

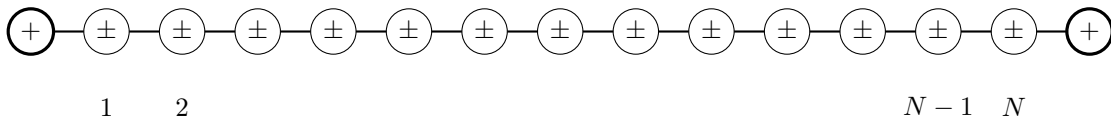
Homework 3: Modèle d'Ising en dimension finie

Consignes de rendu : Pour les questions numériques (indiquées par un astérisque), veuillez soumettre un notebook Jupyter qui peut être exécuté de bout en bout sans erreur et qui reproduit tous les résultats demandés dans ce document. Assurez-vous que votre code soit clair, bien commenté, et que toutes les dépendances nécessaires soient clairement indiquées. Pour les questions théoriques, vous avez deux options :

- Vous pouvez inclure vos réponses directement dans le notebook Jupyter, en utilisant des cellules de texte Markdown pour une présentation claire et structurée.
- Alternativement, vous pouvez soumettre un fichier PDF séparé contenant vos réponses aux questions théoriques. Dans ce cas, assurez-vous que vos réponses soient bien organisées et correspondent clairement aux numéros des questions.

Dans les deux cas, veuillez à ce que vos explications soient claires, concises, et rigoureuses. N'hésitez pas à inclure des schémas ou des équations lorsque cela est pertinent pour illustrer vos raisonnements.

Exercice 1 Le modèle d'Ising en une dimension



Le modèle d'Ising est l'un des modèles les plus simples et les plus fondamentaux de la physique statistique. En une dimension, il consiste en une chaîne de N spins $\{s_i\}_{i=1}^N$, où chaque spin peut prendre deux valeurs : $s_i = \pm 1$. L'hamiltonien du système est donné par :

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^N s_i s_{i+1} \quad (1)$$

où J est la constante de couplage entre spins voisins (nous considérerons $J > 0$, cas ferromagnétique).

Pour le reste de l'exercice on va considérer des conditions aux bords fixes $s_0 = s_{N+1} = 1$

Part I — Développement haute température

Q1. On comence d'abord avec le calcul de la fonction de partition.

- Écrivez l'expression de la fonction de partition $Z_N(\beta)$ pour $\beta = \frac{1}{k_B T}$.
- En utilisant l'identité $e^{\beta x} = \cosh(\beta)(1 + x \tanh(\beta))$ valable pour $x = \pm 1$, montrez que l'on peut écrire

$$Z_N(\beta) = [\cosh(\beta J)]^{N+1} \sum_{\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^N} \prod_{i=0}^N (1 + \kappa s_i s_{i+1}), \quad (2)$$

où $\kappa = \tanh(\beta J)$ et la somme sur \mathbf{s} portent sur l'ensemble des éléments, c'est à dire $\sum_{\mathbf{s} \in \{\pm 1\}^N} \equiv \sum_{k=1}^N \sum_{s_k \in \{-1, 1\}} \equiv \sum_{s_1 \in \{-1, 1\}} \cdots \sum_{s_N \in \{-1, 1\}}$.

- Développez le produit dans l'expression de $Z_N(\beta)$ en κ . Expliquez pourquoi chaque terme de ce développement peut être représenté par un diagramme où les liens entre sites voisins représentent un facteur κ .

- b) Pour $N = 3$, écrivez explicitement tous les termes du développement et représentez les diagrammes correspondants.
- c) Pour un diagramme donné, montrez que la somme sur les configurations de spins $\sum_{s \in \{\pm 1\}^N}$ est nulle sauf si chaque site (sauf 0 et $N + 1$) est connecté à un nombre pair de liens.

- Q3.** a) En utilisant la règle de parité de la question précédente, montrez que seuls deux types de diagrammes contribuent à $Z_N(\beta)$: le diagramme vide et le diagramme complètement rempli. Expliquez pourquoi.
- b) En déduire l'expression exacte de $Z_N(\beta)$

$$Z_N(\beta) = [\cosh(\beta J)]^{N+1} 2^N (1 + \kappa^{N+1}). \quad (3)$$

- Q4.** On s'intéresse maintenant à calculer des observables comme l'énergie libre du système, l'énergie par site et le chaleur spécifique.

