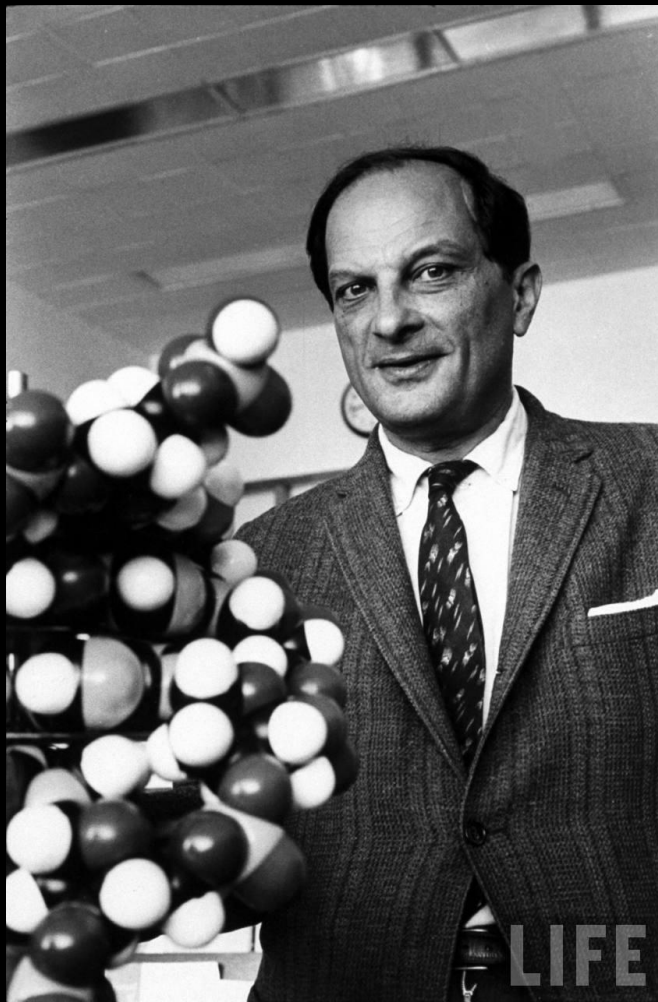


– PHS3903 –
Projet de simulation

Méthodes Monte-Carlo

Jérémie Villeneuve

Département de génie physique



Stanislaw Ulam (1909-1984)

Nicholas Metropolis
(à gauche, 1915-1999)



John von Neumann
(1903-1957)



Plan du cours

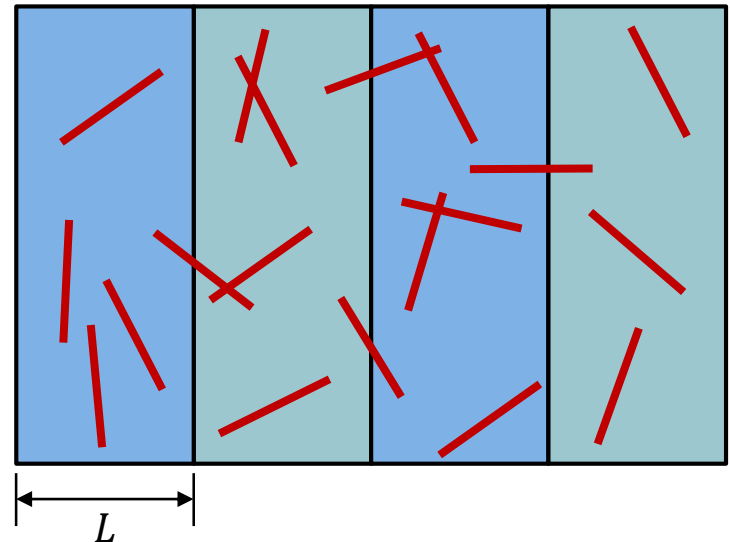
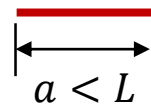
- **Méthodes Monte-Carlo pour l'intégration**
- Algorithme de Metropolis
 - Distribution d'équilibre d'un système physique
 - Modèle d'Ising en deux dimensions
- Méthodes Monte-Carlo dans ce cours

L'expérience du comte de Buffon



Georges-Louis Leclerc,
comte de Buffon (1707-1788)

Aiguille



La proportion d'aiguilles qui touchent à deux lattes du parquet tend vers $2a/\pi L$ quand le nombre d'aiguilles tend vers l'infini !

Estimation de π

$$\pi \approx \frac{2a}{L} \frac{N_{\text{aiguilles lancées}}}{N_{\text{aiguilles touchant à 2 lattes}}}$$

Méthodes Monte-Carlo

On peut considérer l'expérience de l'aiguille de Buffon comme précurseur des méthodes Monte-Carlo.

Méthode Monte-Carlo

Algorithme basé sur l'utilisation de processus aléatoires pour obtenir une solution approximative à des problèmes ayant beaucoup de degrés de liberté, ce qui les rends difficiles ou impossibles à résoudre analytiquement.

Les méthodes Monte-Carlo permettent entre autres :

- D'évaluer des intégrales en une ou en plusieurs dimensions ;
- D'échantillonner une distribution probabiliste quelconque.
Par exemple, cette distribution peut donner la probabilité d'observer un système physique à l'équilibre dans un micro-état particulier ;
- D'étudier l'évolution dynamique d'un système hors équilibre (croissance, diffusion, adsorption, etc.).

