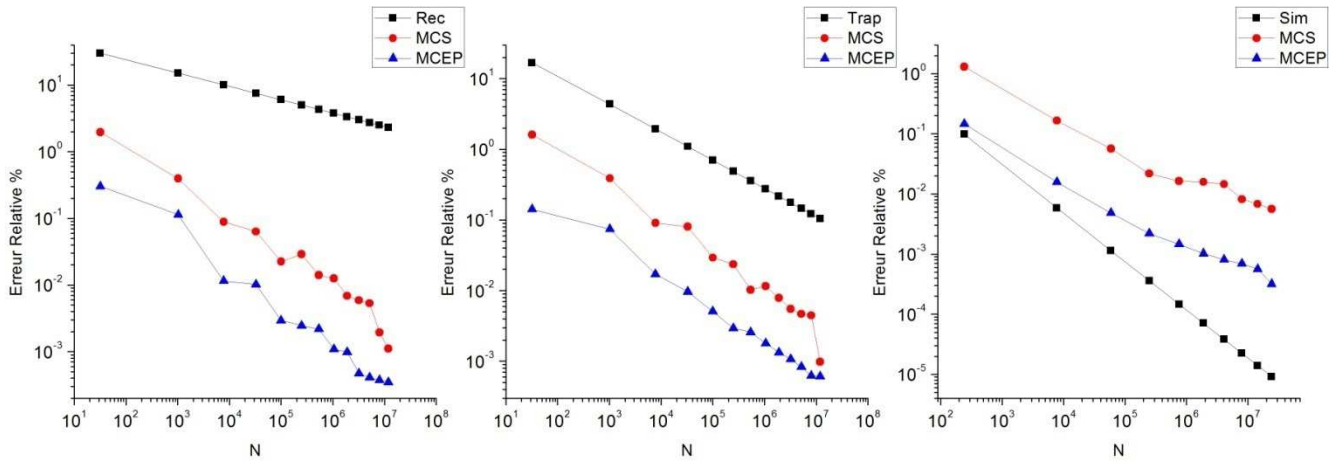


Figure II-6 :Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration N en dimension  $n = 5$ .

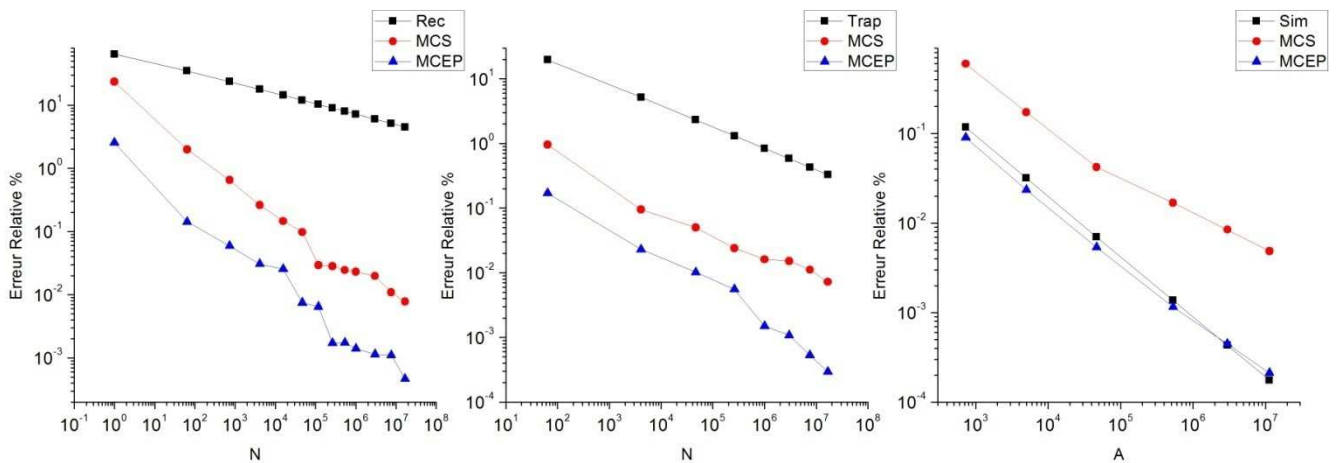


Figure II-7 : Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration N en dimension  $n = 6$ .

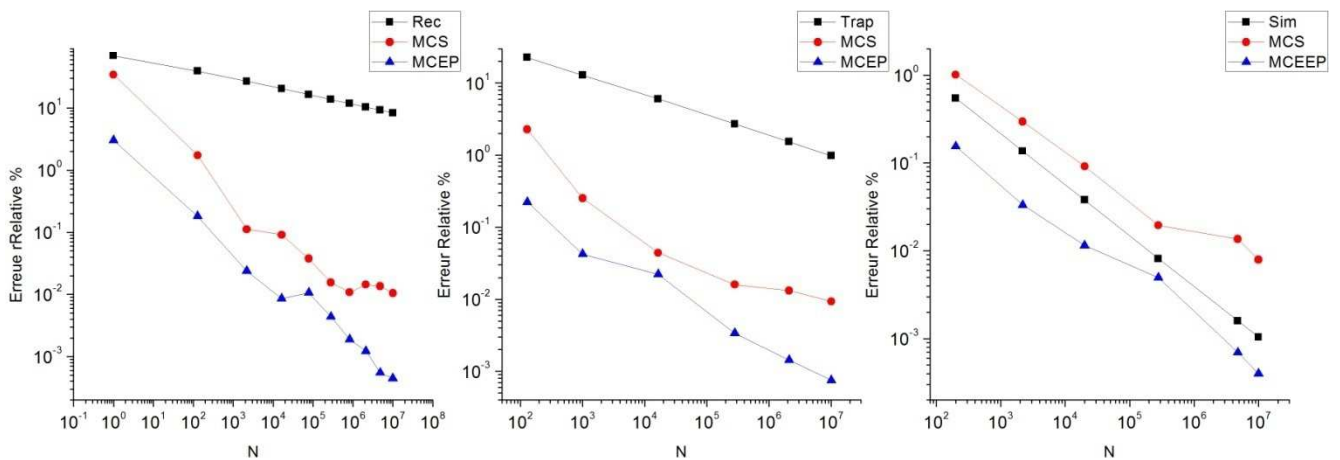
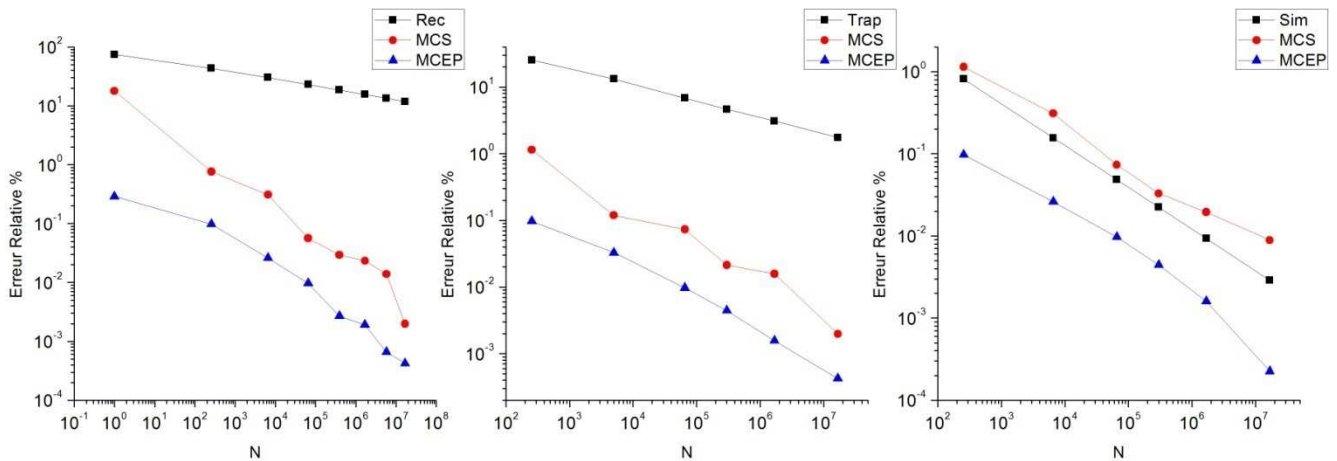


