

Amélioration de l'échantillonnage en QMC

A. Scemama T. Lelièvre E. Cancès

École Nationale des Ponts et Chaussées

9 Février 2006 / Réunion MicMac

Amélioration de l'échantillonnage en QMC

- 1 Diffusion Monte Carlo (DMC)
 - Présentation de la méthode
 - Algorithme de M. Rousset
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 2 Monte Carlo Variationnel (VMC)
 - Présentation de la méthode
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 3 Résumé et Perspectives

Amélioration de l'échantillonnage en QMC

- 1 Diffusion Monte Carlo (DMC)
 - Présentation de la méthode
 - Algorithme de M. Rousset
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 2 Monte Carlo Variationnel (VMC)
 - Présentation de la méthode
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 3 Résumé et Perspectives

Principe

- Équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$\begin{cases} i \frac{\partial \phi(\mathbf{R}, t)}{\partial t} = \mathcal{H} \phi(\mathbf{R}, t) = -\frac{1}{2} \Delta \phi(\mathbf{R}, t) + V(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{R}, t) \\ \phi(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R}) \end{cases}$$

- En substituant it par τ , équation de Schrödinger en temps imaginaire :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = -\mathcal{H} \phi(\mathbf{R}, \tau) = \frac{1}{2} \Delta \phi(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{R}, \tau) \\ \phi(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R}) \end{cases}$$

Principe

- Équation de Schrödinger dépendant du temps :

$$\begin{cases} i \frac{\partial \phi(\mathbf{R}, t)}{\partial t} = \mathcal{H} \phi(\mathbf{R}, t) = -\frac{1}{2} \Delta \phi(\mathbf{R}, t) + V(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{R}, t) \\ \phi(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R}) \end{cases}$$

- En substituant it par τ , équation de Schrödinger en temps imaginaire :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = -\mathcal{H} \phi(\mathbf{R}, \tau) = \frac{1}{2} \Delta \phi(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{R}, \tau) \\ \phi(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R}) \end{cases}$$

Principe

- Si le spectre de \mathcal{H} est discret,

$$\phi(\mathbf{R}, \tau) = e^{-\tau\mathcal{H}}\psi_T(\mathbf{R}) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \Phi_j(\mathbf{R}) e^{-\tau E_j}$$

où $\Phi_j(\mathbf{R})$ et E_j sont les fonctions propres et valeurs propres de \mathcal{H}

- Lorsque $\tau \rightarrow +\infty$, $\phi(\mathbf{R}, \tau) \rightarrow \Phi_0(\mathbf{R})$
- Simulation de l'équation de diffusion :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \Delta \phi(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{R}, \tau) \\ \phi(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R}) \end{cases}$$

Principe

- Si le spectre de \mathcal{H} est discret,

$$\phi(\mathbf{R}, \tau) = e^{-\tau\mathcal{H}}\psi_T(\mathbf{R}) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \Phi_j(\mathbf{R}) e^{-\tau E_j}$$

où $\Phi_j(\mathbf{R})$ et E_j sont les fonctions propres et valeurs propres de \mathcal{H}

- Lorsque $\tau \rightarrow +\infty$, $\phi(\mathbf{R}, \tau) \rightarrow \Phi_0(\mathbf{R})$
- Simulation de l'équation de diffusion :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \Delta \phi(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{R}, \tau) \\ \phi(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R}) \end{cases}$$

Principe

- Si le spectre de \mathcal{H} est discret,

$$\phi(\mathbf{R}, \tau) = e^{-\tau\mathcal{H}}\psi_T(\mathbf{R}) = \sum_{j=0}^{\infty} C_j \Phi_j(\mathbf{R}) e^{-\tau E_j}$$

où $\Phi_j(\mathbf{R})$ et E_j sont les fonctions propres et valeurs propres de \mathcal{H}

- Lorsque $\tau \rightarrow +\infty$, $\phi(\mathbf{R}, \tau) \rightarrow \Phi_0(\mathbf{R})$
- Simulation de l'équation de diffusion :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \Delta \phi(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R}) \phi(\mathbf{R}, \tau) \\ \phi(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R}) \end{cases}$$

Simulation

- Opérateur d'évolution en temps imaginaire : $e^{-\delta\tau\mathcal{H}}$

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{R}, \tau + \delta\tau) &= \int \langle \mathbf{R} | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R}' \rangle \phi(\mathbf{R}', \tau) d\mathbf{R}' \\ &= \int G(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \delta\tau) \phi(\mathbf{R}', \tau) d\mathbf{R}'\end{aligned}$$

où $G(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \delta\tau)$: Fonction de Green \rightarrow Probabilité de transition

- $\tau = M\delta\tau$

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{R}, \tau) &= e^{-\tau\mathcal{H}}\psi_T(\mathbf{R}) \\ &= \int d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_M \\ &\psi_T(\mathbf{R}_0) \langle \mathbf{R}_0 | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R}_1 \rangle \langle \mathbf{R}_1 | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R}_2 \rangle \dots \langle \mathbf{R}_M | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R} \rangle\end{aligned}$$

Simulation

- Opérateur d'évolution en temps imaginaire : $e^{-\delta\tau\mathcal{H}}$

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{R}, \tau + \delta\tau) &= \int \langle \mathbf{R} | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R}' \rangle \phi(\mathbf{R}', \tau) d\mathbf{R}' \\ &= \int G(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \delta\tau) \phi(\mathbf{R}', \tau) d\mathbf{R}'\end{aligned}$$

où $G(\mathbf{R}, \mathbf{R}'; \delta\tau)$: Fonction de Green \rightarrow Probabilité de transition