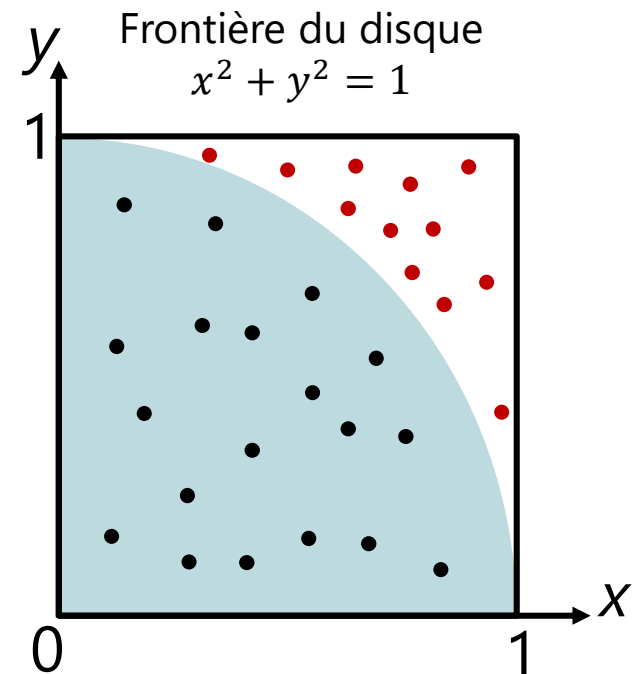
Approximer π par une méthode Monte-Carlo

Soit un quart de disque de rayon 1 inscrit dans le domaine carré $[0,1] \times [0,1]$.
On sait que l'aire du quart de disque vaut $A = \pi/4$.

Un algorithme pour estimer π

Initialiser $N_{\text{int}} = 0$ et $N_{\text{tot}} = 0$.

1. Échantillonner une valeur x à partir d'une loi uniforme sur $[0,1]$;
2. Échantillonner une valeur y à partir d'une loi uniforme sur $[0,1]$;
3. Vérifier si le point (x, y) est à l'intérieur du cercle : si oui, $N_{\text{int}} := N_{\text{int}} + 1$;
4. Mettre à jour le nombre de points générés : $N_{\text{tot}} := N_{\text{tot}} + 1$;
5. Reprendre à l'étape 1 jusqu'à avoir généré le nombre de points N_{tot} voulu.

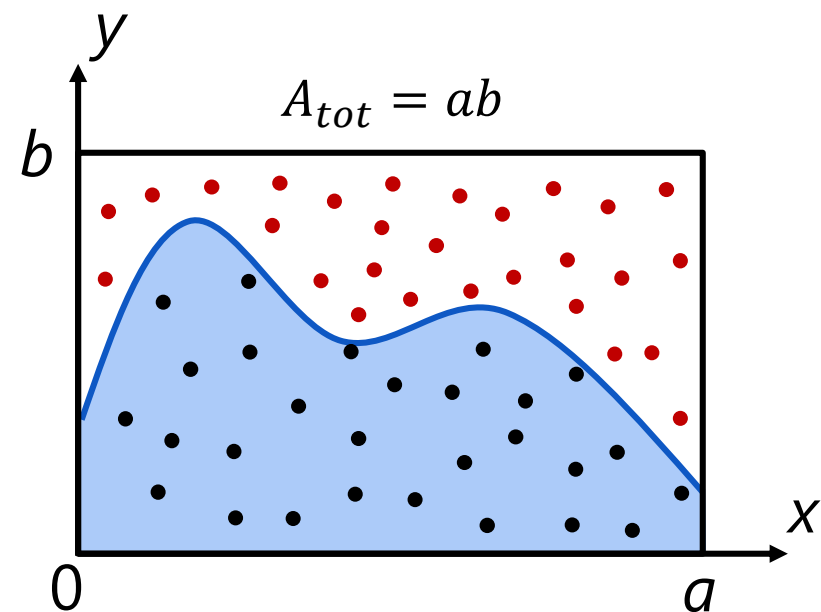
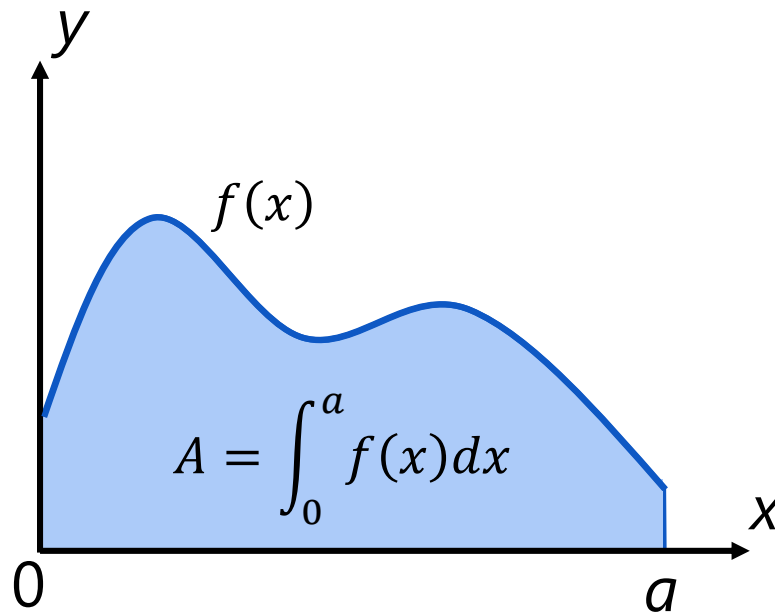


Estimation de π

$$\pi \approx 4 \cdot \frac{N_{\text{int}}}{N_{\text{tot}}}$$

Approximation d'intégrales en 1D

Le principe de l'exemple précédent s'applique généralement pour évaluer une intégrale quelconque.



