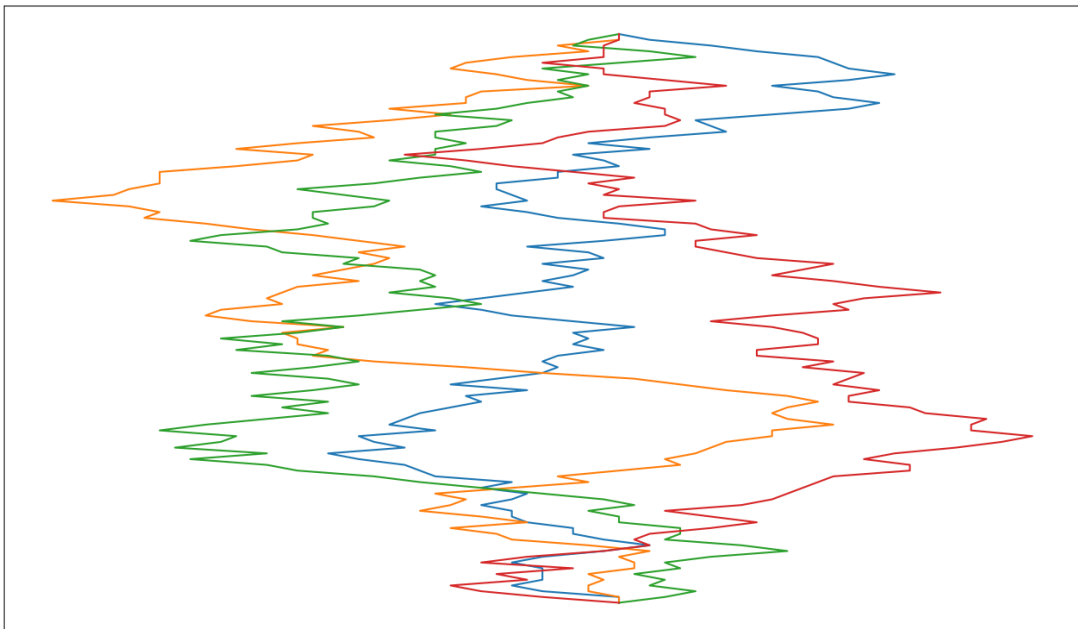


# Résolution numérique d'une intégrale de chemin de Feynman par l'algorithme de Metropolis

par Maire Raphaël



# Table des matières

<b>1</b>	<b>L'intégrale de chemin de Feynman : présentation et théorie</b>	<b>1</b>
1.1	Histoire et premiers développements . . . . .	1
1.1.1	La révolution amorcée par Dirac . . . . .	1
1.1.2	L'intégrale de chemin de Feynman . . . . .	2
1.2	Manipulation de l'intégrale de chemin . . . . .	3
1.2.1	L'action euclidienne et le temps imaginaire . . . . .	3
1.2.2	Valeur moyenne d'un opérateur . . . . .	3
1.2.3	Détermination de la valeur moyenne d'un opérateur pour une fonction d'onde dans son état fondamental . . . . .	5
1.2.4	Détermination de la norme de la fonction d'onde du fonda- mental . . . . .	5
<b>2</b>	<b>Le code</b>	<b>5</b>
2.1	La mise en place . . . . .	6
2.2	Obtention des valeurs moyennes et de la fonction d'onde . . . . .	6
2.2.1	La résolution de l'intégrale . . . . .	6
2.2.2	L'algorithme de Metropolis . . . . .	7
2.3	L'affichage et l'analyse des données . . . . .	9
2.3.1	Valeur moyenne et densité de probabilité . . . . .	9
2.3.2	Vitesse de convergence . . . . .	9
<b>3</b>	<b>Résultats numériques</b>	<b>10</b>
3.1	Les grandeurs et paramètres . . . . .	10
3.2	Probabilité de l'état fondamental et chemin . . . . .	11
3.2.1	L'oscillateur harmonique quantique . . . . .	11
3.2.2	L'oscillateur harmonique dans un champ de force constant .	13
3.2.3	L'interaction harmonique entre deux particules . . . . .	14
3.3	Convergence . . . . .	16
3.3.1	Convergence vers une solution dans le cas d'un potentiel non convexe . . . . .	16
3.3.2	Vitesse de convergence . . . . .	18
3.4	Valeurs moyennes . . . . .	20
3.4.1	L'oscillateur harmonique . . . . .	20
3.4.2	L'interaction harmonique . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Annexe</b>	<b>22</b>
4.1	Le théorème du Viriel pour N particules . . . . .	22

4.2	La fonction d'onde et l'énergie de l'oscillateur harmonique dans un champ de force constant . . . . .	23
4.3	L'Hamiltonien séparable d'une interaction harmonique . . . . .	23
<b>5</b>	<b>Bibliographie</b>	<b>24</b>
5.1	Bibliographie générale . . . . .	24
5.2	Bibliographie "précise" . . . . .	24

# Introduction

L'intégrale de chemin de Feynman est une reformulation de la mécanique quantique faisant intervenir le Lagrangien du système plutôt que son Hamiltonien (qui intervient directement dans l'équation de Schrödinger). Elle facilite l'étude des systèmes présentant un grand nombre de degrés de liberté, permet une compréhension facile de la limite classique de la mécanique quantique, établit des liens entre la mécanique statistique et la théorie des champs et facilite l'obtention de résultats approximatifs à l'aide de développements perturbatifs entre autre.

Ce rapport sera divisé en trois parties, la première concernera l'étude théorique de l'intégrale de chemin, la seconde le code et la troisième les résultats obtenus. Le but premier du programme est de retrouver la fonction d'onde (la norme tout du moins) de l'état fondamental d'un oscillateur harmonique mais il sera aussi question de l'étude de systèmes à plus d'une particule, de la détermination de valeurs moyennes et de discussions sur la vitesse de convergence de l'algorithme.

## 1 L'intégrale de chemin de Feynman : présentation et théorie

### 1.1 Histoire et premiers développements

#### 1.1.1 La révolution amorcée par Dirac

Dirac est vraisemblablement la première personne à avoir essayé de formuler la mécanique quantique à l'aide du Lagrangien. Dans un article de 1933 [7], il argumente que la formulation lagrangienne est plus profonde que celle hamiltonienne et montre que :  $\langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \langle q_f | \hat{U}(t_f, t_i) | q_i \rangle \propto e^{iL\Delta t/\hbar}$ , c'est à dire que le propagateur aux temps courts est proportionnel à une quantité contenant le Lagrangien. En utilisant des relations de fermeture on peut réécrire le propagateur :

$$\begin{aligned} \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \iint \cdots \int \langle q_f, t_f | q_N, t_N \rangle \langle q_N, t_N | q_{N-1}, t_{N-1} \rangle \\ &\quad \times \cdots \times \langle q_1, t_1 | q_i, t_i \rangle dq_1 \cdots dq_N \\ &= \iint \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^N dq_k \right] \langle q_f, t_f | q_N, t_N \rangle \cdots \langle q_1, t_1 | q_i, t_i \rangle \end{aligned} \tag{1}$$

En utilisant l'équation (1) et la relation de proportionnalité décrite plus haut, Dirac a par exemple montré qu'il était possible de retrouver le principe d'action stationnaire classique à partir de la formulation quantique qu'il venait de donner

mais il n'est vraisemblablement pas allé plus loin. Afin de voir émerger l'intégrale de chemin telle qu'on la connaît en mécanique quantique<sup>1</sup>, il fallut attendre plus d'une décennie.

### 1.1.2 L'intégrale de chemin de Feynman

Richard Feynman dans la continuité des idées de Dirac introduisit durant sa thèse de 1942 l'idée moderne de l'intégrale de chemin puis reformula la mécanique quantique à l'aide de ce nouvel outil en 1948. En partant de la formule (1) et en introduisant suffisamment de relations de fermeture pour considérer que les propagateurs contenus dans les produits décrivent un "déplacement" sur un temps court, on trouve<sup>2</sup> :

$$\begin{aligned}
 \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle &= \iint \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^N dq_k \right] \overbrace{\langle q_f, t_f | q_N, t_N \rangle \cdots \langle q_1, t_1 | q_i, t_i \rangle}^{N+1 \text{ termes}} \\
 &= \iint \cdots \int \left[ \prod_{k=1}^N dq_k \right] A^{N+1} \left( e^{iL(t_N)dt/\hbar} \times \cdots \times e^{iL(t_i)dt/\hbar} \right) \quad (2) \\
 &= \int A^{N+1} \left[ \prod_{k=1}^N dq_k \right] \exp \left( \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^N L(t_k)dt \right)
 \end{aligned}$$

$A$  étant la constante de proportionnalité liant le propagateur aux temps faibles et l'exponentielle contenant le Lagrangien et où l'on a posé  $t_0 = t_i$ . Feynman a montré que  $A = \sqrt{m/(2\pi i \hbar dt)}$  (voir par exemple Zinn-Justin). En prenant la limite où l'intervalle de temps  $dt$  est infinitésimal (ce qui justifie à posteriori le remplacement des propagateurs par l'exponentielle contenant le Lagrangien puisque  $dt = (t_f - t_i)/(N + 1)$  donc  $dt \rightarrow 0 \iff N \rightarrow \infty$ ) on peut confondre la somme en une intégrale et adopter une nouvelle notation pour le produit des  $dq$  :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{dt \rightarrow 0} \sum_{k=0}^N L(t_k)dt = \int_{t_i}^{t_f} L(q(t), \dot{q}(t))dt = S(q) \\ \lim_{dt \rightarrow 0} A^{N+1}(dt) \prod_{k=1}^N dq_k = \mathcal{D}q(t) \end{array} \right. \quad (3)$$

La limite prise, on peut réécrire (2) :

---

1. D'après Zinn-Justin, la première intégrale de chemin a vu le jour en dehors de la physique quantique et fut énoncée par Wiener dans son étude du mouvement brownien dans les années 1920

2. Dirac a trouvé une relation proche de celle ci, mais elle ne contenait pas le facteur de proportionnalité  $A$ .

$$\boxed{G(q_f, t_f; q_i, t_i) = \langle q_f, t_f | q_i, t_i \rangle = \int \mathcal{D}q(t) e^{\frac{i}{\hbar} S(q)}} \quad (4)$$

Ainsi, on a trouvé une formulation générale du propagateur d'un système à partir de son Lagrangien.