- $\tau = M\delta\tau$

$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{R}, \tau) &= e^{-\tau\mathcal{H}}\psi_T(\mathbf{R}) \\ &= \int d\mathbf{R}_0 \int d\mathbf{R}_1 \dots \int d\mathbf{R}_M \\ &\psi_T(\mathbf{R}_0) \langle \mathbf{R}_0 | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R}_1 \rangle \langle \mathbf{R}_1 | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R}_2 \rangle \dots \langle \mathbf{R}_M | e^{-\delta\tau\mathcal{H}} | \mathbf{R} \rangle\end{aligned}$$

Simulation

- Formule de Trotter :

$$e^{-\delta\tau\mathcal{H}} = e^{-\delta\tau(-\frac{1}{2}\Delta+V)} \simeq e^{\delta\tau\frac{1}{2}\Delta}e^{-\delta\tau V}$$

Diffusion

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{R},\tau)}{\partial\tau} = \frac{1}{2}\Delta\phi(\mathbf{R},\tau)$$

$$\phi(\mathbf{R},\tau) \propto e^{-\frac{|\mathbf{R}(\tau)-\mathbf{R}(\tau-\delta\tau)|^2}{2\delta\tau}}$$

Mort/Naissance

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{R},\tau)}{\partial\tau} = V[\mathbf{R}(\tau)]\phi(\mathbf{R},\tau)$$

$$\phi(\mathbf{R},\tau) = e^{-\int_0^\tau V[\mathbf{R}(s)]ds}$$

Simulation

- Formule de Trotter :

$$e^{-\delta\tau\mathcal{H}} = e^{-\delta\tau(-\frac{1}{2}\Delta+V)} \simeq e^{\delta\tau\frac{1}{2}\Delta}e^{-\delta\tau V}$$

Diffusion

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{R},\tau)}{\partial\tau} = \frac{1}{2}\Delta\phi(\mathbf{R},\tau)$$

$$\phi(\mathbf{R},\tau) \propto e^{-\frac{|\mathbf{R}(\tau)-\mathbf{R}(\tau-\delta\tau)|^2}{2\delta\tau}}$$

Mort/Naissance

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{R},\tau)}{\partial\tau} = V[\mathbf{R}(\tau)]\phi(\mathbf{R},\tau)$$

$$\phi(\mathbf{R},\tau) = e^{-\int_0^\tau V[\mathbf{R}(s)]ds}$$

Simulation

- Formule de Trotter :

$$e^{-\delta\tau\mathcal{H}} = e^{-\delta\tau(-\frac{1}{2}\Delta+V)} \simeq e^{\delta\tau\frac{1}{2}\Delta}e^{-\delta\tau V}$$

Diffusion

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{R},\tau)}{\partial\tau} = \frac{1}{2}\Delta\phi(\mathbf{R},\tau)$$

$$\phi(\mathbf{R},\tau) \propto e^{-\frac{|\mathbf{R}(\tau)-\mathbf{R}(\tau-\delta\tau)|^2}{2\delta\tau}}$$

Mort/Naissance

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{R},\tau)}{\partial\tau} = V[\mathbf{R}(\tau)]\phi(\mathbf{R},\tau)$$

$$\phi(\mathbf{R},\tau) = e^{-\int_0^\tau V[\mathbf{R}(s)]ds}$$

Échantillonnage selon l'importance

- On écrit l'équation de Schrödinger en pour $f = \psi_T \phi$:

$$\begin{cases} \frac{\partial f(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \Delta f(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R})f(\mathbf{R}, \tau) \\ f(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R})^2 \end{cases}$$

- On peut montrer que

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} &= \frac{1}{2} \Delta f(\mathbf{R}, \tau) - \nabla \cdot \left(f(\mathbf{R}, \tau) \frac{\nabla \psi_T}{\psi_T} \right) \\ &\quad + (E_T - E_L(\mathbf{R}))f(\mathbf{R}, \tau) \end{aligned}$$

- Schéma d'Euler

$$\mathbf{R}(\tau + \delta\tau) = \mathbf{R}(\tau) + \frac{\nabla \psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})} \delta\tau + \eta \sqrt{\delta\tau}$$

Échantillonnage selon l'importance

- On écrit l'équation de Schrödinger en pour $f = \psi_T \phi$:

$$\begin{cases} \frac{\partial f(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \Delta f(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R})f(\mathbf{R}, \tau) \\ f(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R})^2 \end{cases}$$

- On peut montrer que

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} &= \frac{1}{2} \Delta f(\mathbf{R}, \tau) - \nabla \cdot \left(f(\mathbf{R}, \tau) \frac{\nabla \psi_T}{\psi_T} \right) \\ &\quad + (E_T - E_L(\mathbf{R}))f(\mathbf{R}, \tau) \end{aligned}$$

- Schéma d'Euler

$$\mathbf{R}(\tau + \delta\tau) = \mathbf{R}(\tau) + \frac{\nabla \psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})} \delta\tau + \eta \sqrt{\delta\tau}$$

Échantillonnage selon l'importance

- On écrit l'équation de Schrödinger en pour $f = \psi_T \phi$:

$$\begin{cases} \frac{\partial f(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \Delta f(\mathbf{R}, \tau) - V(\mathbf{R})f(\mathbf{R}, \tau) \\ f(\mathbf{R}, 0) = \psi_T(\mathbf{R})^2 \end{cases}$$