Estimation de l'intégrale

$$A = \int_0^a f(x) dx \approx \frac{N_{\text{int}}}{N_{\text{tot}}} A_{\text{tot}}$$

N_{int} : Nombre de points sous la courbe $f(x)$

N_{tot} : Nombre total de points générés

A_{tot} : Aire du domaine rectangulaire

Approximation d'intégrales en 1D

Objectif. Estimer l'intégrale suivante.

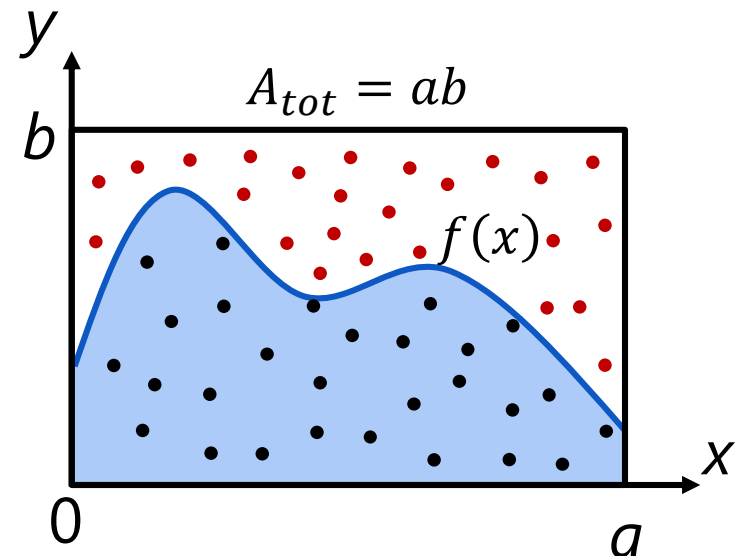
$$A = \int_0^a f(x) dx$$

Algorithme pour estimer l'intégrale

Initialiser $N_{\text{int}} = 0$ et $N_{\text{tot}} = 0$.

Choisir $b \geq \max_{x \in [0,a]} f(x)$.

1. Échantillonner une valeur x à partir d'une loi uniforme sur $[0,a]$;
2. Échantillonner une valeur y à partir d'une loi uniforme sur $[0,b]$;
3. Vérifier si le point (x, y) est sous $f(x)$:
si $y \leq f(x)$, $N_{\text{int}} := N_{\text{int}} + 1$;
4. Mettre à jour le nombre de points générés : $N_{\text{tot}} := N_{\text{tot}} + 1$;
5. Reprendre à l'étape 1 jusqu'à avoir généré le nombre de points N_{tot} voulu.



Estimation de l'intégrale

$$A = \int_0^a f(x) dx \approx \frac{N_{\text{int}}}{N_{\text{tot}}} A_{\text{tot}}$$

Approximation d'intégrales multiples

Les méthodes Monte-Carlo servent surtout à l'estimation d'intégrales multiples, car elles requièrent relativement peu d'évaluations de la fonction comparativement aux formules de quadrature.

$$I = \int f(x_1, x_2, \dots, x_n) dx_1 dx_2 \cdots dx_n$$

On rencontre souvent ce genre d'intégrales en physique statistique lorsqu'on souhaite calculer des valeurs moyennes (énergie, aimantation, etc.) sur un ensemble de micro-états très nombreux.

Énergie moyenne d'un système en physique statistique

(n particules : intégrale à $6n$ dimensions)

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \int \varepsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p}) e^{-\frac{\varepsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{k_B T}} d\mathbf{q} d\mathbf{p}$$

$$Z = \int e^{-\frac{\varepsilon(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{k_B T}} d\mathbf{q} d\mathbf{p}$$

Comportement de l'erreur

On définit l'erreur absolue associée à une application de la méthode Monte-Carlo par la différence absolue avec l'aire exacte à calculer.

$$e = \left| \frac{N_{\text{in}}}{N_{\text{tot}}} A_{\text{tot}} - A \right|$$

Étant donné qu'il s'agit d'une méthode probabiliste, il faut l'appliquer plusieurs fois pour étudier le comportement de l'erreur.