Figure II-8 :Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration N en dimension  $n = 7$ .



**Figure II-9 :** Variation de l'erreur relative en fonction du nombre de points d'intégration  $N$  en dimension  $n = 8$ .

### Discussion des résultats :

D'après les courbes précédentes nous remarquons que l'erreur relative diminue avec l'augmentation du nombre de points d'intégration de la fonction  $f(\vec{r})$  ce qui est tout à fait normal. La précision augmente avec le nombre de points pour toutes les méthodes. Les techniques Monte-Carlo sont plus avantageuses que la méthode classique des rectangles même à basse dimension (à partir de  $n = 2$ ). Comparativement à la méthode des trapèzes (en noire) la méthode MCS (en rouge) devient plus précise à partir de la dimension  $n = 4$  et la méthode MCEP (en bleu) à partir de  $n = 3$ . On observe par ailleurs que la méthode de Simpson perd son avantage devant MCEP dès la dimension  $n = 7$  et devant MCS probablement dès  $n > 9$ . On note aussi l'avantage de l'échantillonnage préférentiel, en effet MCEP est toujours un ordre de grandeur plus précise que MCS. Notons enfin que les fluctuations de l'erreur pour les méthodes MC sont dues au caractère stochastique de ces méthodes, l'évolution de l'erreur pour les méthodes déterministes est linéaire (en échelle log).

Le Tableau suivant illustre une comparaison entre les méthodes classiques et celle de MC pour un nombre précis  $N = 10^5$  du nombre de points en fonction de la dimension  $n$ .



| dimension (n)   | 1        | 2         | 3         | 4         | 5         | 6        | 7         | 8         |
|-----------------|----------|-----------|-----------|-----------|-----------|----------|-----------|-----------|
| Erreur Rec (%)  | 0.000119 | 0,074816  | 0,77825   | 2,709968  | 6,01965   | 10,5273  | 15,9139   | 21,312796 |
| Erreur Trap (%) | 1,41E-09 | 2,79E-04  | 0,019716  | 0,178878  | 0,702083  | 1,816793 | 3,618223  | 6,111825  |
| Erreur Simp (%) | 1,50E-20 | 2,67E-10  | 9,53E-07  | 5,91E-05  | 7,47E-04  | 0,004172 | 0,014823  | 0,039056  |
| Erreur MCS (%)  | 0,020348 | 0,0207713 | 0,0307033 | 0,0254717 | 0,0304663 | 0,034662 | 0,0301723 | 0,0552137 |
| Erreur MCEP (%) | 0,001664 | 0,003137  | 0,0045007 | 0,004157  | 0,0038527 | 0,005863 | 0,0074627 | 0,007608  |

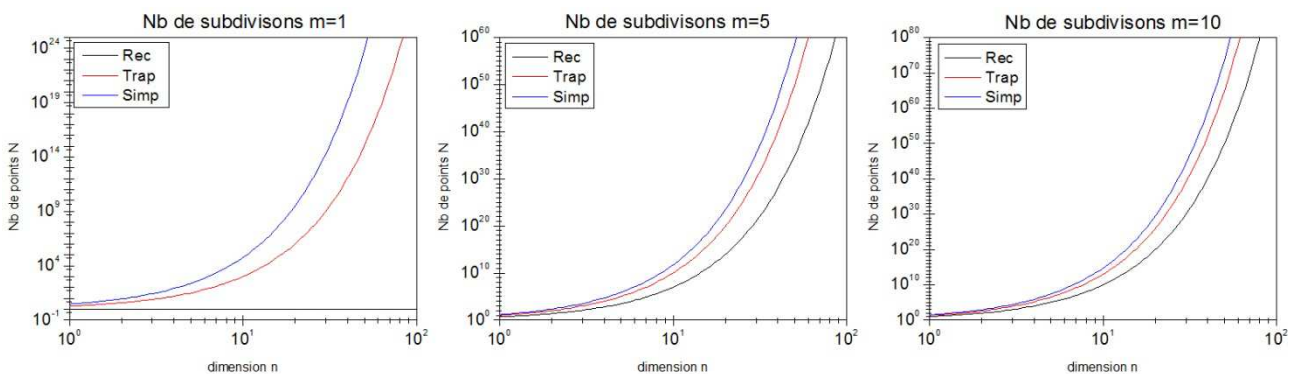
**Tableau II-1** : Les erreurs associées à l'évaluation de l'intégrale de la fonction  $f(\vec{r})$  par les différents méthodes pour  $N = 10^5$  et pour des dimensions différentes  $n=1, \dots, 8$ .

Comme on le voit dans le tableau (II-1) à  $N = 10^5$  pour le cas unidimensionnel, les méthodes classiques sont plus efficaces. Par contre, pour des intégrales multidimensionnelles (dimension plus grande que 2), les techniques Monte Carlo notamment MCEP, commencent à prendre l'avantage : sur les rectangles à partir de  $n = 2$  ou 3, sur les trapèzes à partir de  $n = 3$  ou 4 et sur Simpson à partir de  $n = 7$ .

**Malédiction de la dimensionnalité** : Pour illustrer la difficulté rencontrée avec les méthodes classiques dites déterministes lorsque la dimension devient grande, exprimons la relation entre le nombre de points d'intégration ( $N$ ), la dimension de l'intégrale ( $n$ ) et le nombre de subdivisions ( $m$ ) de l'intervalle d'intégration  $[a, b]$ . Il est facile de montrer à partir des formules d'intégration de Newton-Cotes à  $n$  dimension que  $N$  est donnée pour les trois approches par les formules :

$$\text{Rectangle : } N = m^n, \quad \text{Trapèze : } N = 2^n m^n, \quad \text{Simpson : } N = 3^n m^n$$

Ces formules sont tracés ci-dessous en fonction de la dimension  $n$  pour 3 valeurs de  $m$  en utilisant des axes logarithmiques.



**Figure II-10** : Variations du nombre de points d'intégration en fonction de la dimension ( $n$ ) pour les trois méthodes de Newton-Cotes et pour trois valeurs du nombre de subdivisions  $m=1, 5$  et  $10$ .