- On peut montrer que

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(\mathbf{R}, \tau)}{\partial \tau} &= \frac{1}{2} \Delta f(\mathbf{R}, \tau) - \nabla \cdot \left(f(\mathbf{R}, \tau) \frac{\nabla \psi_T}{\psi_T} \right) \\ &\quad + (E_T - E_L(\mathbf{R}))f(\mathbf{R}, \tau) \end{aligned}$$

- Schéma d'Euler

$$\mathbf{R}(\tau + \delta\tau) = \mathbf{R}(\tau) + \frac{\nabla \psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})} \delta\tau + \eta \sqrt{\delta\tau}$$

Calcul de l'énergie

- Pour chaque \mathbf{R} on calcule l'énergie locale

$$E_L(\mathbf{R}) = \frac{\mathcal{H}\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})}$$

- L'énergie est calculée comme

$$E(\tau) = \frac{\int \psi_T[\mathbf{R}(\tau)]^2 E_L[\mathbf{R}(\tau)] e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau} d\tau}{\int \psi_T[\mathbf{R}(\tau)]^2 e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau} d\tau}$$

Calcul de l'énergie

- Pour chaque \mathbf{R} on calcule l'énergie locale

$$E_L(\mathbf{R}) = \frac{\mathcal{H}\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})}$$

- L'énergie est calculée comme

$$E(\tau) = \frac{\int \psi_T[\mathbf{R}(\tau)]^2 E_L[\mathbf{R}(\tau)] e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau} d\tau}{\int \psi_T[\mathbf{R}(\tau)]^2 e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau} d\tau}$$

Amélioration de l'échantillonnage en QMC

- 1 Diffusion Monte Carlo (DMC)
 - Présentation de la méthode
 - Algorithme de M. Rousset
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 2 Monte Carlo Variationnel (VMC)
 - Présentation de la méthode
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 3 Résumé et Perspectives

Présentation

- On dispose de M marcheurs
- Les marcheurs se déplacent selon un processus de diffusion (importance)
- Chaque marcheur k possède deux horloges :
 - Mort
 - Naissance
- Naissance du marcheur k : Lorsque l'horloge de naissance de k atteint 0, remplacement d'un autre marcheur tiré au hasard par une copie du marcheur k
- Mort du marcheur k : Lorsque l'horloge de mort de k atteint 0, copie d'un autre marcheur tiré au hasard pour remplacer le marcheur k

Présentation

- On dispose de M marcheurs
- Les marcheurs se déplacent selon un processus de diffusion (importance)
- Chaque marcheur k possède deux horloges :
 - Mort
 - Naissance
- Naissance du marcheur k : Lorsque l'horloge de naissance de k atteint 0, remplacement d'un autre marcheur tiré au hasard par une copie du marcheur k
- Mort du marcheur k : Lorsque l'horloge de mort de k atteint 0, copie d'un autre marcheur tiré au hasard pour remplacer le marcheur k

Présentation

- On dispose de M marcheurs
- Les marcheurs se déplacent selon un processus de diffusion (importance)
- Chaque marcheur k possède deux horloges :
 - Mort
 - Naissance
- Naissance du marcheur k : Lorsque l'horloge de naissance de k atteint 0, remplacement d'un autre marcheur tiré au hasard par une copie du marcheur k
- Mort du marcheur k : Lorsque l'horloge de mort de k atteint 0, copie d'un autre marcheur tiré au hasard pour remplacer le marcheur k

Présentation

- On dispose de M marcheurs
- Les marcheurs se déplacent selon un processus de diffusion (importance)
- Chaque marcheur k possède deux horloges :
 - Mort
 - Naissance
- Naissance du marcheur k : Lorsque l'horloge de naissance de k atteint 0, remplacement d'un autre marcheur tiré au hasard par une copie du marcheur k
- Mort du marcheur k : Lorsque l'horloge de mort de k atteint 0, copie d'un autre marcheur tiré au hasard pour remplacer le marcheur k

Présentation

- On dispose de M marcheurs
- Les marcheurs se déplacent selon un processus de diffusion (importance)
- Chaque marcheur k possède deux horloges :
 - Mort
 - Naissance
- Naissance du marcheur k : Lorsque l'horloge de naissance de k atteint 0, remplacement d'un autre marcheur tiré au hasard par une copie du marcheur k
- Mort du marcheur k : Lorsque l'horloge de mort de k atteint 0, copie d'un autre marcheur tiré au hasard pour remplacer le marcheur k

Présentation

- On dispose de M marcheurs
- Les marcheurs se déplacent selon un processus de diffusion (importance)
- Chaque marcheur k possède deux horloges :
 - Mort
 - Naissance
- Naissance du marcheur k : Lorsque l'horloge de naissance de k atteint 0, remplacement d'un autre marcheur tiré au hasard par une copie du marcheur k
- Mort du marcheur k : Lorsque l'horloge de mort de k atteint 0, copie d'un autre marcheur tiré au hasard pour remplacer le marcheur k

Présentation

- On dispose de M marcheurs
- Les marcheurs se déplacent selon un processus de diffusion (importance)
- Chaque marcheur k possède deux horloges :
 - Mort
 - Naissance
- Naissance du marcheur k : Lorsque l'horloge de naissance de k atteint 0, remplacement d'un autre marcheur tiré au hasard par une copie du marcheur k
- Mort du marcheur k : Lorsque l'horloge de mort de k atteint 0, copie d'un autre marcheur tiré au hasard pour remplacer le marcheur k