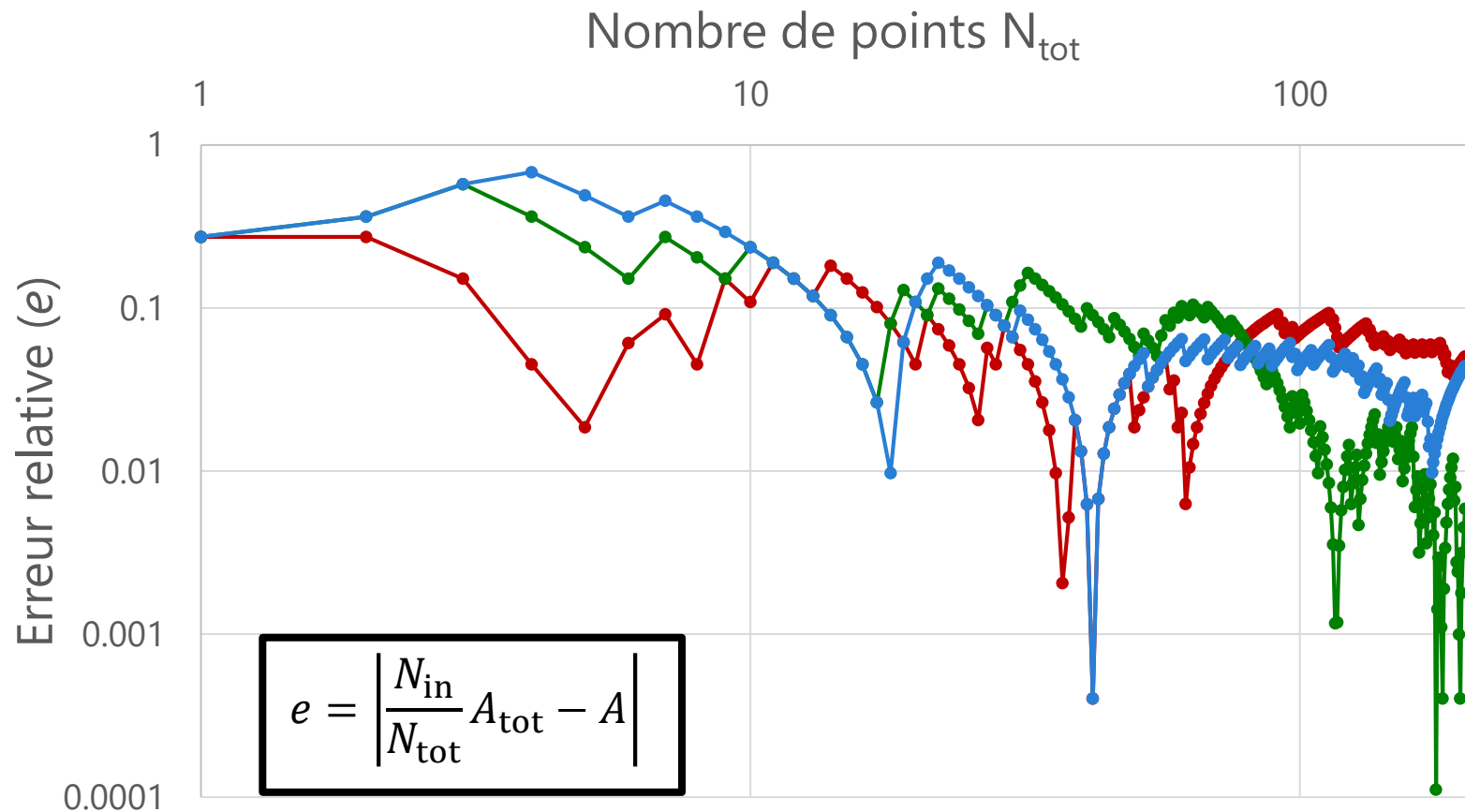
Comportement de l'erreur par intégration Monte-Carlo

$$E = \frac{1}{N_{\text{essais}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{essais}}} \left| \frac{N_{\text{in},i}}{N_{\text{tot}}} A_{\text{tot}} - A \right| \underset{N_{\text{essais}} \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{N_{\text{tot}}}}$$

L'erreur moyenne E sur tous les essais décroît avec le nombre de points N_{tot} considérés et ce, peu importe la dimensionnalité de l'intégrale !