- a) Calculez l'énergie libre par site dans la limite thermodynamique

$$f(\beta) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \ln Z_N(\beta), \quad (4)$$

et en déduire l'énergie interne par site $u(\beta) = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta}$ et la chaleur spécifique $c(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial^2(\beta f)}{\partial \beta^2}$.

- b) Tracez l'allure de ces fonctions thermodynamiques en fonction de la température. Commentez l'absence de transition de phase dans ce système.

Part II — Simulation Monte Carlo

On s'intéresse maintenant à implémenter une simulation Monte Carlo efficace du modèle d'Ising 1D avec l'algorithme de Metropolis. Pour optimiser le code, nous allons utiliser certaines stratégies d'implémentation spécifiques.

- Q1.** Pour représenter la configuration du système de manière efficace, nous utiliserons un tableau de type `bool` de longueur $N + 2$ pour inclure les spins avec les conditions aux bords fixes. On va considérer `True` comme $+1$ et `False` comme -1 .
- a) Implémentez une fonction Python qui calcule la variation d'énergie ΔE associée au retournement d'un spin $s_i \rightarrow -s_i$ avec comme définition `energy_variation_1d(s: Iterable[bool], J: float, pos: int) -> float`:
- b) Implémentez l'algorithme de Metropolis¹ dans une fonction avec définition `metropolis_simulation_1d(s_init: Iterable[bool], J: float, beta: float, n_steps: int) -> Iterable[bool]` : qui propose un nombre N `n_steps` de l'algorithme et change le système.
- c) Implémentez une fonction qui mesure l'énergie totale d'une configuration `total_energy_1d(s: np.ndarray, J: float) -> float`.
- Q2.** Étudions maintenant le temps de décorrélation du système.
- a) Implémentez une fonction qui mesure la distance de Hamming normalisée² entre la configuration initiale et la configuration qui évolue avec le Monte Carlo.
- b) Suivez l'évolution de cette distance au cours du temps Monte Carlo. Après combien de pas Monte Carlo les deux trajectoires deviennent-elles décorréliées ? Appelons ce nombre $n_{\text{therm}}(T, N)$ et répétez l'expérience pour différentes températures $T/J \in \{0.001, 1, 1000\}$ et après pour différentes tailles du système $N \in \{100, 500, 1000\}$. Commentez les dépendances du temps de décorrélation avec la température et la taille du système.
- Q3.** Effectuons maintenant une étude systématique des observables thermodynamiques comme l'énergie moyenne par spin et le chaleur spécifique.
- a) Pour $N = 100$ spins et différentes températures $T/J \in [0.1, 2]$ on veut obtenir des échantillons de Monte Carlo. Avec les valeurs précédentes, effectuer une thermalisation en attendant un nombre de pas MCMC de $10 * n_{\text{therm}}(T, N = 100)$. Utiliser les 10^6 pas suivants pour évaluer l'énergie moyenne $\langle E \rangle$ et $\langle E^2 \rangle$ et la chaleur spécifique $c = \beta^2 (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) / N$.

¹Pour une implémentation efficace pré-générez la séquence des positions à visiter avec `np.random.randint`.

²La distance de Hamming pour deux vecteurs in $\mathbf{v}, \mathbf{u} \in \{-1, +1\}^N$ est défini comme

$$d_H(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Theta(-v_i u_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{u_i \neq v_i} = \frac{\text{nombre d'éléments différents}}{\text{dimension des vecteurs}} \quad (5)$$

- b) Comparez vos résultats numériques avec les expressions exactes obtenues dans la première partie.

Part III — Fonction de corrélation

Q1. La corrélation entre deux point a distance r est définie pour chaque température comme

$$C_\beta(r) = \langle s_i s_{i+r} \rangle = \sum_{\mathbf{s} \in \{-1, +1\}^N} \frac{s_i s_{i+r} e^{-\beta \mathcal{H}_\beta(\mathbf{s})}}{\mathcal{Z}_N(\beta)} \quad (6)$$

on veut computer cette quantité analytiquement et la comparez avec le simulations.

- a) En utilisant la même idée du développement haute température pour la *Part I*, calculez $C_\beta(r)$.
b) Montrez que pour tout $T > 0$, $N \rightarrow \infty$, et r fixée (cette dernière ne dépend pas de N), la fonction de corrélation décroît exponentiellement

$$C_\beta(r) \sim e^{-r/\xi} \quad (7)$$

où ξ est la longueur de corrélation. Donnez la forme de ξ .