Le nombre de points d'intégration  $N$  est d'une importance cruciale dans le calcul numérique d'intégrales, il détermine à la fois la précision du calcul et le temps nécessaire pour effectuer ce calcul. En effet la majorité du temps-processeur (CPU time) est dépensée dans l'évaluation des valeurs de la fonction aux points d'intégration. Celles-ci étant au nombre de  $N$ , il s'en suit que le temps de calcul  $T$  est sensiblement proportionnel à  $N$ : ( $T \sim N$ ).

Or les figures (II-10) montrent que  $N$  (et donc  $T$ ) varie de façon exponentielle en fonction de la dimension  $n$  de l'intégrale quelques soit la subdivision  $m$  utilisée (sauf pour le cas simpliste et sans intérêt  $m=1$  pour la méthode de rectangle où le nombre  $N$  est constant et égale à 1). Aussi, la vitesse de variation associée à la méthode de Simpson est plus grande que celle associée à la méthode de Trapèze et rectangles.

Dans les tableaux suivants, on présente quelques chiffres du nombre  $N$ , du temps de calcul  $T$  et de l'erreur correspondante pour plusieurs dimension  $n$  et pour  $m = 1$  et  $m = 5$  subdivisions. On traite uniquement la méthode trapèze et Simpson.

**R.** Le temps  $T$  est celui d'un ordinateur avec processeur Intel *i3*, cadencé à une fréquence de 2Ghz.

| Trap | Dimension n  | 10       | 20       | 30       | 50       | 100       |
|------|--------------|----------|----------|----------|----------|-----------|
|      | Nb de points | 1,02E+03 | 1,05E+06 | 1,07E+09 | 1,13E+15 | 1,27E+30  |
| 1    | T (jours)    | 4,10E-07 | 4,20E-04 | 4,30E-01 | 4,51E+05 | 5,08E+20  |
| 1    | Erreur (%)   | 31,98    | 63,00    | 94,02    | 156,06   | 311,16    |
|      | Nb de points | 1,00E+10 | 1,00E+20 | 1,00E+30 | 1,00E+50 | 1,00E+100 |
| 5    | T (jours)    | 4,00E+00 | 4,00E+10 | 4,00E+20 | 4,00E+40 | 4,00E+90  |
| 5    | Erreur (%)   | 1,40     | 2,80     | 4,20     | 7,00     | 13,99     |

| Simp | Dimension n  | 10       | 20       | 30       | 50       | 100       |
|------|--------------|----------|----------|----------|----------|-----------|
|      | Nb de points | 5,90E+04 | 3,49E+09 | 2,06E+14 | 7,18E+23 | 5,15E+47  |
| 1    | T (jours)    | 4,05E-05 | 2,39E+00 | 1,41E+05 | 4,92E+14 | 3,53E+38  |
| 1    | Erreur (%)   | 0,20     | 0,39     | 0,59     | 0,98     | 1,97      |
|      | Nb de points | 5,77E+11 | 3,33E+23 | 1,92E+35 | 6,38E+58 | 4,07E+117 |
| 5    | T (jours)    | 3,95E+02 | 2,28E+14 | 1,31E+26 | 4,37E+49 | 2,79E+108 |
| 5    | Erreur (%)   | 2,86E-04 | 5,69E-04 | 8,52E-04 | 1,42E-03 | 2,83E-03  |

**Tableau II-2 :** Variation du nombre de points ( $N$ ), du temps de calcul  $T$  et de l'erreur relative en fonction de la dimension  $n$  pour les méthodes des trapèzes et Simpson.

## Chapitre II : Intégration Monte Carlo Multidimensionnelle

Pour  $m = 5$  subdivisions, le temps de calcul reste gérable pour les dimensions  $n \sim 10$ , on a  $T=4$  jours pour trapèze et  $T=395$  jours pour Simpson mais à partir de dimension  $n \sim 20$ , le nombre de points  $N$  devient tellement grand ( $N = 10^{20}$  pour trapèze et  $N = 3,33 \cdot 10^{23}$  pour Simpson) que le temps de calcul devient gigantesque ;  $T = 4 \cdot 10^{10}$  jours  $\approx 100$  millions d'année pour trapèze et  $T = 2,28 \cdot 10^{14}$  jours  $\approx 624$  milliard d'année pour Simpson. C'est ce que les mathématiciens appellent la malédiction de la dimensionnalité.

Le calcul d'intégrale à grandes dimensions est tout simplement impossible à réaliser avec des méthodes déterministes à cause de cet obstacle. Même avec une seule subdivision le calcul devient astronomiquement long à partir des dimensions  $n \sim 50$ .

Sur les deux tableaux suivants (II-3), de la même manière que pour les méthodes classiques, nous avons reportés les valeurs du temps de calcul et de l'erreur pour les deux méthodes de Monte-Carlo MCS et MCEP et ce pour 3 valeurs du nombre de points :  $N = 10^3$ ,  $N = 10^5$  et  $N = 10^7$ .

| MCS      | Dimension n | 10     | 20      | 30      | 50      | 100     |
|----------|-------------|--------|---------|---------|---------|---------|
| N= 1000  | T (s)       | 0,07   | 0,13    | 0,19    | 0,31    | 0,60    |
|          | Erreur (%)  | 0,44   | 0,57    | 0,7     | 0,96    | 1,61    |
| N= 1E+05 | T (s)       | 7,37   | 13,17   | 18,97   | 30,57   | 59,57   |
|          | Erreur (%)  | 0,048  | 0,079   | 0,109   | 0,170   | 0,322   |
| N= 1E+07 | T (s)       | 737,00 | 1317,00 | 1897,00 | 3057,00 | 5957,00 |
|          | Erreur (%)  | 0,011  | 0,022   | 0,032   | 0,053   | 0,105   |

| MCEP     | Dimension n | 10       | 20       | 30       | 50       | 100      |
|----------|-------------|----------|----------|----------|----------|----------|
| N= 1000  | T (s)       | 0,19     | 0,37     | 0,55     | 0,92     | 1,82     |
|          | Erreur (%)  | 0,065    | 0,087    | 0,109    | 0,153    | 0,263    |
| N= 1E+05 | T (s)       | 19,10    | 37,20    | 55,30    | 91,50    | 182,00   |
|          | Erreur (%)  | 0,010    | 0,018    | 0,026    | 0,043    | 0,084    |
| N= 1E+07 | T (s)       | 1910,00  | 3720,00  | 5530,00  | 9150,00  | 18200,00 |
|          | Erreur (%)  | 6,24E-04 | 9,12E-04 | 1,20E-03 | 1,78E-03 | 3,22E-03 |

**Tableau II-3 :** Variation du nombre de points (N), du temps de calcul T et de l'erreur relative en fonction de la dimension  $n$  pour les méthodes de Monte-Carlo.