$\int \mathcal{D}q(t)$  indique qu'il faut faire la somme, sur toutes les trajectoires  $q(t)$  possibles (vérifiant les conditions aux bords), de  $e^{\frac{i}{\hbar} S(q(t))}$ . Autrement dit, chaque trajectoire se voit attribuer un poids (complexe) et l'interférence entre toutes les exponentielles donne le résultat voulu.

## 1.2 Manipulation de l'intégrale de chemin

### 1.2.1 L'action euclidienne et le temps imaginaire

Afin de faciliter les calculs numériques, il est utile<sup>3</sup> d'exprimer l'action en temps imaginaire  $\tau$  plutôt qu'en temps réel  $t$  (pour pouvoir traiter  $\frac{i}{\hbar} S(q)$  comme un nombre réel).

En faisant la transformation  $t \rightarrow \tau/i$  on obtient :

$$\frac{i}{\hbar} \int \left( \frac{1}{2} m \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 - V(x) \right) dt \rightarrow -\frac{1}{\hbar} \int \left( \frac{1}{2} m \left( \frac{dx}{d\tau} \right)^2 + V(x) \right) d\tau \quad (5)$$

On trouve :  $G(q_f, -i\tau_f; q_i, -i\tau_i) = \int \mathcal{D}q(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \int H d\tau} = \int \mathcal{D}q(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} S_E(q)}$ . Dans toute la suite, nous resterons en temps imaginaire. Et par fainéantise,  $\tau$  sera nommé  $t$  (le  $i$  pourra aussi être omis, dans le propagateur par exemple).

### 1.2.2 Valeur moyenne d'un opérateur

Nous allons chercher la valeur moyenne d'un opérateur  $\hat{O}(t)$  pour un chemin vérifiant :  $q_f = q_i = q$ . Pour une dérivation plus précise, voir : [8], [6] ou [3].

Partons (toujours en temps imaginaire) de  $\langle q | e^{-\frac{\hbar}{\hbar} t_f} \hat{O}(t) e^{\frac{\hbar}{\hbar} t_i} | q \rangle$  et introduisons deux relations de fermeture (des vecteurs propres de l'Hamiltonien) :

$$\begin{aligned} \langle q | e^{-\frac{\hbar}{\hbar} (t_f - t)} \hat{O} e^{-\frac{\hbar}{\hbar} (t - t_i)} | q \rangle &= \sum_n \sum_m \langle q | e^{-\frac{\hbar}{\hbar} (t_f - t)} | n \rangle \langle n | \hat{O} | m \rangle \langle m | e^{-\frac{\hbar}{\hbar} (t - t_i)} | q \rangle \\ &= \sum_n \sum_m e^{-E_n (t_f - t)/\hbar} e^{-E_m (t - t_i)/\hbar} \langle q | n \rangle \langle m | q \rangle \langle n | \hat{O} | m \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

---

3. Cela permet aussi de faire des analogies avec la physique statistique et de calculer facilement les caractéristiques du niveau fondamental du système considéré (par exemple la valeur moyenne des opérateurs ou le module de la fonction d'onde comme nous le verrons plus loin).

Maintenant, afin de se débarrasser de  $\langle q|n\rangle \langle m|q\rangle$ , utilisons l'orthonormalité des fonctions d'ondes en intégrant sur  $q$ .

$$\begin{aligned} \int \langle q, t_f | \hat{O}(t) | q, t_i \rangle dq &= \sum_n \sum_m e^{-E_n(t_f-t)/\hbar} e^{-E_m(t-t_i)/\hbar} \langle n | \hat{O} | m \rangle \int \langle q | n \rangle \langle m | q \rangle dq \\ &= \sum_n e^{-E_n(t_f-t_i)/\hbar} \langle n | \hat{O} | n \rangle \end{aligned}$$

La valeur moyenne s'obtient donc facilement (tout est relatif ...) :

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{\sum_n e^{-E_n(t_f-t_i)/\hbar} \langle n | \hat{O} | n \rangle}{\sum_n e^{-E_n(t_f-t_i)/\hbar}} = \frac{\int \langle q, t_f | \hat{O}(t) | q, t_i \rangle dq}{\int \langle q, t_f | q, t_i \rangle dq} \quad (7)$$

Le dénominateur représente l'intégrale sur tout l'espace du propagateur  $G(q, t_f; q, t_i)$ , qui est exprimable avec l'intégrale de chemin. Il ne reste plus qu'à exprimer le numérateur en fonction de celle ci. Attelons nous y !

Considérons que l'opérateur  $\hat{O}$  a pour valeur propre  $O(q)$  pour le vecteur propre position  $|q\rangle$ , c'est à dire :  $\hat{O} |q\rangle = O(q) |q\rangle$  alors :

$$\begin{aligned} \langle q | e^{-\hat{H}(t_f-t)/\hbar} \hat{O} e^{-\hat{H}(t-t_i)/\hbar} | q \rangle &= \int \langle q | e^{-\hat{H}(t_f-t)/\hbar} | q_t \rangle \langle q_t | \hat{O} | q_t \rangle \langle q_t | e^{-\hat{H}(t-t_i)/\hbar} | q \rangle dq_t \\ &= \int \langle q | e^{-\hat{H}(t_f-t)/\hbar} | q_t \rangle O(q_t) \langle q_t | e^{-\hat{H}(t-t_i)/\hbar} | q \rangle dq_t \\ &= \int G(q, t_f; q_t, t) G(q_t, t; q, t_i) O(q_t) dq_t \\ &= \int \mathcal{D}q(t') e^{-S(q(t'))/\hbar} O(q(t)) \end{aligned} \quad (8)$$

Le passage de l'avant dernière à la dernière équation se fait en remarquant que le chemin que suit une particule allant d'un point  $A$  à un point  $B$  peut être décomposé en deux étapes  $A \rightarrow C$  et  $C \rightarrow B$  mais le propagateur prend en compte tous les chemins allant de  $A$  à  $B$  il faut donc sommer toutes les possibilités (tous les points  $C$  possibles) d'où :  $\int_{-\infty}^{\infty} G(q, t_f; q_t, t) G(q_t, t; q, t_i) dq_t = G(q, t_f; q, t_i)$ . Des explications plus complètes sont données ici [5] et là [1].

En remplaçant (8) dans (7) on trouve finalement :

$$\boxed{\langle \hat{O} \rangle = \frac{\int dq \int \mathcal{D}q(t) e^{-S/\hbar} O(q)}{\int dq \int \mathcal{D}(t) e^{-S/\hbar}} \approx \frac{\int \mathcal{D}q(t) e^{-S/\hbar} O(q)}{\int \mathcal{D}q(t) e^{-S/\hbar}}} \quad (9)$$

### 1.2.3 Détermination de la valeur moyenne d'un opérateur pour une fonction d'onde dans son état fondamental

La formule (9) est très générale mais pas vraiment utilisable pour notre problème car nous ne pouvons pas imposer l'état de la fonction d'onde. Par contre, sur un temps assez long, seul le fondamental contribue significativement à l'intégrale ci-dessus. En effet :

$$\begin{aligned} \lim_{t_f - t_i \rightarrow \infty} \int \langle q, t_f | \hat{O}(t) | q, t_i \rangle dq &= \lim_{t_f - t_i \rightarrow \infty} \sum_n e^{-E_n(t_f - t_i)/\hbar} \langle n | \hat{O} | n \rangle \\ &\simeq e^{-E_0(t_f - t_i)/\hbar} \langle 0 | \hat{O} | 0 \rangle \end{aligned} \quad (10)$$

Les termes  $n > 0$  sont négligés car "leurs exponentielles" décroissent beaucoup plus vite que celle de l'état fondamental (puisque  $E_n > E_0$  pour  $n \neq 0$ ). Pour cette raison, à des temps longs, la formule (9) donnera la valeur moyenne de l'observable lorsque le système est dans son état de plus faible énergie.

### 1.2.4 Détermination de la norme de la fonction d'onde du fondamental

Reprenons la formule (6) et prenons comme opérateur l'identité, de cette façon, nous pouvons à nouveau utiliser la relation d'orthonormalité  $\langle n | m \rangle = \delta_{n,m}$  entre les fonctions d'ondes et faire apparaître le carré de leurs normes :

$$\begin{aligned} \langle q, t_f | q, t_i \rangle &= \sum_n \sum_m e^{-E_n(t_f - t)/\hbar} e^{-E_m(t - t_i)/\hbar} \langle q | n \rangle \langle m | q \rangle \langle n | m \rangle \\ &= \sum_n e^{-E_n(t_f - t_i)/\hbar} |\langle q | n \rangle|^2 \end{aligned}$$

Comme précédemment, pour  $t_f - t_i \rightarrow \infty$  seule reste la contribution du fondamental et de fait, on obtient :

$$\boxed{|\psi_0(q)|^2 = |\langle q | 0 \rangle|^2 = \lim_{t_f - t_i \rightarrow \infty} \frac{\langle q, t_f | q, t_i \rangle}{\int \langle q, t_f | q, t_i \rangle dq}} \quad (11)$$

## 2 Le code

Maintenant que nous avons tous les résultats majeurs, il est temps d'expliquer le code qui nous permettra d'obtenir des résultats.



## 2.1 La mise en place

Dans un premier temps, il s'agit de donner les conditions initiales, les paramètres (durée de la simulation, nombre de particules, ...) et de discrétiser l'espace et le temps.

Ensuite, à l'aide de la fonction *path()* on crée un chemin reliant de manière aléatoire avec un pas maximum donné les deux points de l'espace-temps que l'on fixe. Cela est fait en demandant à ce que la somme au cours du temps des coordonnées spatiales soit égale à la différence entre la coordonnée spatiale d'arrivée et celle de départ. Dans notre cas,  $q_i = q_f = q$  donc on demande que la somme des coordonnées spatiales soit nulle. Un chemin de départ constitué uniquement de 0 aurait suffi mais l'algorithme converge moins vite dans ce cas (pour un pas bien choisi...).