Calcul des horloges

À chaque pas :

- Calcul de l'énergie moyenne au temps τ :

$$\langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau} = \frac{1}{\tau} \sum_{t=1}^{\tau} \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M E_L[\mathbf{R}_k(t)]$$

- Horloge de mort :

$$t_{d,k}(\tau + \delta\tau) = t_{d,k}(\tau) - \delta\tau \max(0, (E_L[\mathbf{R}_k(\tau)] - \langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau}))$$

- Horloge de naissance :

$$t_{b,k}(\tau + \delta\tau) = t_{d,k}(\tau) - \delta\tau \max(0, (\langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau} - E_L(\mathbf{R}_k, \tau)))$$

Calcul des horloges

À chaque pas :

- Calcul de l'énergie moyenne au temps τ :

$$\langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau} = \frac{1}{\tau} \sum_{t=1}^{\tau} \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M E_L[\mathbf{R}_k(t)]$$

- Horloge de mort :

$$t_{d,k}(\tau + \delta\tau) = t_{d,k}(\tau) - \delta\tau \max(0, (E_L[\mathbf{R}_k(\tau)] - \langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau}))$$

- Horloge de naissance :

$$t_{b,k}(\tau + \delta\tau) = t_{d,k}(\tau) - \delta\tau \max(0, (\langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau} - E_L(\mathbf{R}_k, \tau)))$$

Calcul des horloges

À chaque pas :

- Calcul de l'énergie moyenne au temps τ :

$$\langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau} = \frac{1}{\tau} \sum_{t=1}^{\tau} \frac{1}{M} \sum_{k=1}^M E_L[\mathbf{R}_k(t)]$$

- Horloge de mort :

$$t_{d,k}(\tau + \delta\tau) = t_{d,k}(\tau) - \delta\tau \max(0, (E_L[\mathbf{R}_k(\tau)] - \langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau}))$$

- Horloge de naissance :

$$t_{b,k}(\tau + \delta\tau) = t_{d,k}(\tau) - \delta\tau \max(0, (\langle E_{\text{DMC}} \rangle_{\tau} - E_L(\mathbf{R}_k, \tau)))$$

Amélioration de l'échantillonnage en QMC

- 1 Diffusion Monte Carlo (DMC)
 - Présentation de la méthode
 - Algorithme de M. Rousset
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 2 Monte Carlo Variationnel (VMC)
 - Présentation de la méthode
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 3 Résumé et Perspectives

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Techniques habituelles face aux problèmes

- Problème pratique : Nœuds de ψ_T ($\psi_T(\mathbf{R}) = 0$)
 - $E_L = \mathcal{H}\psi_T/\psi_T$ diverge
 - $\nabla\psi_T/\psi_T$ diverge aussi
- Conséquences
 - Le pas de temps doit être petit pour éviter d'atteindre un nœud
 - Près des nœuds, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et le schéma d'Euler est une mauvaise approximation.
- Solution usuelle : Algorithme de Metropolis pour échantillonner ψ_T^2 (proche de Φ_0^2)
 - À la limite $\delta\tau \rightarrow 0$, tous les pas sont acceptés
 - Les pas qui amènent aux nœuds sont rejetés et la simulation devient possible

Conséquences de l'algorithme de Metropolis

- Ne préserve pas les trajectoires \implies mauvaise estimation des poids $e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau}$
- Lorsqu'un marcheur se trouve près d'un nœud, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et les pas proposés sont souvent rejetés \implies le marcheur est "piégé"
- Près d'un nœud, si $E_L(\mathbf{R})$ diverge vers $-\infty$, le poids du marcheur va augmenter. S'il est piégé son poids ne va pas cesser d'augmenter \implies echec de la simulation
- Solution \implies utiliser des pas de temps très petits

Conséquences de l'algorithme de Metropolis

- Ne préserve pas les trajectoires \implies mauvaise estimation des poids $e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau}$
- Lorsqu'un marcheur se trouve près d'un nœud, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et les pas proposés sont souvent rejetés \implies le marcheur est "piégé"
- Près d'un nœud, si $E_L(\mathbf{R})$ diverge vers $-\infty$, le poids du marcheur va augmenter. S'il est piégé son poids ne va pas cesser d'augmenter \implies echec de la simulation
- Solution \implies utiliser des pas de temps très petits

Conséquences de l'algorithme de Metropolis

- Ne préserve pas les trajectoires \implies mauvaise estimation des poids $e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau}$
- Lorsqu'un marcheur se trouve près d'un nœud, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et les pas proposés sont souvent rejetés \implies le marcheur est "piégé"
- Près d'un nœud, si $E_L(\mathbf{R})$ diverge vers $-\infty$, le poids du marcheur va augmenter. S'il est piégé son poids ne va pas cesser d'augmenter \implies echec de la simulation
- Solution \implies utiliser des pas de temps très petits

Conséquences de l'algorithme de Metropolis

- Ne préserve pas les trajectoires \implies mauvaise estimation des poids $e^{-\int_0^\tau (E_L[\mathbf{R}(\tau)] - E_T) d\tau}$
- Lorsqu'un marcheur se trouve près d'un nœud, $\nabla\psi_T/\psi_T$ est très grand et les pas proposés sont souvent rejetés \implies le marcheur est "piégé"
- Près d'un nœud, si $E_L(\mathbf{R})$ diverge vers $-\infty$, le poids du marcheur va augmenter. S'il est piégé son poids ne va pas cesser d'augmenter \implies echec de la simulation
- Solution \implies utiliser des pas de temps très petits