Premier constat en faveur des méthodes MC : Le temps de calcul se compte en secondes avec des valeurs de l'erreur relativement acceptables. Même si celle-ci augmente lentement avec la dimension, mais il reste toujours de la marge pour améliorer cette erreur en augmentant N. Car en effet

T semble augmenter linéairement avec N contrairement aux méthodes déterministe. Ce constat montre l'avantage des méthodes MC pour le calcul des intégrales à haute dimension et ce malgré la convergence lente. Il faut noter que le problème de la dimensionnalité ne se limite pas uniquement aux méthodes de Newton-Cotes, mais concerne toutes les méthodes déterministes (Gauss, Romberg...etc) qui utilisent un nombre de point d'intégration supérieur à 1 sur chaque axe de l'espace  $\mathbb{R}^n$ .

Une dernière remarque que l'on peut faire concernant les méthodes Monte Carlo: pour N fixé, le temps nécessaire pour l'évaluation de l'intégrale par la méthode MCS est plus petit que celui de MCEP, par contre l'erreur de la méthode MCEP est meilleure que celle de MCS. Ainsi la méthode MCEP coûte plus chère en terme de temps de calcul mais avec de meilleurs précisions.

## **Chapitre III**

# **Méthode MC quantique variationnelle, application à l'atome d'hydrogène**

### III-1 Introduction :

Les méthodes de Monte Carlo quantiques (QMC) sont de puissantes approches stochastiques pour calculer les propriétés de l'état fondamental des systèmes quantiques. Ils ont été appliqués avec succès à une grande variété de problèmes décrits par un hamiltonien de type Schrödinger [13,14]. Au cours des dernières décennies, le succès des méthodes Monte Carlo quantiques (QMC) a été remarquable notamment dans la résolution des problèmes à N corps en mécanique quantique et en physique nucléaire [15]. Pour de petits systèmes tel que l'atome d'hélium [16] et les molécules isolées, matériel de base de la chimie [17], les méthodes QMC ont produit des solutions «exactes» de l'équation de Schrödinger et des solutions des plus précises disponibles pour les systèmes très larges à grand nombre de degré de liberté.

La gamme des applications est impressionnante, on peut mentionner le pliage des molécules de protéines, les interactions dans les liquides, les structures de bandes dans les cristaux, les points quantiques, les structures enzymatiques, les surfaces d'énergie potentielle pour les réactions de tous types, la structure d'une goutte d'eau, l'énergétique des excitons, les liaisons dans les noyaux et structure nucléaire... etc. Beaucoup de ces problèmes sont nouveaux et ont pu être abordés avec succès pour la première fois à l'aide des méthodes QMC.

Dans ce chapitre nous allons étudier l'une des méthodes QMC, il s'agit d'une méthode très répandue et connue sous le nom de Monte Carlo quantique variationnelle (VQMC). L'objectif est d'appliquer cette méthode à la résolution de l'équation de Schrödinger pour un système simple qui est l'atome d'hydrogène et plus précisément dans le calcul de l'énergie et la fonction d'onde de l'état fondamental.

### III-2 Aperçu de quelques méthodes Monte Carlo quantiques :

Il existe plusieurs variétés de méthodes Monte Carlo quantiques, nous allons brièvement citer par la suite quelques une de ces méthodes les plus utilisées et le principe de leurs fonctionnement [15].

#### III-2-1 Monte Carlo quantique variationnelle (VQMC)

En physique computationnelle, la méthode Monte Carlo quantique variationnelle (VQMC) est une méthode de Monte Carlo quantique qui applique la méthode variationnelle pour approximer l'état

fondamental d'un système quantique. L'idée de base est d'utiliser l'approche variationnelle basée sur la minimisation de l'énergie totale du système par rapport à une fonction d'onde générique  $\psi(\alpha)$  dépendant d'un certain nombre de paramètres  $\alpha$ . L'énergie totale d'un système à n-corps se présente sous la forme d'une intégrale multidimensionnelle qui est numériquement évalué à l'aide de la méthode Monte Carlo sous la forme d'une espérance.

L'intégration de Monte Carlo est particulièrement cruciale dans ce type de problèmes car la dimension de l'espace de Hilbert à plusieurs corps, comprenant toutes les valeurs possibles des configurations, croît typiquement de façon exponentielle avec la taille du système physique. D'autres approches de l'évaluation numérique des valeurs d'espérance de l'énergie limiteraient donc en général les applications à des systèmes beaucoup plus petits que ceux analysables grâce à l'approche Monte Carlo.

Nous verrons ultérieurement plus en détail la méthode VQMC.

### **III-2-2 Monte Carlo par fonction de Green (GFMC)**

La puissance et l'importance de la méthode Monte Carlo par fonction de Green est qu'elle fournit un moyen par lequel l'équation de Schrödinger et l'équation de Bloch peuvent être résolus exactement pour les systèmes bosoniques à N corps [18] et aussi (approximativement) pour les systèmes de fermions [15,19]. GFMC étant une méthode de Monte Carlo, les solutions sont soumises aux erreurs de l'échantillonnage statistique. La méthode est basée sur le fait que l'équation de Schrödinger peut être transformée en une équation intégrale en utilisant la fonction de Green pour un opérateur approprié, cette fonction de Green n'est cependant généralement pas connue. Les marches aléatoires inhérentes aux méthodes Monte Carlo peuvent alors être construites pour générer les fonctions de Green requises. L'intégration Monte Carlo est utilisée pour résoudre ces équations intégrales et l'erreur statistique peut être réduite par l'introduction de l'échantillonnage d'importance

### **III-2-3 Monte Carlo par diffusion (DMC)**

Une approche alternative pour étudier les systèmes quantiques implique l'échantillonnage d'une fonction de Green approximative. La méthode Monte Carlo quantiques par diffusion est basée sur la transformation de l'équation de Schrödinger dépendante du temps en utilisant un temps

imaginaire [14] :  $t \rightarrow \frac{it}{\hbar}$ . Cette transformation produit une équation équivalente à l'équation de diffusion classique avec une source  $\phi$  et énergie d'essai  $E_T$ .

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = (\nabla^2 - \phi - E_T) \psi \quad (\text{III} - 1)$$

et là aussi l'intégration Monte Carlo est utilisée pour résoudre numériquement cette équation.

### III-2-4 Monte Carlo par intégrale de chemin (PIMC)

La méthode Monte Carlo par intégrale de chemin (PIMC) [19] est une méthode de Monte Carlo quantique qui se base sur la formulation en intégrale de chemin de la mécanique statistique quantique. Elle est particulièrement utilisée pour les systèmes de bosons à température non-nulle [18,20]. Ces systèmes sont équivalents à des systèmes statistiques classiques de polymères en interaction. La théorie est généralement appliquée pour calculer les propriétés thermodynamiques telles que l'énergie interne, la capacité thermique, ou l'énergie libre. Comme pour toutes les approches basées sur la méthode de Monte Carlo, l'intégration Monte Carlo est utilisée pour intégrer numériquement l'intégrale de chemin avec un grand nombre de points.

PIMC prend en compte tous les effets quantiques (à l'exception de l'interaction d'échange). Une des premières applications de la méthode fut l'étude de l'hélium liquide [20]. Elle a ensuite été étendue pour inclure l'ensemble grand canonique et l'ensemble microcanonique .

### III-3 Méthode variationnelle en mécanique quantique

L'équation de Schrödinger en physique quantique ne peut être résolue de façon exacte que pour quelques cas simples qui impliquent un nombre très limité de particules. Or les systèmes quantiques réels sont décrits par des équations à n-corps qu'on ne peut résoudre que de manière approchée grâce à diverses techniques d'approximation [21].