## 2.2 Obtention des valeurs moyennes et de la fonction d'onde

### 2.2.1 La résolution de l'intégrale

Pour une explication plus poussée de cette partie, voir [6]. Le but de cette fraction de l'algorithme est de résoudre les intégrales (9) et (11).

Afin de résoudre ce genre d'intégrale, nous utiliserons l'algorithme de Metropolis puisqu'elles peuvent être mises sous la forme<sup>4</sup> :

$$\langle O \rangle = \frac{\int O e^{-S/\hbar} dq_1 dq_2 \dots dq_N}{\int e^{-S/\hbar} dq_1 dq_2 \dots dq_N} = \int p(q, q_1, q_2, \dots, q_N) O(q_1, q_2, \dots, q_N) d^N q \quad (12)$$

Avec  $p = \frac{e^{-S/\hbar}}{\int e^{-S/\hbar} dq_1 dq_2 \dots dq_N}$ . En soit, l'algorithme de Metropolis, comme nous le verrons plus loin, permet de générer un chemin  $\vec{q} = \{q_1, q_2, \dots, q_N\}$  avec une probabilité suivant la distribution  $p$  mais cela ne résout pas l'intégrale. Pour cela, il suffit de remarquer que d'après (12),  $\langle O \rangle$  est simplement une moyenne pondérée par  $p$  donc :

$$\langle O \rangle \simeq \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M O(\vec{q}_m) \quad (13)$$

où  $\vec{q}_m$  est le  $m$ -ème chemin généré et  $O(\vec{q}_m)$  la valeur qu'aura en moyenne l'opérateur sur ce chemin<sup>5</sup>. En sommant sur un nombre suffisant de trajectoires, on

---

4. Où on a remis  $\mathcal{D}q$  sous la forme d'un produit et enlever le facteur  $A^{f-1}$  en simplifiant le numérateur et le dénominateur.

5. En toute rigueur il faudrait prendre  $O(q'_i)$  ou  $O(q_i)$  (selon si la modification est acceptée ou non) mais ce n'est pas statistiquement avantageux alors on prend la moyenne de  $O$  sur tout le chemin que l'on note :  $O(\vec{q})$

obtient une estimation correcte de  $\langle O \rangle$ . L'équation (11) n'est pas directement de la forme ci-dessus, pour cela il suffit d'insérer un delta de Dirac dans le numérateur de l'équation (11) :

$$|\psi_0(Q)|^2 = \int \delta(q_0 - Q) p(q, q_1, q_2, \dots, q_N) dq_0 d^{N-1}q \quad (14)$$

L'intégrale va donner la moyenne du delta de Dirac pour toutes les trajectoires générées par l'algorithme, il suffit donc de prendre un point aléatoire sur un chemin (plus précisément un point pour lequel la valeur a été préférée par l'algorithme de Metropolis, voir le 3ème point de l'algorithme de Metropolis dans la partie 2.2.2), l'enregistrer et le faire sur un nombre suffisant de chemins pour pouvoir faire un histogramme (normalisé). L'ordinateur ne traite pas la distribution de Dirac en elle-même (cela lui serait impossible), ce qui est pris en compte, c'est le nombre de points compris dans un petit intervalle (et donc les deltas ayant leur "pic" dans cet intervalle). Avec un nombre suffisamment élevé de valeurs, l'histogramme des points relevés donnera la moyenne de la distribution de Dirac et donc le carré de la norme de la fonction d'onde recherchée.

### 2.2.2 L'algorithme de Metropolis

Maintenant que nous savons comment résoudre les intégrales, il suffit de savoir générer des chemins suivant approximativement la distribution  $p$ . Pour cela nous utiliserons l'algorithme de Metropolis-Hastings [6] (la fonction `metropolis()` et la boucle l'appelant s'occupent de cette partie) en partant de la trajectoire générée à la partie 2.1 :

- On propose une modification d'un point du chemin

$$\vec{q} = \{q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_N\} \rightarrow \vec{q}' = \{q_1, q_2, \dots, q'_i, \dots, q_N\} \quad (15)$$

le point à modifier est pris de manière aléatoire mais on garde la position de départ et d'arrivée fixée<sup>6</sup>. La modification est donnée par :  $q'_i = q_i + u_i$ . Avec  $u_i$  pris aléatoirement dans  $]-u, u[$  à chaque itération.

- On calcule le taux d'acceptation :  $\alpha = \min \left\{ 1, \frac{p(\vec{q}')}{p(\vec{q})} \right\}$
- La modification est soit acceptée avec une probabilité  $\alpha$  (on garde le chemin modifié) soit rejetée avec une probabilité  $1 - \alpha$  (on reprend l'ancien chemin :  $\vec{q}' = \vec{q}$ ). On cherchera en général à ce que la modification soit acceptée une fois sur deux ; la variable  $S$  affichera le pourcentage de valeurs acceptées.

---

6. A noter que dans  $\vec{q}$  je n'inclue pas le point de départ et celui d'arrivée  $q$ . Je ne le ferai pas non plus lorsqu'on calculera l'énergie, en toute rigueur il faudrait le faire, mais avec mon choix de notation plus que médiocre, cela prendrait beaucoup de place et rendrait encore plus illisible mes formules...

Si  $S$  est trop petit, l'algorithme aura du mal à explorer toutes les configurations, si  $S$  est trop grand, l'algorithme ne se "stabilisera" jamais. Pour modifier cela on pourra jouer sur  $u$ .

- On calcule la valeur de la quantité dont on cherche la moyenne<sup>7</sup>. Pour les grandeurs comme  $H$  ou  $q$  il suffit d'additionner toutes les valeurs trouvées à chaque itérations (chaque chemin généré) et de diviser cette somme par le nombre d'itérations afin d'obtenir la valeur moyenne. Pour avoir  $|\psi_0(q)|^2$ , il faut stocker la grandeur voulue ( $q'_i$  ou  $q_i$  selon si la modification a été acceptée ou non) dans un tableau et en faire un histogramme (puisque'il y a une dépendance sur la position  $q$ ) normalisé.
- On réitère la démarche.

Dit de manière plus imagée, la procédure ci-dessus nous fait passer beaucoup de temps dans les zones où  $\vec{q}$  est très probable ( $p(\vec{q})$  grand) et moins de temps lorsque  $\vec{q}$  est peu probable (mais on s'y déplace quand même car il est possible d'accepter une modification même quand  $\alpha < 1$ , c'est à dire lorsque la modification proposée nous amène vers une zone où  $p(\vec{q})$  est moins grand). Pour cette raison, l'ensemble des  $\vec{q}_m$  générés suit la distribution  $p$ .

Il s'agit désormais de calculer  $\alpha$ . C'est à dire :  $\frac{p(\vec{q})}{p(\vec{q})} = e^{S(\vec{q})-S(\vec{q})}$  (dans tout ce qui suivra,  $\hbar = 1$ ). Puisque l'on est en temps imaginaire :

$$\begin{aligned} S(\vec{q}) &= \int_{t_i}^{t_f} H dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} H dt + \int_{t_{i+1}}^{t_{i+2}} H dt + \dots + \int_{t_{N-1}}^{t_N} H dt \\ &\simeq H(t_{i+1})dt + H(t_{i+2})dt + \dots + H(t_N)dt \end{aligned} \quad (16)$$

Pour que la dernière égalité soit vraie, il faut que le pas de temps soit assez petit (mais pas trop sinon il y a des problèmes de divergence...).

L'Hamiltonien discrétisé s'écrit alors :  $H(t_k) = \frac{1}{2}m \left( \frac{q_k - q_{k-1}}{dt} \right)^2 + V \left( \frac{q_k + q_{k-1}}{2} \right)$  et finalement on obtient :

$$S(\vec{q}) \simeq dt \sum_{k=i+1}^N \frac{1}{2}m \left( \frac{q_k - q_{k-1}}{dt} \right)^2 + V \left( \frac{q_k + q_{k-1}}{2} \right) = dt H(\vec{q}) \quad (17)$$

La différence d'action peut ainsi être approximée par la différence d'énergie entre les deux chemins, multipliée par l'intervalle de temps :

$$\alpha = \min \left\{ 1, e^{dt(H(\vec{q})-H(\vec{q}'))} \right\} \quad (18)$$

L'énergie d'un chemin est calculée par la fonction *energie()*.

---

7. Les premières itérations donnent un chemin qui ne suit pas du tout la distribution  $p$ , il faut attendre la fin de la "thermalisation". En toute rigueur, il ne faudrait donc pas prendre en compte les valeurs obtenues pour les premières trajectoires.

## 2.3 L’affichage et l’analyse des données

### 2.3.1 Valeur moyenne et densité de probabilité

Après toutes les itérations, l’algorithme affichera les valeurs moyennes demandées et  $|\psi_0(q)|^2$ . Pour ce qui est du carré de la norme de la fonction d’onde à l’état fondamental, il peut toujours être affiché, quelque soit le potentiel mais le nombre de particules ou de dimensions doit être inférieur à 3 (car il faudrait 4 dimensions pour tracer la densité de probabilité si elle dépendait de 3 variables). Pour les valeurs moyennes, l’affichage est plus compliqué surtout lorsque le système est composé de plus de 1 particule. Particulièrement pour l’énergie moyenne. Comme nous l’avons vu dans la partie 1.2.2, l’opérateur dont on recherche la valeur moyenne doit vérifier :  $\hat{O} |q\rangle = O(q) |q\rangle$  avec  $O(q)$  une fonction ce qui n’est pas le cas pour l’Hamiltonien qui dépend aussi des opérateurs positions ( $H(q)$  serait un opérateur puisqu’en représentation position il serait fonction de  $\partial_q$ ). Pour palier à ce problème, on peut utiliser le théorème du Viriel quantique [6] qui implique que pour certaines conditions et pour des états stationnaires :

$$\boxed{\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{V}(\hat{\mathbf{q}}) \rangle + \frac{1}{2} \langle \hat{\mathbf{q}} \cdot \vec{\nabla} \hat{V}(\hat{\mathbf{q}}) \rangle} \quad (19)$$

avec  $\hat{\mathbf{q}}$  un vecteur contenant tous les opérateurs positions nécessaires (dimensions ou particules supplémentaires). De cette manière on peut trouver l’énergie moyenne du système mais il faut connaître la dérivée spatiale du potentiel, ce qui peut s’avérer quelque peu embêtant lorsqu’il y a beaucoup de particules. Pour cette raison, dans le cas de particules multiples, seule l’énergie d’une interaction harmonique entre celles-ci sera calculée (fait par la fonction *harmonicMoy()*, la dérivation de la formule se trouve dans l’annexe partie 4.1).