Notre approche

- Éviter l'utilisation de l'algorithme de Metropolis
- Proposer d'autres schémas que le schéma d'Euler pour obtenir de meilleures trajectoires
- Utiliser un pas de temps adaptatif pour améliorer l'intégration

Notre approche

- Éviter l'utilisation de l'algorithme de Metropolis
- Proposer d'autres schémas que le schéma d'Euler pour obtenir de meilleures trajectoires
- Utiliser un pas de temps adaptatif pour améliorer l'intégration

Notre approche

- Éviter l'utilisation de l'algorithme de Metropolis
- Proposer d'autres schémas que le schéma d'Euler pour obtenir de meilleures trajectoires
- Utiliser un pas de temps adaptatif pour améliorer l'intégration

Première amélioration

Pas de temps adaptatif

- Schéma d'Euler à pas de temps constant : $B(\mathbf{R}) = \frac{\nabla\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})}$

$$\mathbf{R}_k^{n+1} = \mathbf{R}_k^n + B(\mathbf{R}_k^n)\delta\tau + \sqrt{\delta\tau}\eta_k$$

- Schéma d'Euler à pas de temps variable : On remplace $\delta\tau$ par $\frac{\delta\tau}{\|B(\mathbf{R}_k^n)\|}$
- Réduit considérablement les chances d'atteindre un nœud

Première amélioration

Pas de temps adaptatif

- Schéma d'Euler à pas de temps constant : $B(\mathbf{R}) = \frac{\nabla\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})}$

$$\mathbf{R}_k^{n+1} = \mathbf{R}_k^n + B(\mathbf{R}_k^n)\delta\tau + \sqrt{\delta\tau}\eta_k$$

- Schéma d'Euler à pas de temps variable : On remplace $\delta\tau$ par $\frac{\delta\tau}{\|B(\mathbf{R}_k^n)\|}$
- Réduit considérablement les chances d'atteindre un nœud

Première amélioration

Pas de temps adaptatif

- Schéma d'Euler à pas de temps constant : $B(\mathbf{R}) = \frac{\nabla\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})}$

$$\mathbf{R}_k^{n+1} = \mathbf{R}_k^n + B(\mathbf{R}_k^n)\delta\tau + \sqrt{\delta\tau}\eta_k$$

- Schéma d'Euler à pas de temps variable : On remplace $\delta\tau$ par $\frac{\delta\tau}{\|B(\mathbf{R}_k^n)\|}$
- Réduit considérablement les chances d'atteindre un nœud

Première amélioration

Exemples

Application au Lithium et à l'Oxygène

	Énergie DMC	
	Lithium	Oxygène
$\langle \delta\tau \rangle$	0.02	0.001
Euler	-7.4772(3)*	-75.060(22)*
Euler + Metropolis	-7.4816(2)	-75.078(9)
Euler $\delta\tau$ adaptatif	-7.4770(2)	-75.070(8)
Énergie de référence	-7.4781(1)	-75.0673(1)

Deuxième amélioration

Raffinement du pas de temps

- On raffine le pas de temps avec une probabilité

$$P(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 1 - \min \left(1, \frac{G(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n, \delta\tau)}{G(\mathbf{R}^n, \mathbf{R}^{n+1}, \delta\tau)} F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) \right)$$

- Tant que le pas ne convient pas, on le divise en deux :

$$\mathbf{R}_k^{n+1/2} = \mathbf{R}_k^n + B(\mathbf{R}_k^n) \frac{\delta\tau}{2} + \frac{\eta + \eta'}{2} \sqrt{\delta\tau}$$

$$\mathbf{R}_k^{n+1} = \mathbf{R}_k^{n+1/2} + B(\mathbf{R}_k^{n+1/2}) \frac{\delta\tau}{2} + \frac{\eta - \eta'}{2} \sqrt{\delta\tau}$$

Deuxième amélioration

Raffinement du pas de temps

- On raffine le pas de temps avec une probabilité

$$P(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 1 - \min \left(1, \frac{G(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n, \delta\tau)}{G(\mathbf{R}^n, \mathbf{R}^{n+1}, \delta\tau)} F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) \right)$$

- Tant que le pas ne convient pas, on le divise en deux :

$$\mathbf{R}_k^{n+1/2} = \mathbf{R}_k^n + B(\mathbf{R}_k^n) \frac{\delta\tau}{2} + \frac{\eta + \eta'}{2} \sqrt{\delta\tau}$$

$$\mathbf{R}_k^{n+1} = \mathbf{R}_k^{n+1/2} + B(\mathbf{R}_k^{n+1/2}) \frac{\delta\tau}{2} + \frac{\eta - \eta'}{2} \sqrt{\delta\tau}$$

Deuxième amélioration

Raffinement du pas de temps

On choisit :

- Critère de Metropolis (sur la densité)

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \frac{\psi_T^2(\mathbf{R}^{n+1})}{\psi_T^2(\mathbf{R}^n)}$$

- Critère sur la fonction d'importance

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \left[\max \left(1 + \frac{\psi_T(\mathbf{R}^{n+1}) - \psi_T(\mathbf{R}^n)}{\frac{1}{2}(\psi_T(\mathbf{R}^n) + \psi_T(\mathbf{R}^{n+1}))}, 0 \right) \right]^2$$

- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \geq |\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 1$.
- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \leq \frac{1}{2}|\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.
- Si $\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})/\psi_T(\mathbf{R}^n) < 0$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.