L'une des méthodes d'approximation en mécanique quantique est la méthode des variations.



### **III-3-1 principe de la méthode**

Considérons un système physique quelconque dont l'hamiltonien  $H$  est indépendant du temps. Nous supposons, pour simplifier les notations, que le spectre de  $H$  est entièrement discret et non dégénéré [22] :

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (\text{III} - 2)$$

Lorsqu'on ne sait pas calculer exactement les valeurs propres  $E_n$  et les  $|\varphi_n\rangle$ , la méthode des variations permet d'en calculer des valeurs approchées.

### **III-3-2 Propriété du niveau fondamental et théorème de Ritz**

Considérons un ket quelconque  $|\psi\rangle$  de l'espace des états du system [16]. La valeur moyenne de l'hamiltonien  $H$  (ou de l'énergie) dans l'état  $|\psi\rangle$  est :

$$\langle H \rangle = E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (\text{III} - 3)$$

Le théorème de Ritz stipule que l'énergie de l'état fondamental (plus petite valeur propre de  $H$ ) est une borne inférieure à la valeur moyenne  $\langle E \rangle$ .

$$\frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0 \quad (\text{III} - 4)$$

En effet, si :  $|\psi\rangle = \sum_n c_n |\varphi_n\rangle$  et  $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2$  alors :

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = \sum_n |c_n|^2 E_n \geq E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0 \langle \psi | \psi \rangle \quad (\text{III} - 5)$$

L'égalité se produit si et seulement si  $|\psi\rangle$  est vecteur propre de  $H$  avec la valeur propre  $E_0$  et dans ce cas tous les coefficients  $c_n$  doivent s'annuler à l'exception de  $c_0$ .

De façon plus générale, le théorème de Ritz montre que la valeur moyenne de l'hamiltonien  $H$  est stationnaire au voisinage de ses valeurs propres discrètes.

Ces propriétés servent de base à une méthode de détermination approchée de  $E_0$  (ou des valeurs propres supérieurs  $E_n$ ). Pour l'état fondamental, on choisit (en principe de façon arbitraire, ou en utilisant des critères physiques liées aux symétries de l'hamiltonien) une famille de kets  $|\psi(\alpha)\rangle$  dépendant d'un certain nombre de paramètres  $\alpha$ ; on calcule la valeur moyenne  $\langle H \rangle(\alpha)$  de

l'hamiltonien  $H$  dans ces états, et on minimise  $\langle H \rangle(\alpha)$  par rapport aux paramètres  $\alpha$  ; la valeur minimale ainsi obtenue constitue une approximation du niveau fondamental  $E_0$  du système.

On peut aussi généraliser cette méthode et l'appliquer à la détermination approchée des autres valeurs propres de l'hamiltonien  $H$  : si la fonction  $\langle H \rangle(\alpha)$  obtenue à partir des kets d'essai  $|\psi(\alpha)\rangle$  présente plusieurs extremums, ceux-ci fournissent des valeurs approchées de certaines des énergies  $E_n$ .

## **III-4 Application de la méthode VQMC à l'atome d'hydrogène**

### **III-4-1 Motivation**

Les méthodes Monte Carlo quantiques sont plus adaptées aux problèmes comportant un grand nombre de particules étant donné que ces systèmes comportent des intégrations multidimensionnelles dont la dimension augmente avec le nombre de particules [23]. L'application de la méthode à l'atome d'hydrogène, qui est un problème à deux corps dont la solution exacte est connue, est plus motivée par un souci pédagogique et constitue une première introduction facile à assimiler de la méthode Monte Carlo quantique variationnelle (VQMC).

### **III-4-2 Principe de la méthode VQMC**

La méthode VQMC [19,24] est divisée en deux parties, la partie variationnelle qui consiste à minimiser l'énergie moyenne par rapport à des paramètres  $\alpha$  dans la fonction d'onde choisie et la partie Monte Carlo qui évalue cette valeur moyenne de l'énergie par intégration Monte Carlo en l'exprimant sous la forme d'une espérance mathématique :

$$E = \iiint_{R^3} \rho(\vec{r}) E(\vec{r}) dv \quad (\text{III} - 6)$$

La méthode est basée sur l'idée suivante : L'énergie totale du système dans l'état  $\psi(\vec{r})$  (ou la valeur moyenne de  $H$ ) est :

$$E = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\iiint_{R^3} \psi(\vec{r})^* H \psi(\vec{r}) dv}{\iiint_{R^3} |\psi(\vec{r})|^2 dv} = \frac{\iiint_{R^3} |\psi(\vec{r})|^2 \frac{H \psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} dv}{\iiint_{R^3} |\psi(\vec{r})|^2 dv} \quad (\text{III} - 7)$$

Où l'on a multiplié et divisé par  $\psi(\vec{r})$ . En posant

$$\rho(\vec{r}) = \frac{|\psi(\vec{r})|^2}{\iiint_{R^3} |\psi(\vec{r})|^2 dv} \quad (\text{III} - 8)$$

Que l'on interprète comme une densité de probabilité et

$$E(\vec{r}) = \frac{H\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} \quad (\text{III} - 9)$$

Que l'on appelle énergie locale, on obtient ainsi la formule de la valeur moyenne de l'énergie sous la forme d'une espérance de l'énergie locale :

$$E = \iiint_{R^3} \rho(\vec{r}) E(\vec{r}) dv \quad (\text{III} - 10)$$

La méthode de Monte Carlo est alors appliquée pour le calcul de cette intégrale en l'approximant par la moyenne empirique :

$$E \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N E(\vec{r}_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left[ \frac{H\psi(\vec{r})}{\psi(\vec{r})} \right]_{\vec{r}=\vec{r}_i} \quad (\text{III} - 11)$$

Où l'échantillonnage des  $\vec{r}_i$  est réalisé selon la densité de probabilité (III-8)  $\pi(\vec{r}) = \rho(\vec{r})$  et la convergence de la méthode est assurée par le théorème des grands nombres. Le calcul de la variance pour minimiser l'erreur est aussi réalisé :

$$\boxed{Var(H) = \sigma^2(E) = \langle (H - E)^2 \rangle \simeq \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [E(\vec{r}_i) - E]^2} \quad (III - 12)$$

Cette variance doit s'annuler (ou se rapprocher le plus de zéro) lorsque l'énergie atteint son minimum.