### 2.3.2 Vitesse de convergence

Afin de tester la vitesse de convergence du programme, il est aussi possible de voir l’évolution de la similitude entre la densité de probabilité théorique (pour l’oscillateur harmonique) et celle calculée par l’algorithme. Pour cela, on définit la norme :

$$P(N_i) = \sqrt{\int_{\mathbb{R}} ||\psi_0(q)|^2 - |\phi_0(q, N_i)|^2|^2 dq} \quad (20)$$

$|\psi_0(q)|^2$  étant la densité de probabilité théorique et  $|\phi_0(q, N_i)|^2$  la densité de probabilité obtenue par l’algorithme après  $N_i$  itérations. Cela ne doit pas du tout être la meilleure manière de trouver une "distance" entre deux fonctions (d’autant plus que la valeur de  $P(N_i)$  est arbitraire) mais cela nous permettra de voir la vitesse

de convergence de l'algorithme et de vérifier si, comme prédit théoriquement, la convergence est en  $N_i^{-\frac{1}{2}}$  [4].

## 3 Résultats numériques

### 3.1 Les grandeurs et paramètres

Par simplicité, on considérera que toutes les grandeurs sont sans unité et que  $\hbar = 1$ .

Avant de commencer la simulation, il est important de réfléchir aux paramètres que l'on utilisera et particulièrement au temps  $T$  de simulation, à  $dt$  l'intervalle de temps et à  $N_b$  le nombre total d'itérations.

- Concernant  $T$ , nous savons qu'il doit être grand afin que seule la contribution de l'état fondamental ne soit pas négligeable. C'est à dire, il faut que<sup>8</sup> :

$$e^{-E_0 T} \gg e^{-E_1 T} \Rightarrow e^{(E_1 - E_0) T} \gg 1 \quad (21)$$

Par exemple pour l'oscillateur harmonique on demande :  $e^{\omega T} \gg 1$ . En général, poser  $T = 100$  est amplement suffisant pour n'importe quel potentiel ( $T = 20$  fonctionne pour  $V(q) = \frac{1}{2}q^2$ ).

- $dt$  doit être assez faible pour justifier l'approximation faite à la formule (16). Il n'y a pas vraiment de grandeur "limite" mais  $dt \simeq 1$  semble marcher dans la plus part des cas (la valeur limite du  $dt$  varie en fonction du potentiel, par exemple  $dt = 10$  convient à peu près au potentiel  $\frac{1}{2}(\omega q)^2$  si  $\omega = 1$  mais pas du tout si  $\omega = 100$ ).
- Il n'y a pas réellement de  $N_b$  optimum, cela dépendra du potentiel, en général si  $V(q_{(1)}, q_{(2)}, \dots, q_{(N)})$  est concave ou convexe (ie : si il n'y a pas plusieurs "puits") sur  $\mathbb{R}^N$ , alors pour 100 divisions temporelles  $N_b = 10^6 N$  semble tout le temps fonctionner ( **$N$  est le nombre de particules,  $q_{(i)}$  dénote la position de la  $i$ -ème particule à ne pas confondre avec  $q_i$  qui dénote la position d'une particule à la  $i$ -ème division temporelle**). Il faut aussi faire attention au nombre de divisions temporelles. Comme on peut le voir sur la figure 1, si le nombre de divisions est trop grand il y aura énormément de points et puisque l'algorithme modifie le chemin point par point, il faudra beaucoup d'itérations avant de se rapprocher d'une distribution suivant  $p$  (d'autant que pour le chemin à 1000 divisions, la trajectoire **créée initialement** s'éloigne plus facilement de 0 que pour

---

8. Il faut aussi que les  $E_n$  avec  $n > 0$  soient beaucoup plus négligeables que  $E_0$  car sans ça, la somme des contributions des énergies  $E_n$  avec  $n > 0$  n'est plus négligeable face à  $E_0$

celui à 100 divisions<sup>9</sup>, mais cela peut être réglé dans les paramètres de la fonction `path()` qui génère le chemin).

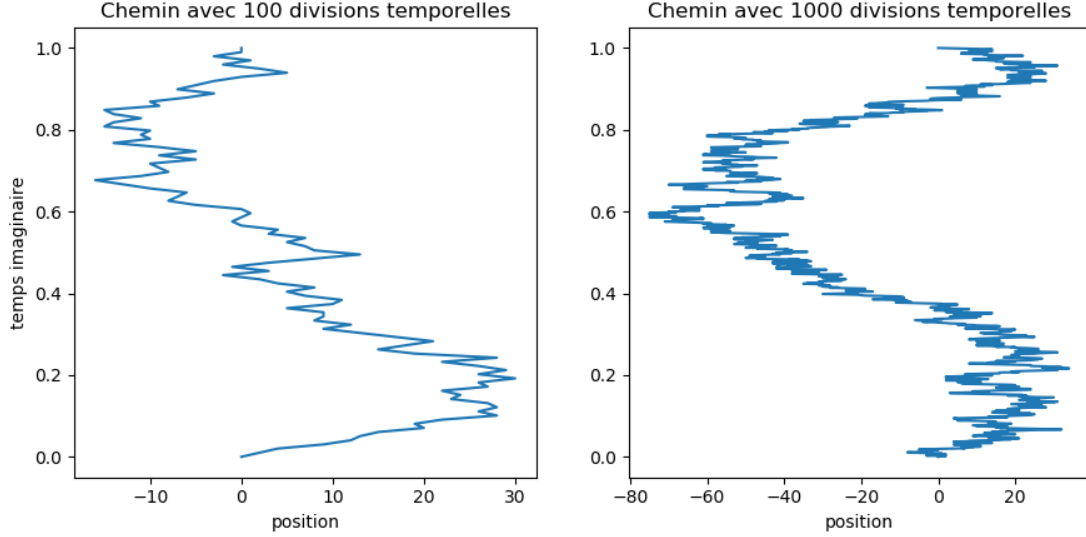


FIGURE 1 – Comparaison de 2 chemins générés **aléatoirement**

## 3.2 Probabilité de l'état fondamental et chemin

### 3.2.1 L'oscillateur harmonique quantique

Afin de tester le programme, le plus simple est de tester un potentiel harmonique (`potentiel1D=harmonicOscillator` dans le code) de la forme :

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2q^2$$

Sur la figure 2 est tracé à gauche l'histogramme formant la densité de probabilité pour le potentiel du dessus avec  $m = 1$  et  $\omega = 1$ . On peut voir que l'histogramme correspond parfaitement à la prédiction théorique tracée en orange. À droite est tracé en bleu le chemin tel qu'il a été généré (aléatoirement) au tout début et en orange le chemin après les multiples itérations de l'algorithme (à noter qu'il n'a pas vraiment de valeur en tant que tel, c'est juste **un des chemins** générés par l'algorithme. Ce n'est en rien la "trajectoire finale" de la particule mais

---

9. C'est presque une marche aléatoire (pas tout à fait puisqu'on demande  $q_i = q_f$ ) donc plus il y a de divisions/étapes, plus  $q^2$  est grand en moyenne sur la trajectoire. Mais je le rappelle, cela n'a aucune valeur puisque c'est simplement le chemin généré au tout début de l'algorithme par la fonction.

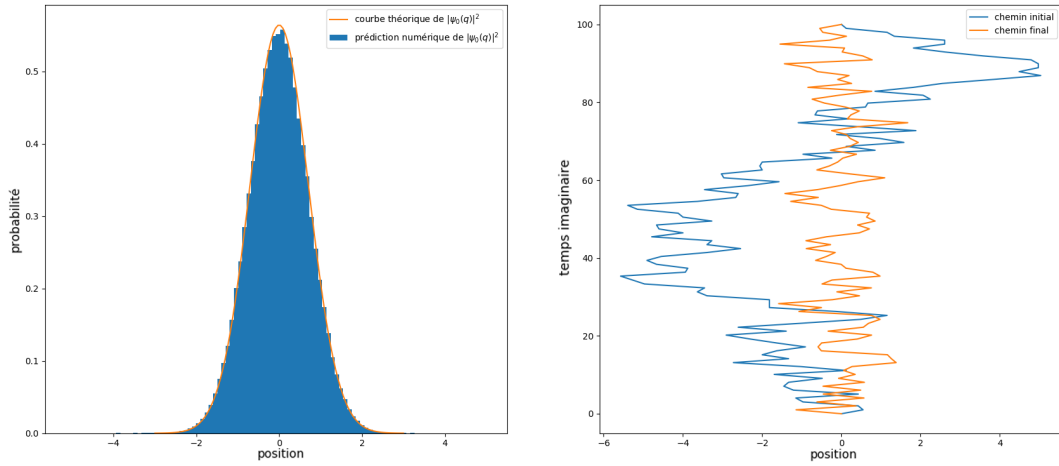


FIGURE 2 – Chemin et densité de probabilité générés par l'algorithme

on peut imaginer que c'est un chemin probable. La dénomination "finale" indique que c'est le dernier chemin généré par l'algorithme), on voit que celui-ci est bien centré en 0 comme l'indique la densité de probabilité et la parité du potentiel. L'algorithme fonctionne pour  $\omega = 1$ , changeons la fréquence et voyons si nous obtenons toujours quelque chose de cohérent.