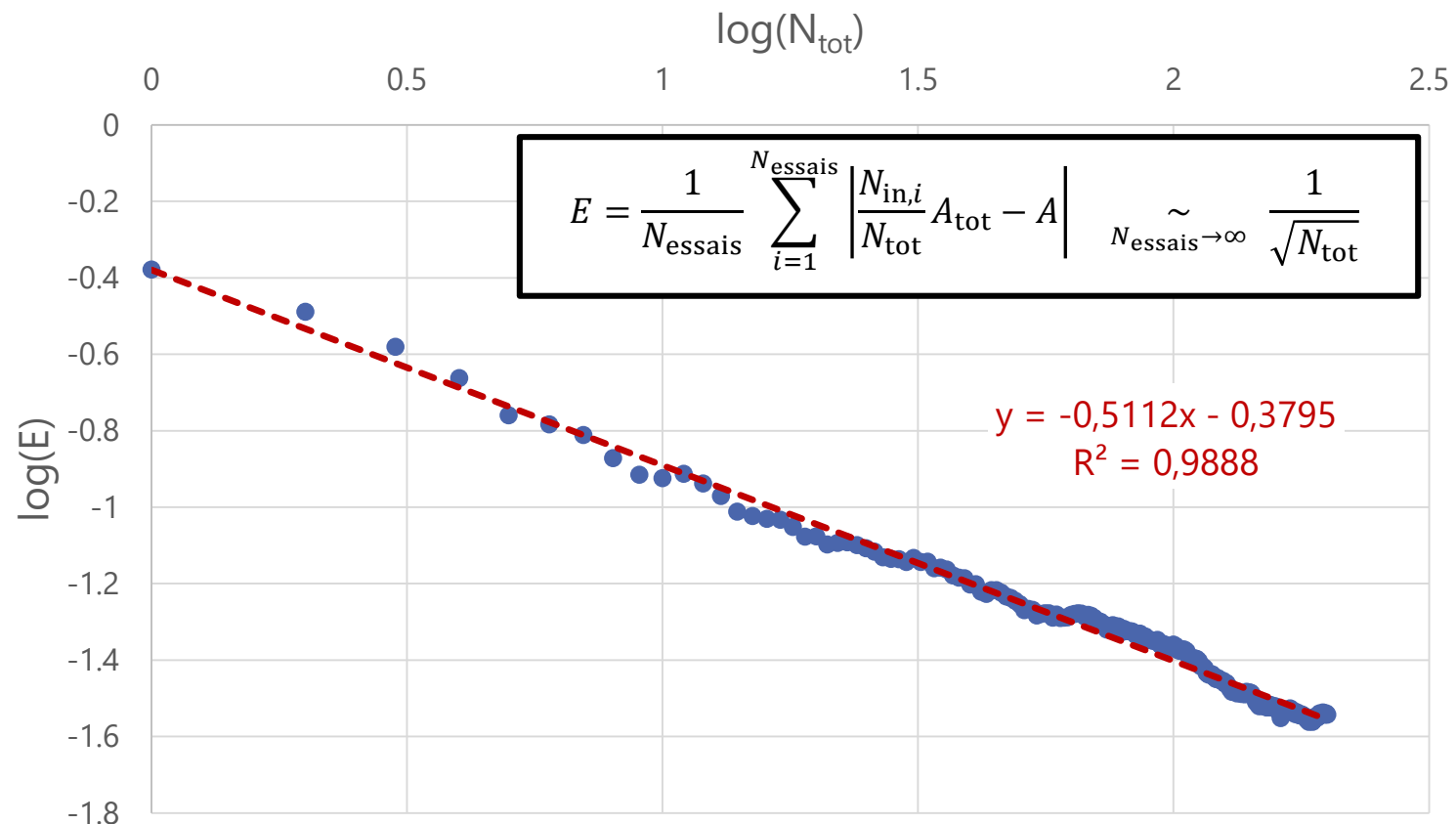
Comportement de l'erreur

Erreur relative pour 3 applications de la méthode Monte-Carlo de 1 à 200 points pour l'estimation de π par le calcul de l'aire d'un quart de disque



Comportement de l'erreur

Estimation de π par le calcul de l'aire d'un quart de disque à l'aide de la méthode Monte-Carlo de 1 à 200 points (100 simulations par point)



Plan du cours

- Méthodes Monte-Carlo pour l'intégration
- **Algorithme de Metropolis**
 - **Distribution d'équilibre d'un système physique**
 - **Modèle d'Ising en deux dimensions**
- Méthodes Monte-Carlo dans ce cours

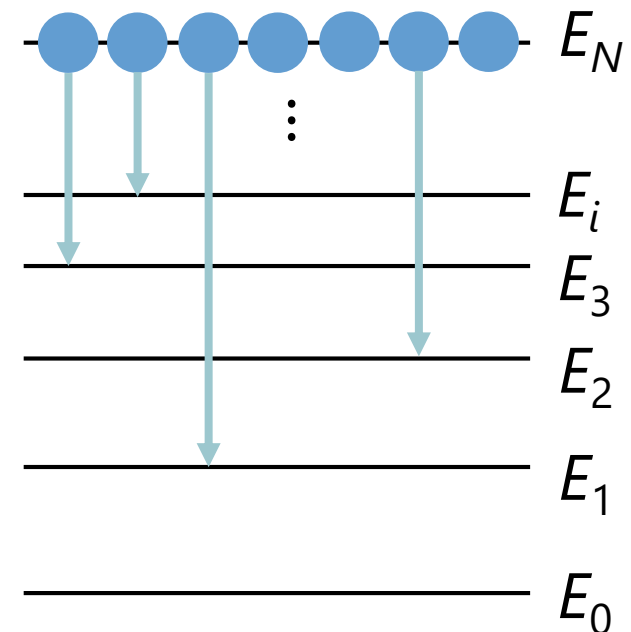
Système de particules

Soit un système de n particules classiques sans interaction qui peuvent occuper un ensemble d'états d'énergie E_0, E_1, \dots, E_N .

On part avec le système hors équilibre : on suppose que toutes les particules se retrouvent dans le niveau d'énergie le plus élevé E_N .

On laisse le système évoluer pendant un temps suffisamment long pour qu'il atteigne l'équilibre.

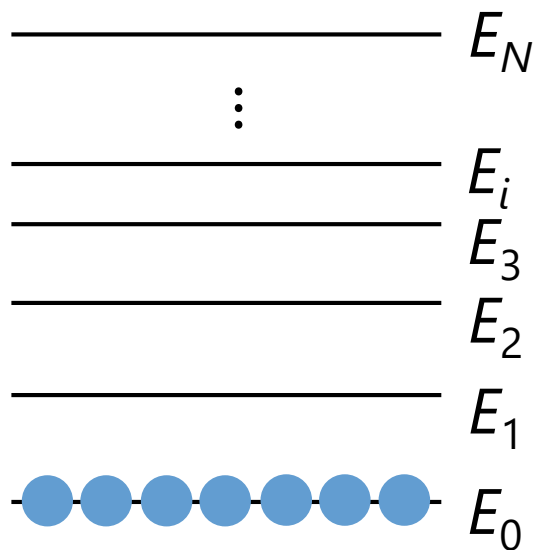
Quelle est la distribution qui représente l'occupation des états d'énergie du système à l'équilibre ?



Système de particules à l'équilibre

Température nulle ($T = 0$)

Le système est dans l'unique configuration d'énergie minimale.

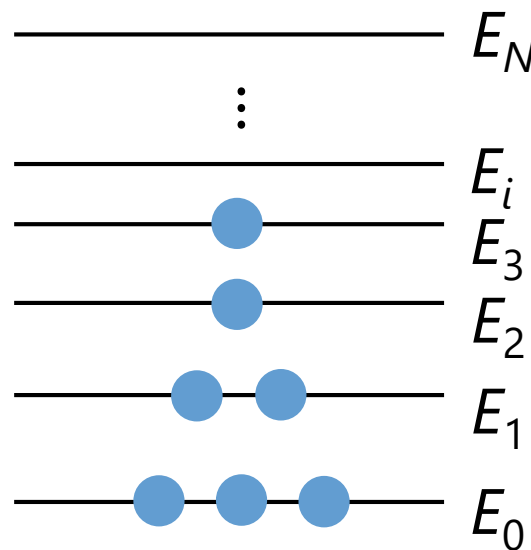


Comment générer un ensemble de configurations qui reflètent la distribution à l'équilibre ?

Température non nulle ($T > 0$)

La probabilité d'occuper l'état i est donné par la [distribution de Boltzmann](#). Le système à l'équilibre peut occuper [plusieurs configurations d'énergies différentes](#).