Deuxième amélioration

Raffinement du pas de temps

On choisit :

- Critère de Metropolis (sur la densité)

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \frac{\psi_T^2(\mathbf{R}^{n+1})}{\psi_T^2(\mathbf{R}^n)}$$

- Critère sur la fonction d'importance

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \left[\max \left(1 + \frac{\psi_T(\mathbf{R}^{n+1}) - \psi_T(\mathbf{R}^n)}{\frac{1}{2}(\psi_T(\mathbf{R}^n) + \psi_T(\mathbf{R}^{n+1}))}, 0 \right) \right]^2$$

- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \geq |\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 1$.
- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \leq \frac{1}{2}|\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.
- Si $\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})/\psi_T(\mathbf{R}^n) < 0$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.

Deuxième amélioration

Raffinement du pas de temps

On choisit :

- Critère de Metropolis (sur la densité)

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \frac{\psi_T^2(\mathbf{R}^{n+1})}{\psi_T^2(\mathbf{R}^n)}$$

- Critère sur la fonction d'importance

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \left[\max \left(1 + \frac{\psi_T(\mathbf{R}^{n+1}) - \psi_T(\mathbf{R}^n)}{\frac{1}{2}(\psi_T(\mathbf{R}^n) + \psi_T(\mathbf{R}^{n+1}))}, 0 \right) \right]^2$$

- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \geq |\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 1$.
- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \leq \frac{1}{2}|\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.
- Si $\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})/\psi_T(\mathbf{R}^n) < 0$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.

Deuxième amélioration

Raffinement du pas de temps

On choisit :

- Critère de Metropolis (sur la densité)

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \frac{\psi_T^2(\mathbf{R}^{n+1})}{\psi_T^2(\mathbf{R}^n)}$$

- Critère sur la fonction d'importance

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \left[\max \left(1 + \frac{\psi_T(\mathbf{R}^{n+1}) - \psi_T(\mathbf{R}^n)}{\frac{1}{2}(\psi_T(\mathbf{R}^n) + \psi_T(\mathbf{R}^{n+1}))}, 0 \right) \right]^2$$

- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \geq |\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 1$.
- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \leq \frac{1}{2}|\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.
- Si $\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})/\psi_T(\mathbf{R}^n) < 0$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.

Deuxième amélioration

Raffinement du pas de temps

On choisit :

- Critère de Metropolis (sur la densité)

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \frac{\psi_T^2(\mathbf{R}^{n+1})}{\psi_T^2(\mathbf{R}^n)}$$

- Critère sur la fonction d'importance

$$F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = \left[\max \left(1 + \frac{\psi_T(\mathbf{R}^{n+1}) - \psi_T(\mathbf{R}^n)}{\frac{1}{2}(\psi_T(\mathbf{R}^n) + \psi_T(\mathbf{R}^{n+1}))}, 0 \right) \right]^2$$

- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \geq |\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 1$.
- Si $|\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})| \leq \frac{1}{2}|\psi_T(\mathbf{R}^n)|$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.
- Si $\psi_T(\mathbf{R}^{n+1})/\psi_T(\mathbf{R}^n) < 0$, $F(\mathbf{R}^{n+1}, \mathbf{R}^n) = 0$.

Deuxième amélioration

Quelques résultats

Atome d'oxygène : $E_{\text{ref}} = -75.0673(1)$

$\langle \delta\tau \rangle$	Metropolis	$\delta\tau$ adaptatif	$\delta\tau$ adaptatif corrigé avec le critère sur ψ_T
0.001	-75.079(10)	-75.070(8)	-75.064(8)
0.002	-75.098(7)	-75.057(7)	-75.047(6)
0.003	-75.464(18)	-75.067(9)	-75.059(5)
0.004	-78.434(36)	-75.047(5)	-75.060(4)
0.005	—	-75.033(6)	-75.058(6)
0.010	—	-74.94(18)	-75.037(3)

Troisième amélioration

Autres schémas qu'Euler

Schéma trapézoïdal :

$$\overline{\mathbf{R}}_k^{n+1} = \mathbf{R}_k^n + B(\mathbf{R}_k^n)\delta\tau + \eta\sqrt{\delta\tau}$$

$$\mathbf{R}_k^{n+1} = \mathbf{R}_k^n + \frac{1}{2}(B(\mathbf{R}_k^n) + B(\overline{\mathbf{R}}_k^{n+1}))\delta\tau + \eta\sqrt{\delta\tau}$$

Atome de Lithium : $E_{\text{ref}} = -7.4781(1)$

$\delta\tau$	Euler	Euler+Metro	Trapézoïdal	Trapéz. ψ_T^2
0.1	-7.4099(2)	-7.4985(3)	-7.4849(4)	-7.4899(4)
0.05	-7.4587(2)	-7.4852(3)	-7.4673(3)	-7.4757(2)
0.005	-7.4814(6)	-7.4782(6)	-7.4751(6)	-7.4752(7)
0.001	-7.4801(6)	-7.4791(5)	-7.4788(6)	-7.4771(9)
0.0005	-7.4789(8)	-7.4779(8)	-7.4777(9)	-7.4772(6)