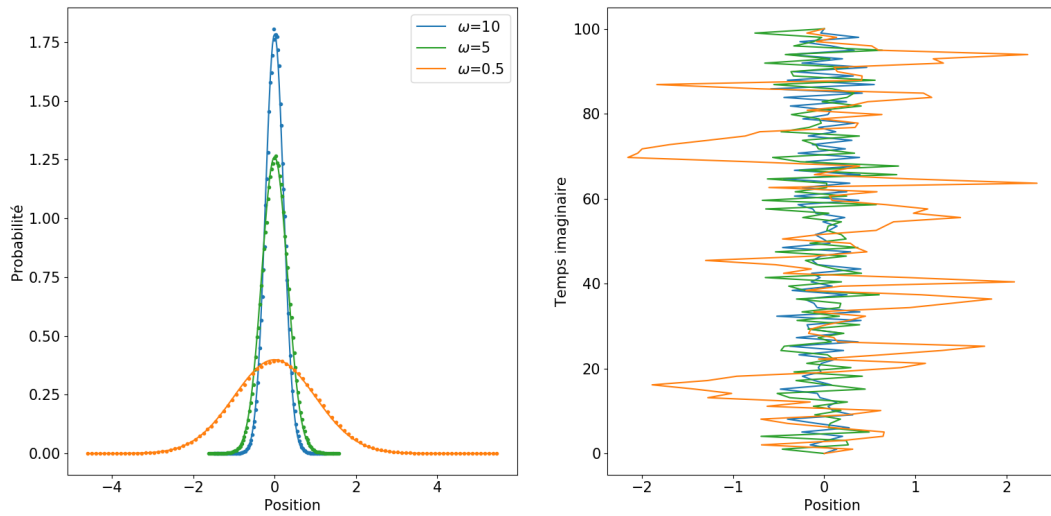


FIGURE 3 – Densités de probabilité pour différents  $\omega$  (les points sont les valeurs obtenues par l'algorithme et les "traits" sont les courbes théoriques) et chemins (finaux)

Sur la figure 3 est tracé la densité de probabilité pour des valeurs  $\omega$  différentes. L'algorithme donne les bonnes courbes. De plus les chemins obtenus sont cohérents

avec ce à quoi on pourrait s'attendre. Plus  $m\omega^2$  est grand, plus la particule a du mal à s'écarter de 0, plus le chemin est resserré autour de  $q = 0$ , plus l'écart type de la probabilité est faible. Il en irait de même si on changeait la masse. Mais ces informations sont mieux comprises par la détermination de  $\langle q^2 \rangle$  qui se fera plus loin.

### 3.2.2 L'oscillateur harmonique dans un champ de force constant

Toujours dans l'optique de voir la relation qu'entretient la densité de probabilité et le chemin, il est intéressant de prendre un potentiel de la forme :

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 - Gq$$

pouvant être vu comme une particule de charge égale à 1 soumise à un champ électrique constant et à un potentiel harmonique. Dans la partie 4.2, on montre que la fonction d'onde associée à ce potentiel  $\phi_0(q)$  vérifie :  $\phi_0(q) = \psi_0\left(q - \frac{G}{m\omega^2}\right)$  où  $\psi_0$  est la fonction d'onde de l'oscillateur harmonique. Ainsi, un champ de force constant translate simplement la gaussienne de l'oscillateur harmonique quantique.

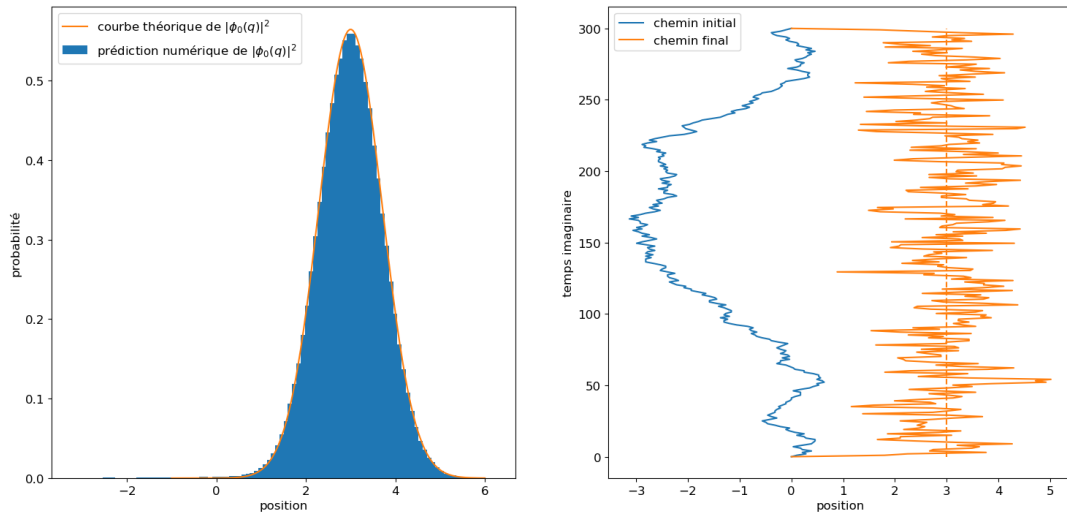


FIGURE 4 – Densité de probabilité et chemin pour une particule dans un potentiel harmonique et un champ de force constant

Sur la figure 4, on voit que la densité de probabilité est bien la translatée de celle de l'oscillateur harmonique. Ainsi, le chemin n'est plus centré en 0 mais en 3 (car dans la simulation  $G = 3$  et  $m = \omega = 1$ ). On peut d'ailleurs, sur la densité de probabilité, voir les reliques du chemin "non thermalisé" en effet, l'histogramme n'est pas tout à fait nul autour de  $-2$  (il faut quand même zoomer...) alors que



le nombre de valeurs en ce point devrait être complètement négligeable (théoriquement  $|\phi_0(-2)|^2 \approx 10^{-11}$ ). Cela est dû au fait que les premières valeurs (qui ne suivent bien sûr pas  $p$ ) ne sont pas rejetées et qu'il y a un grand nombre de séparation temporelles (par ailleurs on voit clairement que le chemin initial passait une bonne partie de son temps proche de  $-2$  ce qui est cohérent avec ce qu'on observe pour l'histogramme). En toute rigueur, il faudrait supprimer les valeurs de la phase de "burn-in" mais elles sont en général très négligeables, ici, j'ai voulu marquer la chose en prenant un grand nombre de divisions temporelles augmentant ainsi le nombre nécessaire d'itérations avant la fin de la phase de thermalisation et donc le nombre de valeurs bonnes à jeter. L'effet est plus visible sur **cette vidéo**.

### 3.2.3 L'interaction harmonique entre deux particules

Maintenant que nous avons testé notre code avec 1 particule, voyons ce que donne 2 particules. Testons le potentiel (*potentielND=harmonicInterrac* et *nbParticule=2*) :

$$V(q_a, q_b) = \frac{\lambda}{4}(q_a - q_b)^2$$

où  $q_a$  et  $q_b$  représentent respectivement la position de la particule  $a$  et de la particule  $b$  (toutes deux de même masse). Dans la partie 4.3, nous avons prouvé qu'en faisant le changement de variable :  $X = (q_a - q_b)/\sqrt{2}$  et  $x = (q_a + q_b)/\sqrt{2}$  nous tombions sur un Hamiltonien séparable "composé" de la somme d'un Hamiltonien libre en  $x$  et d'un Hamiltonien harmonique en  $X$ . C'est à dire :

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}_x^2}{2m} + \frac{\hat{P}_X^2}{2m} + \frac{1}{2}\lambda\hat{X}^2 \quad (22)$$

#### 3.2.3.1 La densité de probabilité 2D

Sur la figure 5 il est intéressant de commencer par l'analyse du chemin où l'on peut distinguer clairement la partie libre et la partie harmonique de l'Hamiltonien. En effet, on peut voir que les deux particules sont en interactions car les deux chemins "finaux" sont proches l'un de l'autre de fait  $|q_b - q_a|$  doit être proche de 0. Par contre, puisqu'il n'y a pas de potentiel "extérieur", les particules sont "libres" d'aller dans tous l'espace. C'est la partie libre de l'Hamiltonien. Pour résumer, les chemins (les plus probables) pourront se trouver dans tous l'espace mais jamais loin l'un de l'autre.

Bien sûr, on peut observer cette tendance avec l'histogramme. On voit que la densité de probabilité est importante autour de la droite  $q_b = q_a$ . Cela correspond bien à cette idée d'interaction harmonique entre les deux particules. Par contre, on voit que la densité faiblit vite lorsque  $q_b$  ou  $q_a$  devient grand mais que l'on reste proche de la droite  $q_b = q_a$ . Cela est dû à deux choses :

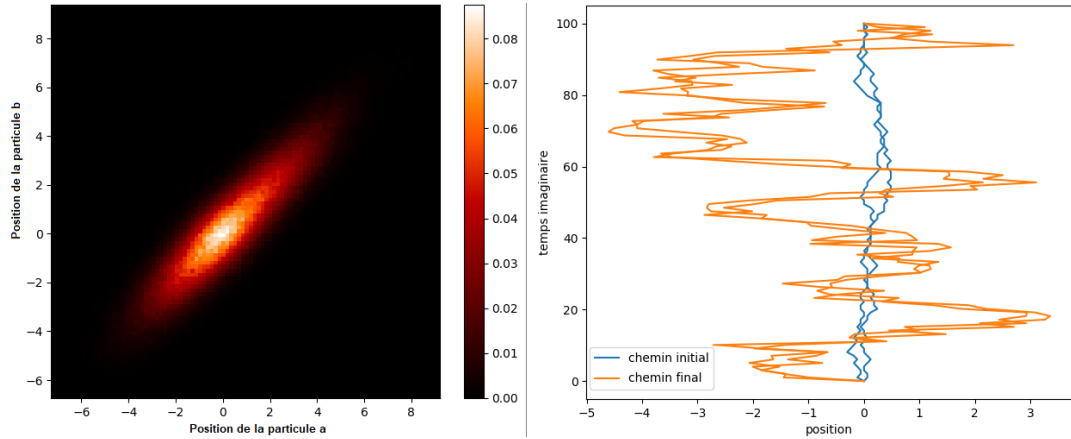


FIGURE 5 – Densité de probabilité et chemin d'un système de deux particules en interaction harmonique

- Les points d'arrivé et de départ sont fixés à 0. Du coup, en moyenne, la partie libre va tendre à rester autour de 0 (marche aléatoire).
- Il y a eu (relativement) peu d'itérations. Avec plus d'itérations, la distance maximum parcourut aurait été plus grande et la densité se serait "aplatie".