Un état possible à l'équilibre



Nombre moyen n_i de particules dans l'état i

Probabilité qu'une particule occupe l'état i

$$p_i = \frac{1}{Z} e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$$

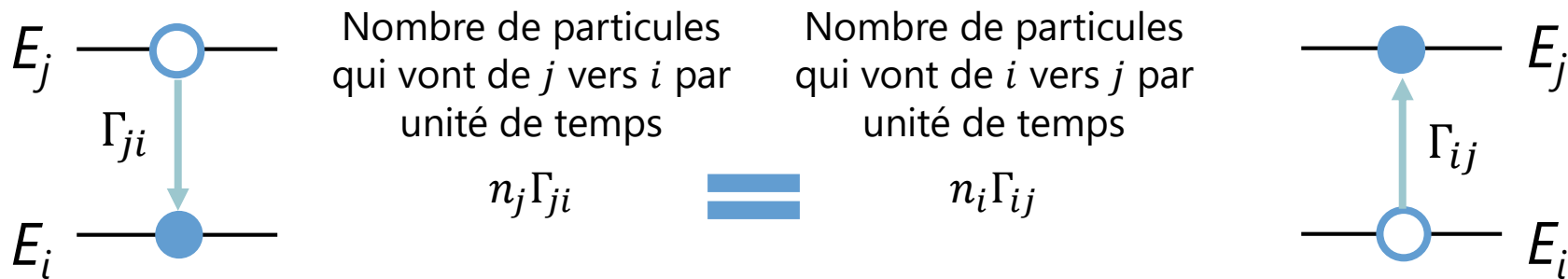
$$Z = \sum_{i=1}^n e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$$

$$n_i = n p_i = n \frac{e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}{Z}$$

Condition d'équilibre

On suppose qu'à l'équilibre, chaque processus de transition d'un état vers un autre est équilibré par le processus inverse (*detailed balance*).

On note Γ_{ij} le taux de transition [s^{-1}] de l'état i vers l'état j .



On rappelle que n_i est proportionnel au facteur de Boltzmann.

Il faut choisir les taux de transition Γ_{ij} de sorte à respecter la condition d'équilibre.

Condition d'équilibre

$$\Gamma_{ij} e^{-\frac{E_i}{k_B T}} = \Gamma_{ji} e^{-\frac{E_j}{k_B T}}$$

Algorithme de Metropolis

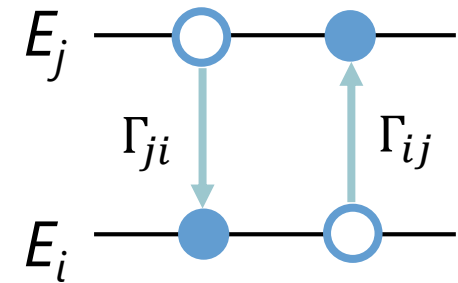
Pour $E_i < E_j$, poser : $\Gamma_{ji} = 1$ $\Gamma_{ij} = e^{-\frac{E_j - E_i}{k_B T}}$

Algorithme de Metropolis

Initialiser la configuration initiale du système.

Choisir la température T .

1. Choisir une particule i aléatoirement ;
2. Choisir un niveau d'énergie E_j , $j \neq i$ aléatoirement ;
3. Déterminer si la transition a lieu :
 - a. Si $E_j \leq E_i$, la transition a lieu ;
 - b. Si $E_j > E_i$, la transition a lieu avec une probabilité $\Gamma_{ij} = e^{-\frac{E_j - E_i}{k_B T}}$.
(Générer un nombre aléatoire x d'une distribution uniforme sur $[0,1]$. Si $x \leq \Gamma_{ij}$, alors la transition a lieu.)
4. Reprendre à l'étape 1 jusqu'à la convergence des propriétés statistiques des configurations générées.



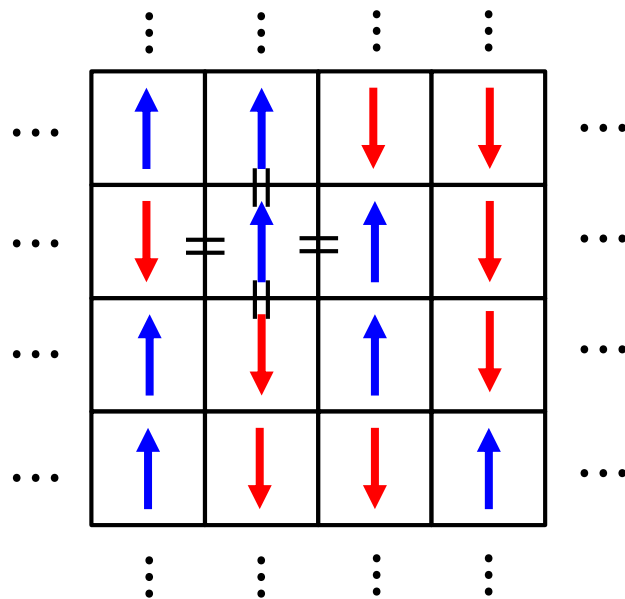
$$\Gamma_{ij} e^{-\frac{E_i}{k_B T}} = \Gamma_{ji} e^{-\frac{E_j}{k_B T}}$$

L'algorithme permet de générer des échantillons de configurations du système respectant la distribution d'équilibre de Boltzmann.

Application au modèle d'Ising

Le modèle d'Ising sert, entre autres, à étudier les matériaux ferromagnétiques en les représentant par un **réseau de spins** pouvant prendre deux orientations (haut ou bas).