### III-4-3 Echantillonnage par l'algorithme de Metropolis-Hasting :

La densité de probabilité (III-8) dépend de la fonction d'onde qui dépend de paramètres inconnus  $\alpha$ , on utilise alors l'algorithme de Metropolis-Hasting pour générer l'échantillon des  $\vec{r}_i$ . Pour cela on propage une chaîne de Markov  $\vec{r}_i$  dans l'espace. On définit une probabilité de proposition  $Q(\vec{r}_i, \vec{r}_{i+1})$  [17] pour le passage de  $\vec{r}_i$  à  $\vec{r}_{i+1}$  uniforme à l'intérieur d'une sphère centré sur  $\vec{r}_i$  et de rayon R :

$$\begin{cases} Q(\vec{r}_i, \vec{r}_{i+1}) = U[\vec{r}_i, \vec{r}_i + \vec{R}] & \text{à l'intérieur de la sphère.} \\ Q(\vec{r}_i, \vec{r}_{i+1}) = 0 & \text{à l'extérieur de la sphère.} \end{cases} \quad (III - 13)$$

La distribution que l'on veut simuler est

$$\pi(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) = \frac{|\psi|^2(\vec{r})}{\iiint_{R^3} |\psi|^2(\vec{r}) dv} \quad (III - 14)$$

La normalisation de la fonction d'onde (intégrale dans le dénominateur) n'est pas nécessaire car elle se simplifie dans l'expression de la probabilité d'acceptance (c'est l'un des avantages de l'algorithme MH):

$$\alpha(\vec{r}_i, \vec{r}_{i+1}) = \min \left( 1, \frac{\pi(\vec{r}_{i+1})}{\pi(\vec{r}_i)} \cdot \frac{Q(\vec{r}_{i+1}, \vec{r}_i)}{Q(\vec{r}_i, \vec{r}_{i+1})} \right) \quad (III - 15)$$

On a donc :

$$\boxed{\alpha(\vec{r}_i, \vec{r}_{i+1}) = \min \left( 1, \frac{|\psi|^2(\vec{r}_{i+1})}{|\psi|^2(\vec{r}_i)} \cdot \frac{Q(\vec{r}_{i+1}, \vec{r}_i)}{Q(\vec{r}_i, \vec{r}_{i+1})} \right)} \quad (III - 16)$$

Que l'on va comparer à une distribution uniforme sur  $[0,1]$  pour générer notre chaîne de vecteurs aléatoires  $(\vec{r}_i)$  distribué selon la densité de probabilité  $\rho(\vec{r})$ .

#### Cas de l'atome d'hydrogène

L'énergie exacte  $E_n$  du niveau  $n$  de l'atome d'hydrogène (sans tenir compte du spin) est :

$$E_n = -\frac{\mathcal{R}}{n^2} \quad (\text{III} - 17)$$

et sa fonction d'onde :

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = Y_{lm}(\theta, \varphi)R_{nl}(\vec{r}) \quad (\text{III} - 18)$$

Sachant que la partie angulaire de la fonction d'onde est connue pour les systèmes à symétrie sphérique, c'est uniquement la partie radiale de l'hamiltonien qui va intervenir dans les calculs. On a donc :

$$H\psi(\vec{r}) = \left( -\frac{1}{2r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{1}{r} \right) \psi(r) = E\psi(\vec{r}) \quad (\text{III} - 19)$$

L'objectif est de calculer l'énergie de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène en utilisant la méthode variationnelle couplée à la méthode Monte Carlo pour l'évaluation des intégrales multidimensionnelles.

En unité atomiques (Hartree pour l'énergie et rayon de Bohr pour la longueur), l'énergie de l'état fondamental ( $n=1, l=0$ ) est :

$$E_1 = -\frac{0.5}{1^2} = -0.5 \quad (\text{III} - 20)$$

C'est l'énergie que nous allons calculer par la méthode VQMC.

Pour la minimisation de l'énergie, nous allons choisir la fonction d'onde radiale réelle (à cause de la symétrie de l'hamiltonien) suivante à deux paramètres  $(\alpha, c)$  :

$$\psi_\alpha(\vec{r}) = (1 + cr)e^{-\alpha r} \quad (\text{III} - 21)$$

La fonction d'onde de l'état fondamental est :

$$\psi_{100}(\vec{r}) = Y_{10}(\theta, \varphi)R_{10}(\vec{r}) \quad (\text{III} - 22)$$

$R_{10}(\vec{r})$  qui est la partie radiale de l'état fondamentale que nous devons obtenir par la méthode VQMC a pour expression :

$$R_{10} = e^{-r} \quad (\text{III} - 23)$$

Ce qui veut dire que le couple de paramètres  $(\alpha, c)$  recherché qui va minimiser l'énergie est  $\alpha=1$  et  $c=0$ .

#### Etapes du calcul :

- 1- On choisit une grille de dimension  $60 \times 60$  pour les valeurs des paramètres  $(\alpha, c)$  :  $\alpha$  varie de 0.1 à 1.87 par pas de 0.3 et  $c$  de -0.8 à 0.97 par pas de 0.3.
- 2- Une double boucle est initialisée sur la grille des valeurs du couple  $(\alpha, c)$ . Pour chaque couple de paramètres  $(\alpha, c)$  on va générer un échantillon de  $N = 10^6$  vecteurs  $\vec{r}_i$  représentant la position de l'électron dans l'espace suivant l'algorithme MH.
- 3- On utilise l'échantillon généré pour calculer  $E = E(\alpha)$  par intégration Monte Carlo. On calcule aussi la variance de  $E$  pour contrôler la convergence.
- 4- Lorsque la grille  $(\alpha, c)$  est complétée on obtient une surface  $E(\alpha, c)$  dans l'espace  $(\alpha, c, E)$  que l'on va minimiser pour obtenir l'état fondamental.

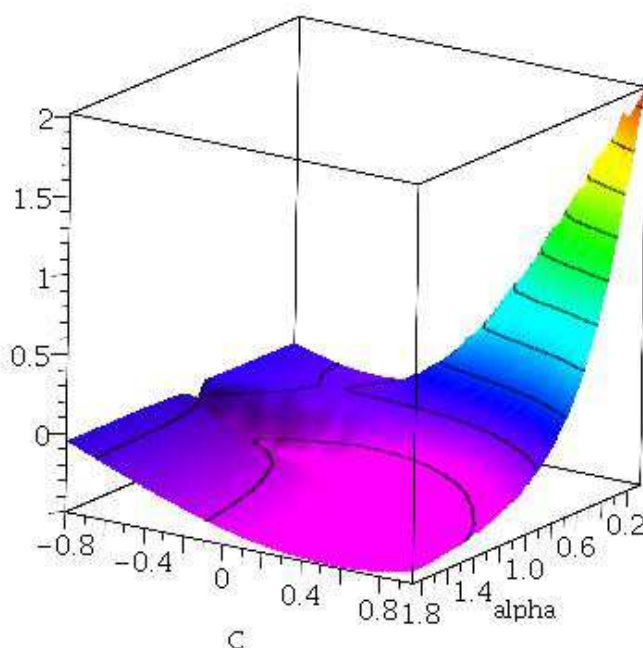
#### III-4-4 Résultats et discussions

Le calcul a été effectué à l'aide d'un programme Fortran-95 [17]. Les paramètres d'entrée du programme sont les suivants :

L'échantillon de la chaîne de Markov de Metropolis-Hasting contient  $N = MCMAX = 10^6$  itération. La probabilité de proposition (ou de transition) est calculée dans une sphère de rayon  $R = STEPMAX = 2/(1 + \alpha)$  en unité de rayon de Bohr. La position initiale de l'électron est choisie à  $\vec{r}_0 = RE(3) = (0.1, 0.1, 0.1)$  [rayon de Bohr]. Les valeurs initiales des paramètres  $(\alpha, c) = (ALPHA, WAVEC) = (0.1, -0.8)$  [ua].