### 3.2.3.2 La densité de probabilité selon $(q_a - q_b)/\sqrt{2}$

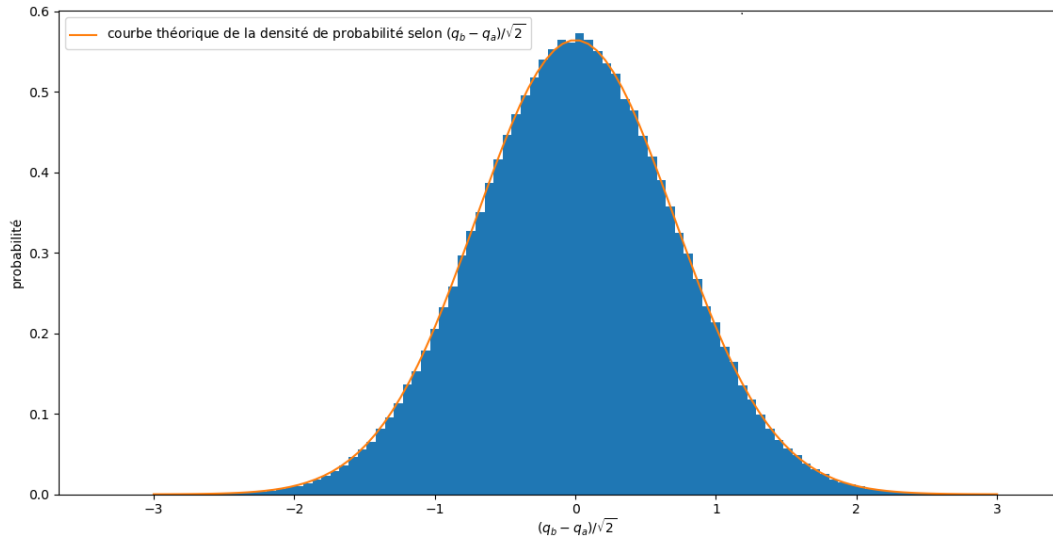


FIGURE 6 – Densité de probabilité selon  $(q_a - q_b)/\sqrt{2}$

On peut passer en 2D afin de vérifier la densité de probabilité et voir si on

trouve bien la fonction d'onde attendue (d'après l'Hamiltonien de l'équation 22, on est sensé obtenir la même densité de probabilité qu'un oscillateur harmonique avec  $m = 1$  et  $\omega = 1$  puisque j'ai posé  $\lambda = 1$ ). Pour cela, on trace simplement l'histogramme de tous les  $(q_a - q_b)/\sqrt{2}$  comme fait sur la figure 6 et on trouve bien la bonne densité de probabilité.

### 3.2.3.3 La densité de probabilité selon $(q_a + q_b)/\sqrt{2}$

Dans la partie précédente, nous avons bien trouvé la partie harmonique de l'Hamiltonien. Pour la partie libre, c'est plus épineux...

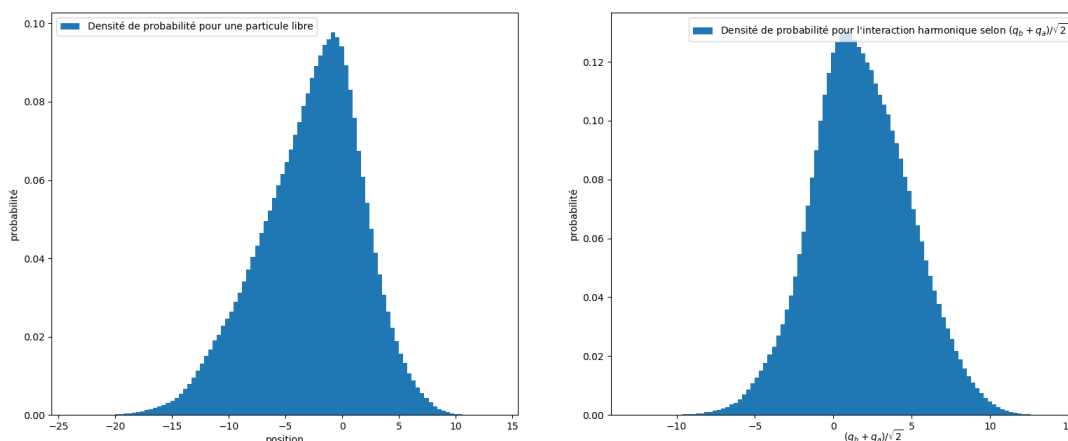


FIGURE 7 – Comparaison de la densité de probabilité selon  $(q_a - q_b)/\sqrt{2}$  de l'interaction harmonique et de la densité de probabilité d'une particule libre

À première vue (et à seconde vue aussi...) les deux densités ne collent pas du tout. En fait, l'algorithme ne peut pas vraiment trouver de densité de probabilité valable pour une particule complètement libre. Les niveaux d'énergies sont continus, la particule peut s'étaler sur tout l'espace, la densité dépend du nombre d'itérations et du temps. Pour ces raisons, la comparaison n'est pas vraiment possible (d'autant que d'une simulation à une autre la densité de probabilité de la particule libre varie grandement)... On peut quand même remarquer que les deux fonctions semblent un peu similaires de par leur forme.

## 3.3 Convergence

### 3.3.1 Convergence vers une solution dans le cas d'un potentiel non convexe

Plus haut, j'ai mentionné le fait qu'il était préférable que  $V(q)$  soit convexe. En effet, le chemin semble avoir du mal à passer "à travers" une barrière de potentiel.

Avant toute étude de convergence, voyons comment se comporte la fonction d'onde du potentiel (*doubleGaussian()*) :

$$V(q) = -3q^2 e^{\frac{q^2}{2}}$$

Cela pourrait modéliser (très approximativement) le potentiel auquel serait soumis deux nucléons en interaction. C'est un potentiel de Lennard-Jones bon marché

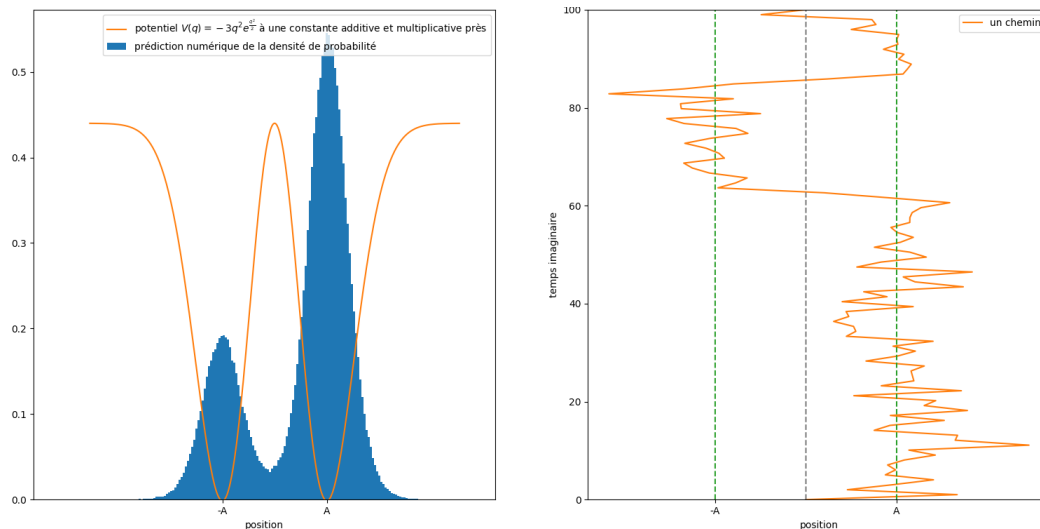


FIGURE 8 – Densité de probabilité et chemin montrant les problèmes de convergence possibles

Sur la figure 8 est tracée à gauche la densité de probabilité obtenue après  $10^6$  itérations en partant d'un chemin de 0 (afin de partir de quelque chose de parfaitement symétrique). On voit qu'elle n'est pas correcte puisqu'on s'attend à avoir une densité de probabilité paire puisque  $V$  l'est. Pour un oscillateur harmonique,  $10^6$  itérations auraient largement suffi mais ici cela n'a pas été assez. La raison est facilement visible à l'aide du chemin.  $V$  est minimal pour  $q = \pm\sqrt{2} = \pm A$  mais est maximal pour  $q = 0$  de fait, la plus part des chemins devraient "osciller" soit autour de  $A$  soit autour de  $-A$  soit autour des deux mais prenons l'exemple extrême où la particule "n'oscille" qu'autour de  $A$  pour un chemin. Afin d'atteindre  $-A$  il va falloir passer à travers la barrière de potentiel en  $q = 0$ . Ce qui est peu probable (mais pas impossible!). De fait, la trajectoire a de grandes chances de rester bloquée dans un des minima de potentiel pendant un nombre d'itérations assez long comme le montre **cette animation du chemin** (pour cette simulation, la densité de probabilité était trop importante en  $q > 0$ ).

J'ai essayé de résoudre ce problème de deux manières différentes :

- J'ai fait plusieurs simulations avec peu d'itérations plutôt qu'une seule avec beaucoup d'itérations. Par exemple sur la figure 9 on peut voir 9 simulations de  $10^6$  itérations qui sont par la suite "moyennées" afin d'obtenir la densité plutôt qu'une seule de  $9 \cdot 10^6$  itérations. La densité de probabilité est en général mieux approximée de la sorte.
- J'ai augmenté  $u$ , la modification maximale permise par Metropolis (voir la section (2.2.2)). En posant  $u = 5$ , en moyenne, la modification proposée fait largement sauter la particule au dessus du potentiel et celle ci passe facilement d'un minimum à un autre. Le problème de cette méthode est qu'elle baisse évidemment le taux d'acceptation  $S$  des modifications proposées (si une modification peut nous faire facilement arriver dans un minimum, alors une autre peut facilement nous en éloigner et donc être rejetée avec une forte probabilité). Pour cette raison, cela ne semble pas améliorer la convergence.

