PHS3903 – Projet de simulation

Mini-devoir 5 – Hiver 2024

À remettre le vendredi 23 février avant 17h.

Directives

Répondre aux questions suivantes à l'aide du code Python fourni sur Moodle, auquel vous aurez apporté les modifications nécessaires. Justifier vos réponses avec clarté et concision. Vos tableaux et figures doivent être lisibles et présentés selon les règles de l'art.

Remettre un fichier .pdf avec vos réponses et un fichier .py contenant votre code dans la boîte de dépôt sur Moodle.

Calcul du volume d'une N-sphère (20 points)

Une N-sphère de rayon R est définie comme l'ensemble des points situés à une distance inférieure ou égale à R de l'origine dans un espace à N dimensions. Si on utilise les coordonnées cartésiennes $(x_1, x_2, \dots, x_N)$ pour décrire un point, alors ce point est situé à l'intérieur de la N-sphère si le critère suivant est respecté :

$$\sum_{i=1}^{N} x_i^2 \leq R^2, \qquad N = 1, 2, \dots \tag{1}$$

Voici quelques exemples de N-sphères afin de clarifier ce concept :

- Une 3-sphère est la sphère habituelle en trois dimensions. Son volume est la boule dont la sphère est le contour.
- Une 2-sphère est un cercle. Son volume est l'aire du disque circonscrit par le cercle.
- Une 1-sphère est formée de deux points sur une droite qui sont situés à égale distance de l'origine. Son volume est défini come la longueur du segment.

Ce concept peut sembler abstrait, mais il apparaît naturellement en physique statistique quand on travaille dans l'espace de phase pour étudier les propriétés d'un ensemble de N particules avec une énergie fixe (ex. : gaz idéal dans une boîte fermée).

Dans ce mini-devoir, on vous demande de calculer le volume d'une N-sphère de rayon unitaire $R = 1$ à l'aide de la méthode de Monte-Carlo vue en classe pour le calcul d'intégrales. Le résultat est déjà connu, à savoir :

$$V_N = \frac{\pi^{N/2}}{\Gamma\left(\frac{N}{2} + 1\right)}, \tag{2}$$

où $\Gamma(x)$ est la fonction gamma, ce qui vous permettra de calculer l'erreur afin d'analyser le comportement de l'algorithme.

1 – Choix de la méthode de Monte-Carlo

(a) **[4 pts]** Expliquer pourquoi les méthodes de Monte Carlo pour l'intégration sont avantageuses pour le calcul d'intégrales à N dimensions lorsque N devient grand.

2 - Calcul du volume

(b) **[6 pts]** Calculer le volume d'une N-sphère de rayon unitaire pour $N = \{3, 6\}$. Pour chacune de ces N-sphères, calculer le résultat en faisant varier le nombre de points générés à chaque essai en utilisant les valeurs $N_{tot} = \{100, 200, 400, 800, 1600\}$. Générer 100 essais par simulation et utiliser la valeur moyenne du volume comme résultat. On vous demande donc de calculer dix valeurs de volume (cinq par N-sphère).

Présenter vos résultats sous forme de tableau, en fournissant une incertitude relative sur chaque résultat. Expliquer comment cette incertitude a été calculée.

3 – Analyse de l'erreur

(c) **[4 pts]** À l'aide des résultats précédents obtenus, tracer un graphique de l'erreur relative E sur le volume calculé en fonction de N_{tot} pour chaque N-sphère. (Vous tracerez donc deux séries de données sur le même graphique.) Utiliser une échelle qui permet de représenter facilement le comportement de l'erreur.

(d) **[2 pts]** Déterminer le comportement de l'erreur relative en calculant l'exposant p tel que :

$$E = O(N_{tot}^p) \tag{3}$$

pour chacune des deux N-sphères.

(e) **[4 pts]** Discuter des points suivants :

- Comment les valeurs de p calculées se comparent-t-elle aux valeurs théoriques attendues ?
- La précision des résultats obtenus est-elle la même pour la 3-sphère et pour la 6-sphère ?
- Comment l'incertitude relative calculée en (b) se compare-t-elle à l'erreur relative ?