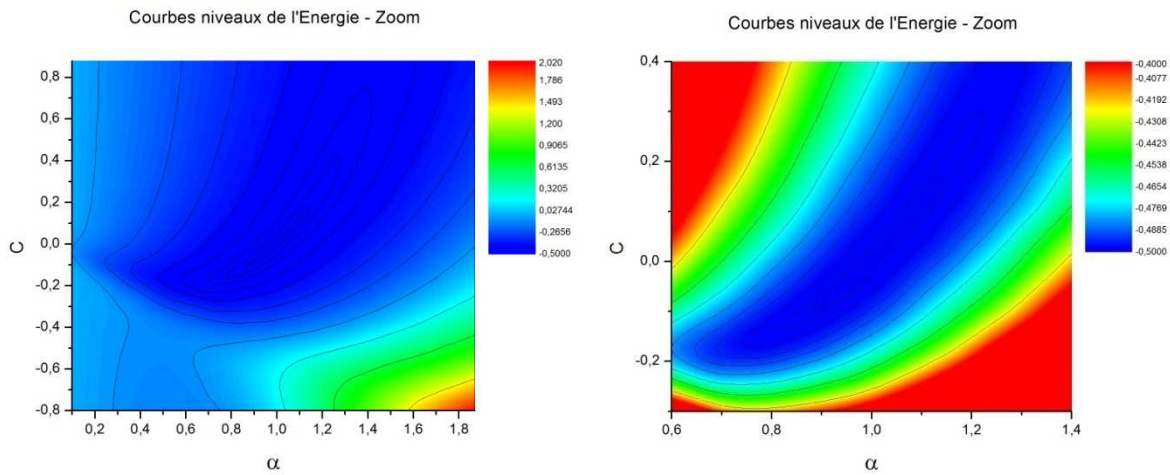
D'autre part, pour éviter la région singulière centrale du proton, la valeur de l'énergie locale dans cette région est moyennée dans une petite sphère autour du proton de rayon  $EMACH=10^{-8}$  [rayon de Bohr].

Dans la figure (III-1) ci-dessous nous donnons une représentation tridimensionnelle de l'énergie  $E(\alpha,c)$ .



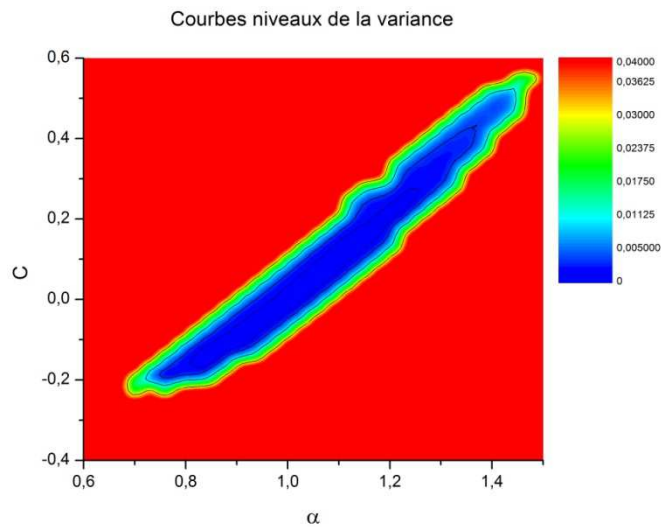
**Figure III-1 :** Surface tridimensionnelle de l'énergie  $E(\alpha,c)$  dans l'espace. L'axe vertical représente la valeur de l'énergie en unité atomique [ua].

Pour plus de clarté, nous traçons sur les deux figures (III-2) une représentation de l'énergie en courbes de niveaux dans le plan  $(\alpha,c)$  réalisées à l'aide du logiciel Origin.



**Figure III-2 :** Courbes de niveaux de l'énergie  $E(\alpha, c)$  dans le plan  $(\alpha, c)$ . L'échelle de l'énergie est donnée en spectre de couleur (du bleu pour les valeurs minimales jusqu'au rouge pour les valeurs maximales). La figure à droite représente un zoom sur la région centrale  $(\alpha, c)=(1, 0)$ .

Finalement la variance de l'énergie  $\sigma^2(\alpha, c)$  est représenté dans la figure III-3 suivante :



**Figure III-3 :** Courbes de niveaux de la variance  $\sigma^2(\alpha, c)$  de l'énergie dans le plan  $(\alpha, c)$ .

On constate sur les figures (III-2) que la valeur minimale de l'énergie est bien concentrée autour de la région  $(\alpha, c)=(1, 0)$  pour une énergie minimale  $E \approx -0.5$  qui correspond à la solution exacte de la valeur propre  $E_1$  de l'hamiltonien et à la fonction radiale  $R_{10} = e^{-r}$  du niveau fondamental. Ces valeurs possèdent une dispersion statistique en forme de banane dans la direction diagonale. Ce constat est aussi confirmé par les courbes de niveaux de la variance qui est minimale ( $\sigma^2 \approx 0.005$ ) dans la même région  $(\alpha, c)=(1, 0)$ . La dispersion dans les résultats de l'énergie et de la



### **Chapitre III : Méthode MC quantique variationnelle, application à l'atome d'hydrogène**

---

variance peut être réduite en augmentant le nombre d'itérations Monte Carlo (la taille de l'échantillon aléatoire) à  $N = 10^7$  ou  $10^8$ . Malheureusement le temps de calcul fut trop long pour les moyens informatiques que nous avons utilisés.

### **Conclusion générale**

Les méthodes de Monte-Carlo sont des méthodes stochastiques d'approximation par l'introduction de procédés aléatoires. Elles sont utilisées pour la simulation du comportement des systèmes physiques ou mathématiques. Les domaines d'applications de ces méthodes sont nombreux et très riches notamment après le développement d'ordinateurs puissants.

Notre travail avait deux objectifs principaux. Le premier est l'étude de l'intégration Monte Carlo multidimensionnelle avec une application comparative entre ces méthodes « stochastiques » et les méthodes déterministes de Newton-Cotes composites (Rectangle, Trapèze et Simpson). Le deuxième objectif est l'étude des méthodes Monte Carlo quantiques et spécifiquement la méthode Monte Carlo quantique variationnelle 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'atome d'hydrogène.

Après un premier chapitre consacré aux notions de base de la méthode Monte Carlo, notre étude de l'intégration multidimensionnelle présentée dans le chapitre 2 a montré l'avantage incontestable des méthodes 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.

En effet et comme on l'a vu, les méthodes d'intégration numérique classiques souffrent du problème de la dimensionnalité qui fait augmenter de façon exponentielle le nombre de points d'intégration ainsi que le temps de calcul avec l'augmentation de la dimension de l'intégrale, ce qui fait des méthodes Monte Carlo une des importantes alternatives malgré une vitesse de convergence relativement lente d'ordre  $1/\sqrt{N}$  (indépendante de la dimension du problème). On a vu aussi qu'il existe des techniques d'amélioration de MC qui permettent la réduction de la variance (et donc de l'erreur) tel que l'échantillonnage préférentiel qui donne de meilleures précisions.