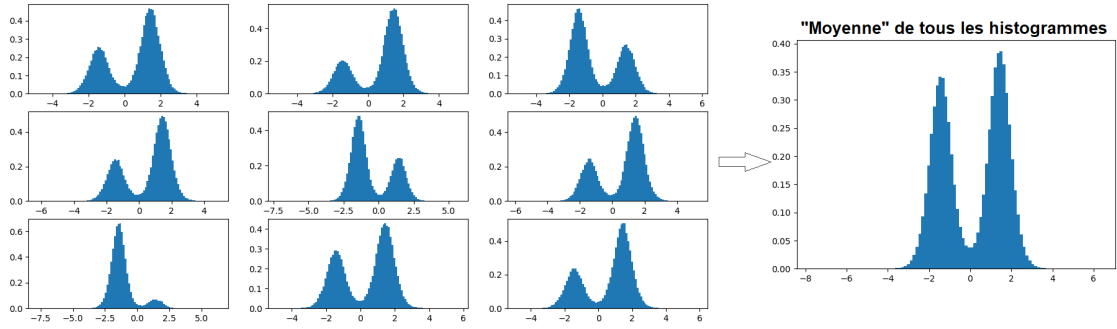


FIGURE 9 – Plusieurs densités de probabilité "moyennées"

### 3.3.2 Vitesse de convergence

#### 3.3.2.1 Une convergence en $1/\sqrt{N_i}$

Dans la partie 2.3.2 nous avons défini une mesure de la similitude  $P(N_i)$  entre la densité de probabilité théorique et celle obtenue par l'algorithme au bout de  $N_i$  itérations.

Sur la figure 10 est tracée en bleu la valeur de  $P(N_i)$  pour un potentiel d'oscillateur harmonique (obtenue grâce à la fonction `diffCurve1D()` lorsque `afficherVitesseConvergence=True`). J'ai tenté de voir quelle fonction décrivait le mieux la vitesse de convergence à l'aide de régressions faites par `curve_fit` de la bibliothèque `scipy`. On s'aperçoit que la fonction collant avec les valeurs de  $P$  est celle en  $1/\sqrt{x}$ . Comme l'indique [4] l'algorithme semble bien avoir une vitesse de convergence en  $1/\sqrt{N_i}$ .

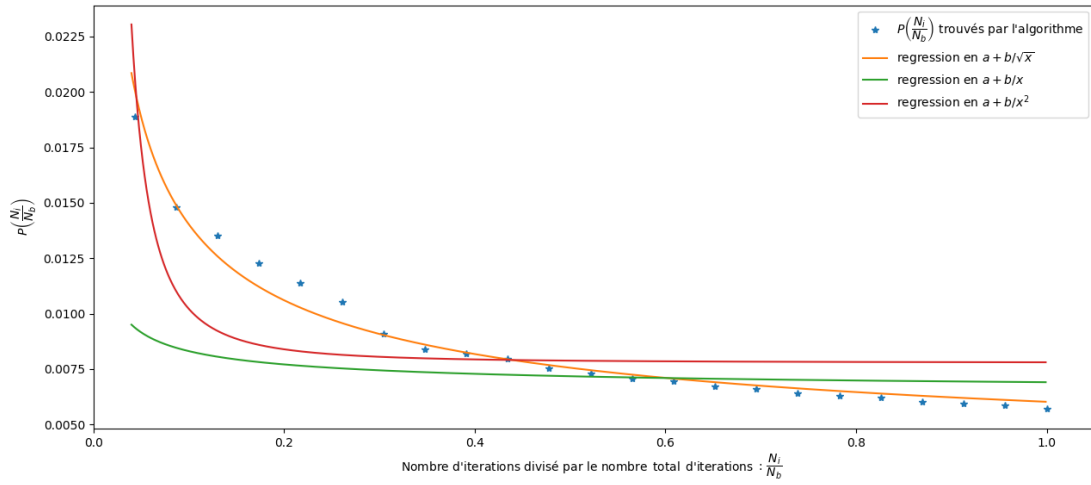


FIGURE 10 – Vitesse de convergence de l'algorithme de Metropolis

### 3.3.2.2 Vitesse de convergence pour plusieurs simulations

Nous avons vu plus haut qu'il était préférable de calculer plusieurs fois l'intégrale et de moyenner les résultats plutôt que de faire une grosse simulation.

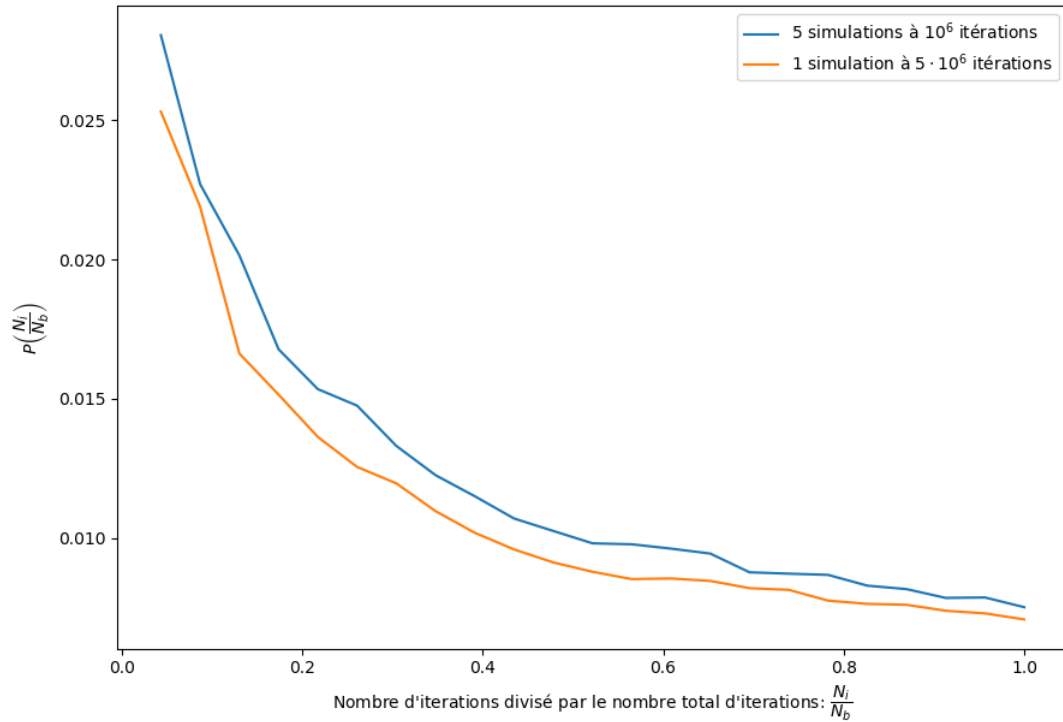


FIGURE 11 – Comparaison des deux "méthodes" de simulation

Sur la figure 11 la différence entre les deux méthodes n'est pas visible. Les deux courbes convergent de la même manière. Cela vient sûrement du fait que puisque pour ce test le potentiel est harmonique, le chemin se "thermalise" très vite. Par contre, cette méthode peut être intéressante pour donner des incertitudes aux moyennes par exemple<sup>10</sup>.

## 3.4 Valeurs moyennes

### 3.4.1 L'oscillateur harmonique

Théoriquement, pour un oscillateur harmonique, on trouve :

$$\langle q \rangle = 0 \quad \langle q^2 \rangle = \frac{1}{2m\omega} \quad \langle q^3 \rangle = 0 \quad \langle q^4 \rangle = \frac{3}{4m^2\omega^2} \quad \langle E \rangle = \frac{\omega}{2}$$

pour l'état fondamental.  $\langle E \rangle$  est trouvée numériquement grâce au théorème du Viriel (voir partie 2.3.1 pour plus d'informations) qui dans notre cas donne :  $\langle H \rangle = m\omega^2 \langle q^2 \rangle$ .

$m = \omega = 1$	Valeur théorique	Valeur numérique
$\langle q \rangle$	0	$0.0081 \pm 0.0103$
$\langle q^2 \rangle$	0.5	$0.5047 \pm 0.0010$
$\langle q^3 \rangle$	0	$0.00085 \pm 0.00097$
$\langle q^4 \rangle$	0.75	$0.7620 \pm 0.0083$
$\langle E \rangle$	0.5	$0.5047 \pm 0.0010$

Ci dessus sont données les résultats théoriques et numériques. Ces valeurs ont été calculées pour  $N_b = 10^6$  et la simulation a été répétée 5 fois pour avoir des incertitudes (les valeurs moyennes ont été calculées avec *harmonicMoy()* et *meanXX()* ce dernier a été un peu arrangé pour pouvoir mettre des puissances différentes de 2 pour  $q$ ). Aux incertitudes près, bien que nous soyons proches des valeurs attendues, les données numériques ne collent pas. Cela s'explique probablement par le fait que  $T$  n'était pas assez grand et que par conséquent, les niveaux d'énergies  $n > 0$  contribuaient un peu aux valeurs moyennes (À noter que  $\langle q \rangle$  et  $\langle q^3 \rangle$  sont théoriquement nuls quelque soit l'état propre dans lequel on se trouve. Et ce sont les deux seuls qui ont une valeur numérique compatible avec la théorie. Cela renforce donc l'idée que des états  $n > 0$  contribuent de manière non négligeable aux valeurs moyennes).

---

10. Ce seront des incertitudes statistiques, pas des incertitudes dues aux approximations faites.

### 3.4.2 L'interaction harmonique

Nous n'avons pas encore testé le programme avec  $N$  particules. Pour ce faire, nous tenterons de calculer la valeur moyenne du potentiel :

$$V(q_{(1)}, q_{(2)}, \dots, q_{(N)}) = \sum_{1 \leq i < j}^N \frac{1}{2} \lambda (q_{(i)} - q_{(j)})^2$$

qui correspond à une interaction harmonique entre toutes les particules. Comme nous l'avons calculé dans la partie 4.1 en utilisant le théorème du Viriel, on trouve que :

$$\langle H \rangle = \sum_{1 \leq i < j}^N \left( \frac{1}{2} \lambda \langle (q_{(i)} - q_{(j)})^2 \rangle - \lambda \langle q_{(j)} q_{(i)} \rangle \right) + \lambda \frac{(N-1)}{2} \sum_{i=1}^N \langle q_{(i)}^2 \rangle$$

$m = \lambda = 1$	Valeur théorique	Valeur numérique
$\langle E \rangle$ pour 2 particules	$1/\sqrt{2} \simeq 0.71$	0.71
$\langle E \rangle$ pour 3 particules	$\sqrt{3} \simeq 1.73$	1.72
$\langle E \rangle$ pour 4 particules	3	3.02
$\langle E \rangle$ pour 5 particules	$2\sqrt{5} \simeq 4.47$	4.47
$\langle E \rangle$ pour 6 particules	$5\sqrt{3/2} \simeq 6.12$	6.12
$\langle E \rangle$ pour 7 particules	$3\sqrt{7} \simeq 7.94$	7.93

La dérivation des valeurs théoriques peut être trouvée ici [6]. Pour peu que l'on augmente le nombre d'itérations à chaque ajout de particules. On retrouve bien les résultats théoriques.