Amélioration de l'échantillonnage en QMC

- 1 Diffusion Monte Carlo (DMC)
 - Présentation de la méthode
 - Algorithme de M. Rousset
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 2 Monte Carlo Variationnel (VMC)
 - Présentation de la méthode
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 3 Résumé et Perspectives

Principe

- On ne sait pas intégrer analytiquement ψ_T
- Échantillonnage de ψ_T^2 , et calcul d'observables O comme

$$\langle O \rangle_{\psi_T^2} = \frac{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 \frac{O\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})} d\mathbf{R}}{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 d\mathbf{R}}$$

- ψ_T^2 est obtenue en utilisant le schéma d'Euler
- pas d'acceptation/rejet de Metropolis pour éliminer l'erreur de discrétisation

Principe

- On ne sait pas intégrer analytiquement ψ_T
- Échantillonnage de ψ_T^2 , et calcul d'observables O comme

$$\langle O \rangle_{\psi_T^2} = \frac{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 \frac{O\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})} d\mathbf{R}}{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 d\mathbf{R}}$$

- ψ_T^2 est obtenue en utilisant le schéma d'Euler
- pas d'acceptation/rejet de Metropolis pour éliminer l'erreur de discrétisation

Principe

- On ne sait pas intégrer analytiquement ψ_T
- Échantillonnage de ψ_T^2 , et calcul d'observables O comme

$$\langle O \rangle_{\psi_T^2} = \frac{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 \frac{O\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})} d\mathbf{R}}{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 d\mathbf{R}}$$

- ψ_T^2 est obtenue en utilisant le schéma d'Euler
- pas d'acceptation/rejet de Metropolis pour éliminer l'erreur de discrétisation

Principe

- On ne sait pas intégrer analytiquement ψ_T
- Échantillonnage de ψ_T^2 , et calcul d'observables O comme

$$\langle O \rangle_{\psi_T^2} = \frac{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 \frac{O\psi_T(\mathbf{R})}{\psi_T(\mathbf{R})} d\mathbf{R}}{\int \psi_T(\mathbf{R})^2 d\mathbf{R}}$$

- ψ_T^2 est obtenue en utilisant le schéma d'Euler
- pas d'acceptation/rejet de Metropolis pour éliminer l'erreur de discrétisation

Limitations

- Les électrons de cœur limitent le pas de temps
- Plus la charge nucléaire est élevée, plus le pas de temps doit être petit (et plus on a d'électrons)
- Problème pour les métaux de transition et autres atomes moyennement lourds ($Z > 20$)
- Solution usuelle : pseudo-potentiels pour remplacer les électrons de cœur

Limitations

- Les électrons de cœur limitent le pas de temps
- Plus la charge nucléaire est élevée, plus le pas de temps doit être petit (et plus on a d'électrons)
- Problème pour les métaux de transition et autres atomes moyennement lourds ($Z > 20$)
- Solution usuelle : pseudo-potentiels pour remplacer les électrons de cœur

Limitations

- Les électrons de cœur limitent le pas de temps
- Plus la charge nucléaire est élevée, plus le pas de temps doit être petit (et plus on a d'électrons)
- Problème pour les métaux de transition et autres atomes moyennement lourds ($Z > 20$)
- Solution usuelle : pseudo-potentiels pour remplacer les électrons de cœur

Limitations

- Les électrons de cœur limitent le pas de temps
- Plus la charge nucléaire est élevée, plus le pas de temps doit être petit (et plus on a d'électrons)
- Problème pour les métaux de transition et autres atomes moyennement lourds ($Z > 20$)
- Solution usuelle : pseudo-potentiels pour remplacer les électrons de cœur

Amélioration de l'échantillonnage en QMC

- 1 Diffusion Monte Carlo (DMC)
 - Présentation de la méthode
 - Algorithme de M. Rousset
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 2 Monte Carlo Variationnel (VMC)
 - Présentation de la méthode
 - Amélioration de l'échantillonnage
- 3 Résumé et Perspectives

Notre approche

Remplacer le schéma d'Euler par un schéma de Langevin.

Atome de Lithium, $E_{VMC} = -7.4724(9)$

$\delta\tau$	Euler	BBK	Stoltz	Ricci
0.05	-7.375(31)*	-7.44(24)*	-7.44(13)*	-7.4576(7)
0.005	-7.4643(7)*	-7.469(1)	-7.472(1)	-7.470(2)
0.001	-7.4740(7)	-7.472(1)	-7.471(1)	-7.470(2)
0.0005	-7.4732(9)	-7.470(2)	-7.471(2)	-7.475(3)

Notre approche

Remplacer le schéma d'Euler par un schéma de Langevin.

Atome de Lithium, $E_{\text{VMC}} = -7.4724(9)$

$\delta\tau$	Euler	BBK	Stoltz	Ricci
0.05	-7.375(31)*	-7.44(24)*	-7.44(13)*	-7.4576(7)
0.005	-7.4643(7)*	-7.469(1)	-7.472(1)	-7.470(2)
0.001	-7.4740(7)	-7.472(1)	-7.471(1)	-7.470(2)
0.0005	-7.4732(9)	-7.470(2)	-7.471(2)	-7.475(3)

Électrons de cœur

- On augmente la friction près des cœurs :

$$\xi(\mathbf{r}) = 1 + \sum_{A=1}^{N_{\text{nucl}}} \sqrt{\frac{Z_A^3}{\pi}} e^{-2Z_A|\mathbf{r}-\mathbf{r}_A|}$$