Dans le chapitre 3 nous avons présenté l'utilisation des méthodes Monte Carlo en mécanique quantique (QMC). Ces méthodes ont eu beaucoup de succès dans le calcul des propriétés de l'état fondamental des systèmes quantiques notamment dans la résolution des problèmes à  $N$ -corps. Il existe plusieurs variétés de méthodes Monte Carlo quantiques et notre travail s'est focalisé sur la méthode Monte Carlo quantique variationnelle (VQMC) qui se compose de deux volets, le volet variationnel qui consiste à minimiser l'énergie par rapport à des paramètres  $\alpha$  dans la fonction d'onde teste choisie et le volet Monte Carlo qui évalue cette énergie par intégration Monte Carlo en l'exprimant sous la forme d'une espérance mathématique.

Comme application de la méthode VQMC, par le couplage de la méthode d'intégration de Monte Carlo à la méthode variationnelle quantique et en utilisant l'échantillonnage par l'algorithme de Metropolis-Hastings, nous avons essayé de retrouver les propriétés de l'état fondamental de l'atome d'hydrogène. A l'aide d'un programme fortran et avec un échantillon de  $N = 10^6$  points on a pu calculer, à des erreurs statistiques près, les bonnes valeurs de l'énergie et de la fonction d'onde de l'état fondamental. L'augmentation de la taille de l'échantillon permettra sans doute d'améliorer ce calcul.

### Références

- [1] L.Chia, Simulation Monte-Carlo des dispersions angulaires et énergétiques des noyaux atomiques par émission de neutrons, Thèse de Master, Université Mohamed El Bachir Elibrahimi-BBA, 2019.
- [2] F.Z.Medouakh, Méthode de Monte-Carlo, Thèse de Master, Université Abou Bakr Belkaid-Tlemcen, 2017.
- [3] D.Fredon, M.Maumy-Bertrand, F.Bertrand, Mathématiques Statistique et probabilités, DUNOD, année 2009.
- [4] J.Escoffier, Probabilités et Statistique pour l'Agrégation interne de Mathématiques, Ellipses Edition Marketing S.A, 2010.
- [5] S.Hassani Mathematical Methods for Students of Physics and Related Fields, Book, Springer Science+Business Media, LLC 2009.
- [6] B.L. Hammond, W. A. Lester, Jr, P. J. Reynolds, Monte Carlo Methods in Ab Initio Quantum Chemistry, 1994 by World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.
- [7] P.R.Cheistian, C.George, Méthodes de Monte Carlo avec R, Springer-Verlag-France, 2011.
- [8] L.Elle, B.Lapeyre, Introduction aux Méthodes de Monte-Carlo, Septembre 2001.
- [9] C.Baranger, J.Mathiaud, Méthode de Monte-Carlo, 2012/2013.
- [10] Jinhong Du, Monte Carlo Integration, <https://cran.r-project.org>.
- [11] A. Abekhti, Calcul d'Intégral par la Méthode de Monte-Carlo, mémoire de Master, Université D'Adrar, 2019.
- [12] L.Bernard, E.Pardoux, R.Sentis, Méthode de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1998.
- [13] Ceperley, D.M. and Alder, B.J. (1986), Quantum Monte Carlo. Science, 231, 555.
- [14] R. C. Grimm & R. G. Storer, Monte-Carlo solution of Schrödinger's equation, J. Comput. Phys. 7, 134-156 (1971).
- [15] Caperley.D. An Overview of Quantum Monte Carlo Methods Reviews in Mineralogy and Geochemistry 71(1):129-135.
- [16] J. B. Anderson, Quantum chemistry by random walk, J. Chem. Phys. 65, 4121-4127 (1976).
- [17] McMillan, W.L. (1965) Ground state of liquid  $^4\text{He}$ . Physical Review, 138, A442.
- [18] Feenberg, E. (1974) Ground state, of an interacting bosons system, Annals of Physics (N.Y.), 84, 128.

## Références

---

- [19] Malvin H. Kalos, Paula A. Whitlock, Monte Carlo Method, Wiley-VCH (2008).
- [20] Ceperley, D.M. (1995) Path-Integrals ; in the theory of condensed helium, Reviews of Modern Physics, 67, 279.
- [21] J.Hladik, M.Chrysos, P.E.Hladik, L.U.Ancarani, Mécanique quantique : Atome et noyaux, Application technologiques, Dunod.
- [22] C.Cohen-Tannoudji, B.Diu, F.Laloe, Mécanique quantique (Tom II),CNRS EDITIONS,2018.
- [23] Pollock, E.L. and Ceperley, D.M., (1984) Simulation of quantum, many-body systems by path-integral, methods. Physical Review B, 30, 2555.
- [24] Wolfgang Schattke, Ricardo Díez Muiño, Quantum Monte Carlo Programming for Atoms, Molecules, Clusters, and Solids (2013) Wiley-VCH.

## **Résumé :**

Ce travail est consacré à l'étude de la méthode Monte Carlo et son application à l'intégration multidimensionnelle ainsi qu'à la résolution de l'équation de Schrödinger en mécanique quantique. Nous introduisons d'abord les notions de base des méthodes Monte Carlo puis nous abordons l'intégration Monte Carlo et montrons sa supériorité pour les dimensions élevées par rapport aux autres techniques d'intégration multidimensionnelles en réalisant un calcul concret d'intégrale. Comme application, à l'aide d'un programme Fortran nous avons appliqué la méthode Monte Carlo quantique variationnelle (VQMC) pour le calcul de l'état fondamental d'un système simple qui est l'atome d'hydrogène.

**Mots clés :** Monte Carlo, Intégration multidimensionnelle, Echantillonnage préférentiel, Algorithme de Metropolis-Hasting, Méthode variationnelle.

## **Abstract :**

This work is dedicated to the study of the Monte Carlo method and its application to multidimensional integration as well as to the solution of the Schrödinger equation in quantum mechanics. We first introduce the basics of Monte Carlo methods, then we study Monte Carlo integration and show its superiority for high dimensions over other multidimensional integration techniques by performing a concrete integral calculation. As an application, with the help of a Fortran program we applied the variational quantum Monte Carlo (VQMC) method for the calculation of the ground state of a simple system which is the hydrogen atom.

**Keywords:** Monte Carlo, Multidimensional integration, Importance sampling, Metropolis-Hasting algorithm, Variational method.

## **ملخص:**

هذا العمل مخصص لدراسة طريقة مونت كارلو وتطبيقها على التكاملات متعددة الأبعاد وكذلك لحل معادلة شرودنجر في ميكانيكا الكم. نقدم أولاً أساسيات طرق مونت كارلو، ثم ندرس تكامل مونت كارلو ونظهر تفوقها في للأبعاد العالية على تقنيات التكامل متعددة الأبعاد الأخرى من خلال إجراء حساب تكامل ملموس. كتطبيق، بمساعدة برنامج Fortran سنطبق طريقة مونت كارلو الكمومية المتغيرة (VQMC) على نظام كمومي بسيط وهو ذرة الهيدروجين.

**الكلمات المفتاحية:** مونت كارلو ، التكامل متعدد الأبعاد ، حساب العينات التفضيلي ، خوارزمية Metropolis-Hasting ، الطريقة المتغيرة.