Modèle d'Ising 2D

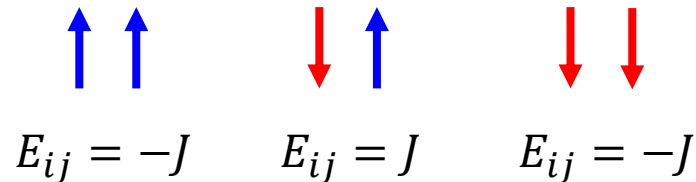


↑ Spin $S_i = +1$ ↓ Spin $S_j = -1$

Interaction entre deux spins voisins

(spins voisins : cases adjacentes)

$$E_{ij} = -JS_iS_j$$



Énergie d'une configuration de spins

(champ magnétique externe nul)

$$E = \sum_{(i,j)} -JS_iS_j$$

Chaque interaction entre plus proches voisins n'est comptée qu'une fois.

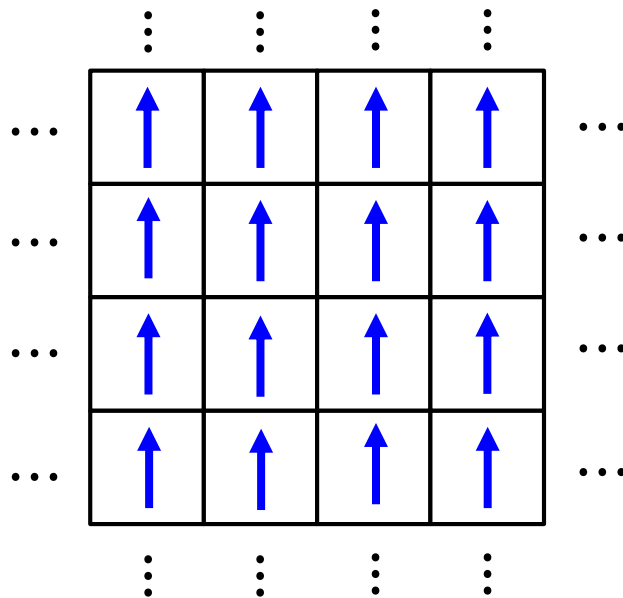
Application au modèle d'Ising

La valeur de la constante d'interaction J dicte les configurations fondamentales de moindre énergie.

$$E = \sum_{(i,j)} -JS_iS_j$$

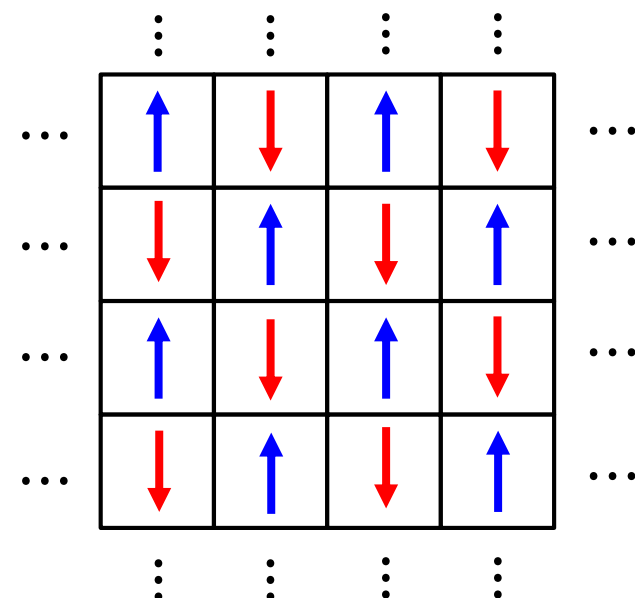
Ferromagnétique ($J > 0$)

L'énergie est minimisée lorsque les spins sont tous parallèles entre eux.



Antiferromagnétique ($J < 0$)

L'énergie est minimisée lorsque les spins sont antiparallèles aux spins voisins.



Si la température est non nulle ($T > 0$), le système ne sera pas toujours dans l'une de ces configurations d'énergie minimale.

Application au modèle d'Ising

Comment obtenir une configuration de spins du système à l'équilibre quand $T > 0$?

Algorithme de Metropolis

Initialiser la configuration initiale des spins.
Choisir la température T .

1. Choisir un spin S_i aléatoirement ;
2. Déterminer s'il y a inversion du spin :
 - a. Calculer $\Delta E = E_{\text{après}} - E_{\text{avant}}$;
 - b. Si $\Delta E \leq 0$, l'inversion a lieu ;
 - c. Si $\Delta E > 0$, l'inversion a lieu avec une probabilité $\Gamma = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$.
3. Reprendre à l'étape 1 jusqu'à convergence des propriétés statistiques du système.

Avant

↑	↓	↑	↓
↓	↑	↓	↓
↑	↑	↑	↓
↓	↑	↓	↑

Après

↑	↓	↑	↓
↓	↓	↓	↓
↑	↑	↑	↓
↓	↑	↓	↑

$$E_{ij} = -JS_i S_j$$

$$\Delta E = E_{\text{après}} - E_{\text{avant}}$$

$$\Delta E = (-3J + J) - (3J - J) = -4J$$

Pour un ferromagnétique ($J > 0$),
on a $\Delta E < 0$.

On inverse le spin !

Application au modèle d'Ising

Algorithme de Metropolis

Initialiser la configuration initiale des spins.
Choisir la température T .

1. Choisir un spin S_i aléatoirement ;
2. Déterminer s'il y a inversion du spin :
 - a. Calculer $\Delta E = E_{\text{après}} - E_{\text{avant}}$;
 - b. Si $\Delta E \leq 0$, l'inversion a lieu ;
 - c. Si $\Delta E > 0$, l'inversion a lieu avec une probabilité $\Gamma = e^{-\frac{\Delta E}{k_B T}}$.
3. Reprendre à l'étape 1 jusqu'à convergence des propriétés statistiques du système.