## Conclusion

Ce programme permet de tracer la densité de probabilité du fondamental de n'importe quel potentiel tant que celui-ci ne présente pas de "puits" ou de "barrières" trop abrupts. Il permet aussi de calculer les valeurs moyennes de l'état fondamental de n'importe quelle observable vérifiant  $\hat{O} |q\rangle = O(q) |q\rangle$  quelque soit le nombre de dimensions et de particules du système.

Afin d'améliorer le code, on pourrait calculer l'énergie de manière plus optimisée (c'est à dire, recalculer uniquement l'énergie aux points où elle a changé et pas sur tout le chemin) ou bouger plusieurs points en même temps plutôt qu'un seul à la fois (en faisant une sorte de "pente douce" autour de la modification).

Il serait aussi intéressant d'appliquer cette technique à un exemple "physique" comme le modèle d'Ising ou tout autre problème avec un grand nombre de dimensions.



## 4 Annexe

### 4.1 Le théorème du Viriel pour N particules

Nous cherchons la moyenne de l'Hamiltonien en utilisant le théorème du Viriel si le potentiel pour  $N$  particules s'écrit ( $q_{(i)}$  dénotant la position de la  $i$ -ème particule) :

$$V(q_{(1)}, q_{(2)}, \dots, q_{(N)}) = \sum_{1 \leq i < j}^N \frac{1}{2} \lambda (q_{(i)} - q_{(j)})^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{2} \lambda (q_{(i)} - q_{(j)})^2$$

Appelons  $\hat{\mathcal{H}}$  l'opérateur :  $\hat{\mathcal{H}}(\hat{\mathbf{q}}) = \hat{V}(\hat{\mathbf{q}}) + \frac{1}{2} \hat{\mathbf{q}} \cdot \vec{\nabla} \hat{V}(\hat{\mathbf{q}})$  (avec  $\hat{\mathbf{q}} = \{q_{(1)}, q_{(2)}, \dots, q_{(N)}\}$ ) qui vérifie pour un état propre :  $\langle \hat{H} \rangle = \langle \hat{\mathcal{H}} \rangle$ . Cherchons alors l'expression de  $\mathcal{H}$  :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{2} \lambda (q_{(i)} - q_{(j)})^2 + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N q_{(k)} \partial_k \left( \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{2} \lambda (q_{(i)} - q_{(j)})^2 \right)$$

Le second terme  $U$  peut se réécrire de la sorte :

$$\begin{aligned} U &= \frac{\lambda}{2} \sum_{k=1}^N q_{(k)} \partial_k \left( \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{2} (q_{(i)} - q_{(j)})^2 \right) = \frac{\lambda}{4} \sum_{k=1}^N q_{(k)} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \frac{1}{2} \partial_k (q_{(i)}^2 + q_{(j)}^2 - 2q_{(i)}q_{(j)}) \\ &= \frac{\lambda}{4} \sum_{k=1}^N q_{(k)} \left( \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \partial_k q_{(i)}^2 \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N + \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} \partial_k q_{(j)}^2 \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N - \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N q_{(j)} \partial_k (q_{(i)}) + q_{(i)} \partial_k (q_{(j)}) \right) \\ &= \frac{\lambda}{4} \sum_{k=1}^N q_{(k)} \left( q_{(k)}(N-1) + q_{(k)}(N-1) - \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N (q_{(j)} \delta_{ik} + q_{(j)} \delta_{jk}) \right) \\ &= \lambda \frac{(N-1)}{2} \sum_{k=1}^N q_{(k)}^2 - \frac{\lambda}{4} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N \sum_{k=1}^N (q_{(j)} \delta_{ik} q_{(k)} + q_{(i)} \delta_{jk} q_{(k)}) \\ &= \lambda \frac{(N-1)}{2} \sum_{k=1}^N q_{(k)}^2 - \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N q_{(j)} q_{(i)} \end{aligned}$$

Et finalement, on obtient :

$$\mathcal{H} = \sum_{1 \leq i < j}^N \left( \frac{1}{2} \lambda (q_{(i)} - q_{(j)})^2 - \lambda q_{(j)} q_{(i)} \right) + \lambda \frac{(N-1)}{2} \sum_{i=1}^N q_{(i)}^2 \quad (23)$$

## 4.2 La fonction d'onde et l'énergie de l'oscillateur harmonique dans un champ de force constant

Soit un potentiel de la forme  $V(q) = \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 - Gq$  alors l'équation de Schrödinger s'écrit sous la forme [2] :

$$\begin{aligned} H\phi(q) &= \left( \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 q^2 - Gq \right) \phi(q) = E\phi(q) \\ &= \left( \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left( q - \frac{G}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{G^2}{2m\omega^2} \right) \phi(q) \\ &= \left( -\frac{\partial_{qq}}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \left( q - \frac{G}{m\omega^2} \right)^2 \right) \phi(q) = \left( E + \frac{G^2}{2m\omega^2} \right) \phi(q) \end{aligned}$$

On pose  $u = q - \frac{G}{m\omega^2}$  et  $E' = E + \frac{G^2}{2m\omega^2}$  ce faisant,  $\partial_{qq} = \partial_{uu}$  et on trouve finalement :

$$\left( -\frac{\partial_{uu}}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 u^2 \right) \phi(u) = E' \phi(u) \quad (24)$$

C'est l'équation de Schrödinger de l'oscillateur harmonique alors on a :

$$\begin{cases} \phi_0(q) = \psi_0(u) \Rightarrow \phi_0(q) = \psi \left( q - \frac{G}{m\omega^2} \right) \\ E_0 = E'_0 - \frac{G^2}{2m\omega^2} = \frac{\omega}{2} - \frac{G^2}{2m\omega^2} \end{cases} \quad (25)$$

où  $E'_0$  est l'énergie du fondamental de l'oscillateur harmonique et  $\psi_0(q)$  la fonction d'onde du fondamental de l'oscillateur harmonique.

## 4.3 L'Hamiltonien séparable d'une interaction harmonique

Soient deux particules  $a$  et  $b$  de même masse soumises à un potentiel d'interaction harmonique :  $V(q_a, q_b) = \frac{\lambda}{4} (q_a - q_b)^2$ . Alors l'équation de Schrödinger décrivant le système est :

$$\begin{aligned} H\psi(q_a, q_b) &= \frac{P_a^2}{2m} \psi(q_a, q_b) + \frac{P_b^2}{2m} \psi(q_a, q_b) + \frac{1}{4} \lambda (q_a - q_b)^2 \psi(q_a, q_b) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_{aa} + \partial_{bb}) \psi(q_a, q_b) + \frac{1}{4} \lambda (q_a - q_b)^2 \psi(q_a, q_b) \\ &= E\psi(q_a, q_b) \end{aligned}$$

Posons  $X = (q_a - q_b)/\sqrt{2}$  et  $x = (q_a + q_b)/\sqrt{2}$  alors :

$$\left. \begin{aligned} \partial_a &= (\partial_a X) \partial_X + (\partial_a x) \partial_x = +\frac{1}{\sqrt{2}} \partial_X + \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \\ \partial_b &= (\partial_b X) \partial_X + (\partial_b x) \partial_x = -\frac{1}{\sqrt{2}} \partial_X + \frac{1}{\sqrt{2}} \partial_x \end{aligned} \right\} \Rightarrow \partial_{aa} + \partial_{bb} = \partial_{XX} + \partial_{xx}$$

Finalement, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\begin{aligned} H\psi(X, x) &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} (\partial_{XX} + \partial_{xx}) + \frac{1}{2} \lambda X^2 \right) \psi(X, x) \\ &= \left( \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_X^2}{2m} + \frac{1}{2} \lambda X^2 \right) \psi(X, x) \\ &= (H_x + H_X) \psi(X, x) \end{aligned} \tag{26}$$

Dans ces coordonnées, l'Hamiltonien est séparable. Il est "composé" d'une partie oscillateur harmonique pour  $X$  et d'une partie particule libre pour  $x$ .

## 5 Bibliographie

J'ai décidé de diviser en deux parties la bibliographie. La première partie contiendra des ouvrages/pdf qui m'ont accompagné tout au long de l'écriture du code et du rapport. La seconde bibliographie contiendra des articles qui appuieront un point spécifique exposé dans le texte.

### 5.1 Bibliographie générale

- Intégrale de chemin en mécanique quantique: introduction par Jean Zinn-Justin
- Mécanique quantique avancée II: Introduction à l'intégrale de chemin par F. Mila
- Computational Physics: Problem Solving with Python par Rubin H. Landau, Manuel J Páez, Cristian C. Bordeianu - la partie: Feynman Path Integral Quantum Mechanics

### 5.2 Bibliographie "précise"

## Références

- [1] Andreas Wipf. Chapter 2 Deriving the Path Integral.

- [2] Claude Cohen-Tannoudji and Bernard Diu. *Mécanique quantique*, volume vol. 1, nouvelle édition. Edp-sciences edition, 2018.
- [3] M. Creutz and B. Freedman. A statistical approach to quantum mechanics\* 1. *Annals of Physics*, 132 :427–462, 1981.
- [4] Gilles Lebeau. Introduction à l’analyse de l’algorithme de Metropolis, 2009.
- [5] Hitoshi Murayama. 221A Lecture Notes Path Integral.
- [6] P. Holmvall, P. Sätterskog, O. Ahlén, K. Carlsson, M. Gren, and G. Bohlin. *GPU Implementation of the Feynman Path-Integral Method in Quantum Mechanics*. PhD Thesis, 2011.
- [7] J. Schwinger. *Selected Papers on Quantum Electrodynamics - The Lagrangian in quantum mechanics par P. A. M. Dirac*. Dover Publications, New York, 1958.
- [8] B. G. Umbert. Quantum Mechanics by Numerical Simulation of Path Integral. 2017.