- Les électrons de cœur sont soumis à une plus forte friction que les électrons de valence
- Le pas de temps peut donc être augmenté
- Si l'on utilise un pas d'acceptation/rejet de Metropolis, une plus grande part de pas proposés seront acceptés

Électrons de cœur

- On augmente la friction près des cœurs :

$$\xi(\mathbf{r}) = 1 + \sum_{A=1}^{N_{\text{nucl}}} \sqrt{\frac{Z_A^3}{\pi}} e^{-2Z_A|\mathbf{r}-\mathbf{r}_A|}$$

- Les électrons de cœur sont soumis à une plus forte friction que les électrons de valence
- Le pas de temps peut donc être augmenté
- Si l'on utilise un pas d'acceptation/rejet de Metropolis, une plus grande part de pas proposés seront acceptés

Électrons de cœur

- On augmente la friction près des cœurs :

$$\xi(\mathbf{r}) = 1 + \sum_{A=1}^{N_{\text{nucl}}} \sqrt{\frac{Z_A^3}{\pi}} e^{-2Z_A|\mathbf{r}-\mathbf{r}_A|}$$

- Les électrons de cœur sont soumis à une plus forte friction que les électrons de valence
- Le pas de temps peut donc être augmenté
- Si l'on utilise un pas d'acceptation/rejet de Metropolis, une plus grande part de pas proposés seront acceptés

Électrons de cœur

- On augmente la friction près des cœurs :

$$\xi(\mathbf{r}) = 1 + \sum_{A=1}^{N_{\text{nucl}}} \sqrt{\frac{Z_A^3}{\pi}} e^{-2Z_A|\mathbf{r}-\mathbf{r}_A|}$$

- Les électrons de cœur sont soumis à une plus forte friction que les électrons de valence
- Le pas de temps peut donc être augmenté
- Si l'on utilise un pas d'acceptation/rejet de Metropolis, une plus grande part de pas proposés seront acceptés

Électrons de cœur

Exemple

Atome de Lithium, $E_{VMC} = -7.4724(9)$

$\delta\tau$	Ricci $\xi = 1$	Ricci ξ variable
0.1	-7.4493(8)	-7.4813(3)
0.05	-7.4576(7)	-7.4732(6)
0.005	-7.470(2)	-7.469(2)
0.001	-7.470(2)	-7.471(2)
0.0005	-7.475(3)	-7.474(3)

Atome d'Oxygène, $E_{VMC} = -74.808(10)$

0.02	—*	-74.804(10)
0.015	—*	-74.802(13)
0.001	-74.78(4)*	—
0.0005	-74.77(3)	—

Résumé

- L'algorithme de Metropolis n'est plus nécessaire pour le DMC (pas de temps variable)
- Les schémas de Langevin produisent un meilleur échantillonnage que le schéma d'Euler pour le VMC \implies utilisation de pas de temps beaucoup plus grands
- Perspective : suppression des biais dus à la discrétisation
 - Implémentation de l'algorithme "Exact Diffusion" de Roberts *et al* pour le DMC
 - Algorithme de Metropolis pour la dynamique de Langevin en VMC
- Trouver le meilleur compromis entre le temps de calcul et la qualité du schéma de simulation

Résumé

- L'algorithme de Metropolis n'est plus nécessaire pour le DMC (pas de temps variable)
- Les schémas de Langevin produisent un meilleur échantillonnage que le schéma d'Euler pour le VMC \implies utilisation de pas de temps beaucoup plus grands
- Perspective : suppression des biais dus à la discrétisation
 - Implémentation de l'algorithme "Exact Diffusion" de Roberts *et al* pour le DMC
 - Algorithme de Metropolis pour la dynamique de Langevin en VMC
- Trouver le meilleur compromis entre le temps de calcul et la qualité du schéma de simulation

Résumé

- L'algorithme de Metropolis n'est plus nécessaire pour le DMC (pas de temps variable)
- Les schémas de Langevin produisent un meilleur échantillonnage que le schéma d'Euler pour le VMC \implies utilisation de pas de temps beaucoup plus grands
- Perspective : suppression des biais dus à la discrétisation
 - Implémentation de l'algorithme "Exact Diffusion" de Roberts *et al* pour le DMC
 - Algorithme de Metropolis pour la dynamique de Langevin en VMC
- Trouver le meilleur compromis entre le temps de calcul et la qualité du schéma de simulation

Résumé

- L'algorithme de Metropolis n'est plus nécessaire pour le DMC (pas de temps variable)
- Les schémas de Langevin produisent un meilleur échantillonnage que le schéma d'Euler pour le VMC \implies utilisation de pas de temps beaucoup plus grands
- Perspective : suppression des biais dus à la discrétisation
 - Implémentation de l'algorithme "Exact Diffusion" de Roberts *et al* pour le DMC
 - Algorithme de Metropolis pour la dynamique de Langevin en VMC
- Trouver le meilleur compromis entre le temps de calcul et la qualité du schéma de simulation

Résumé

- L'algorithme de Metropolis n'est plus nécessaire pour le DMC (pas de temps variable)
- Les schémas de Langevin produisent un meilleur échantillonnage que le schéma d'Euler pour le VMC \implies utilisation de pas de temps beaucoup plus grands
- Perspective : suppression des biais dus à la discrétisation
 - Implémentation de l'algorithme "Exact Diffusion" de Roberts *et al* pour le DMC
 - Algorithme de Metropolis pour la dynamique de Langevin en VMC
- Trouver le meilleur compromis entre le temps de calcul et la qualité du schéma de simulation