Avant

↑	↓	↑	↓
↓	↓	↓	↓
↑	↑	↑	↓
↓	↑	↓	↑

Après

↑	↓	↑	↓
↓	↓	↓	↓
↑	↓	↑	↓
↓	↑	↓	↑

$$E_{ij} = -JS_i S_j$$

$$\Delta E = E_{\text{après}} - E_{\text{avant}}$$

$$\Delta E = (3J - J) - (-3J + J) = 4J$$

Pour un ferromagnétique ($J > 0$),
on a $\Delta E > 0$.

On inverse le spin avec
une probabilité

$$\Gamma = e^{-\frac{4J}{k_B T}}$$

Après un grand nombre d'itérations, on peut générer des échantillons de configurations de spins à partir desquelles on peut calculer l'aimantation moyenne, par exemple.

Application au modèle d'Ising

Avant

↑	↓	↑	↓	↑
↓	↓	↓	↑	↓
↑	↑	↑	↓	↑
↓	↑	↓	↑	

Après

↑	↓	↑	↓	↑
↓	↓	↓	↓	↓
↑	↑	↑	↓	↑
↓	↑	↓	↑	

Comment calculer la différence d'énergie pour l'inversion d'un spin à la frontière du domaine ?

$$\Delta E = E_{\text{après}} - E_{\text{avant}}$$

Il faut imposer une condition périodique. Typiquement, on joint les faces opposées du domaine (topologie d'un tore).

$$\Delta E = (-4J) - (4J) = -8J$$

Pour un ferromagnétique, $\Delta E < 0$ et on inverse le spin.

Même si l'on impose des conditions périodiques aux frontières du domaine, il est important de choisir un réseau suffisamment grand pour ne pas observer d'effets indésirables liés à cette périodicité qui n'est pas physique.

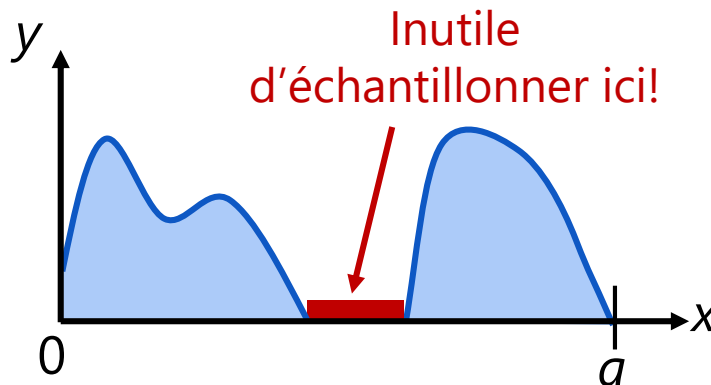
Méthode de Metropolis – En résumé

La méthode de Metropolis sert à :

- Générer des échantillons suivant une distribution probabiliste désirée. En physique, il s'agit souvent de la distribution de Boltzmann qui décrit des systèmes à l'équilibre.

La méthode de Metropolis permet d'améliorer l'efficacité de la méthode de Monte-Carlo « naïve » pour l'estimation d'une intégrale, surtout en dimension supérieure à 1 :

- Au lieu d'échantillonner les points naïvement suivant une loi uniforme sur le domaine d'intégration, on applique la méthode de Metropolis pour générer un ensemble de points dont la distribution $p(x)$ est similaire à la fonction à intégrer. Cela évite d'échantillonner sur des régions où la fonction est presque nulle.



$$\begin{aligned}\int_0^a f(x) dx &= \int_0^a \frac{f(x)}{p(x)} p(x) dx \\ &\approx \frac{1}{N_{\text{tot}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{tot}}} \frac{f(x_i)}{p(x_i)}\end{aligned}$$

Plan du cours

- Méthodes Monte-Carlo pour l'intégration
- Algorithme de Metropolis
 - Distribution d'équilibre d'un système physique
 - Modèle d'Ising en deux dimensions
- **Méthodes Monte-Carlo dans ce cours**

Systèmes dynamiques



La méthode de Metropolis **ne permet pas l'étude de systèmes dynamiques qui évoluent dans le temps.**

Ex. : croissance, diffusion, adsorption aux surfaces, etc.

Méthodes Monte-Carlo dynamiques

Elles permettent de **suivre l'évolution temporelle** d'un système dont les taux de transition entre les états sont connus ou modélisés par une théorie.

Une subtilité importante consiste à **déterminer le temps écoulé correspondant à une transition du système.**

Exemple – Démagnétisation d'un disque dur

L'orientation des spins des domaines magnétiques d'un disque dur servent à emmagasiner des bits d'information. Avec le temps, ces domaines peuvent se démagnétiser, entraînant une perte d'information.

Après combien de temps commence-t-on à observer des données corrompues ?

Méthode de Monte-Carlo cinétique

Algorithme Monte-Carlo cinétique

Initialiser la configuration initiale du système à $t = 0$.

1. Calculer les taux de transition Γ_{ij} de l'état actuel i vers chaque état possible j ;
2. Générer un nombre aléatoire entre 0 et le taux de transition total $\Gamma_i = \sum_j \Gamma_{ij}$ afin de déterminer la transition qui aura lieu ;
3. Mettre à jour le système dans son nouvel état ;
4. Déterminer le temps Δt pris par la transition :
 - a. Générer un nombre aléatoire x suivant une loi uniforme sur $[0,1]$;
 - b. Calculer l'intervalle de temps $\Delta t = \frac{1}{\Gamma_i} \ln \left(\frac{1}{x} \right)$.
5. Mettre à jour le temps de simulation : $t := t + \Delta t$.
6. Reprendre à l'étape 1 jusqu'à l'atteinte d'un nombre d'itérations ou d'un temps de simulation maximal.