* **Q2.** À partir de vos simulations Monte Carlo :

- a) Mesurez $C_\beta(r)$ pour différentes températures.
b) Comparez les résultats numériques avec l'expression analytique.
c) Extrayez la longueur de corrélation ξ pour different temperatures en $T/J \in [0.5, 4.0]$. Comment ξ varie-t-elle avec la température ? Est-ce que il match avec la formule analytique?

Solution of Exercise 1

Part I — Développement haute température

Q1. Nous allons considérer l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=0}^N s_i s_{i+1} \quad (8)$$

- a) La formule de la fonction de partion est

$$Z_N(\beta) = \sum_{s_1 \in \{\pm 1\}} \cdots \sum_{s_N \in \{\pm 1\}} e^{\beta J \sum_{i=0}^N s_i s_{i+1}} = \sum_{s_1 \in \{\pm 1\}} \cdots \sum_{s_N \in \{\pm 1\}} \prod_{i=0}^N e^{\beta J s_i s_{i+1}} \quad (9)$$

- b) On note que $s_i s_{i+1} \in \{\pm 1\}$ pour toutes $i = 0, \dots, N$. Donc on a que

$$e^{\beta J s_i s_{i+1}} = \cosh(\beta J) (1 + s_i s_{i+1} \tanh(\beta J)) \quad (10)$$

donc on a que

$$Z_N(\beta) = \sum_{s_1 \in \{\pm 1\}} \cdots \sum_{s_N \in \{\pm 1\}} \prod_{i=0}^N \cosh(\beta J) (1 + s_i s_{i+1} \tanh(\beta J)) \quad (11)$$

$$= \cosh(\beta J)^{N+1} \sum_{s_1 \in \{\pm 1\}} \cdots \sum_{s_N \in \{\pm 1\}} \prod_{i=0}^N (1 + s_i s_{i+1} \tanh(\beta J)) \quad (12)$$

$$= \cosh(\beta J)^{N+1} \sum_{s_1 \in \{\pm 1\}} \cdots \sum_{s_N \in \{\pm 1\}} \prod_{i=0}^N (1 + \kappa s_i s_{i+1}) \quad (13)$$

- Q2.** a) On peut voir le term du produit produit $\prod_{i=0}^N (1 + \kappa s_i s_{i+1})$ comme choisir pour chaque i soit le terme avec 1 ou le terme $\kappa s_i s_{i+1}$. Donc le développement du produit $\prod_{i=0}^N (1 + \kappa s_i s_{i+1})$ va générer des termes de la forme

$$\kappa^n s_{i_1} s_{i_1+1} s_{i_2} s_{i_2+1} \cdots s_{i_n} s_{i_n+1} \quad (14)$$

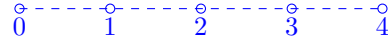
où n est le nombre de facteurs $(1 + \kappa s_i s_{i+1})$ pour lesquels on a choisi le terme $\kappa s_i s_{i+1}$ plutôt que 1. En tout generalite on peut ecrire que

$$\prod_{i=0}^N (1 + \kappa s_i s_{i+1}) = \sum_{E \in \mathcal{P}_N} \kappa^{|E|} \prod_{e \in E} s_e s_{e+1} \quad (15)$$

où E est un sous ensemble de $\{0, \dots, N\}$. On indique \mathcal{P}_N l'ensemble de tous les sous ensemble E possibles et $|E|$ la cardinalité de E .

Chaque terme peut être représenté par un diagramme où l'on dessine un lien entre les sites i et $i + 1$ si le facteur $\kappa s_i s_{i+1}$ est sélectionné. Le coefficient κ^n compte alors le nombre de liens dans le diagramme.

b) Pour $N = 3$, on a trois sites intérieurs et don on peut considérée le lien si sont sélectionne en en produit



on peut explicitement avoir le produit

$$\prod_{i=1}^4 (1 + \kappa s_i s_{i-1}) = (1 + \kappa s_0 s_1)(1 + \kappa s_1 s_2)(1 + \kappa s_2 s_3)(1 + \kappa s_3 s_4) \quad (16)$$

$$= (1 + \kappa s_1)(1 + \kappa s_1 s_2)(1 + \kappa s_2 s_3)(1 + \kappa s_3) \quad (17)$$

$$= 1 + \kappa(s_1 + s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3) + \kappa^4(s_1^2 s_2^2 s_3^2) \quad (18)$$

$$+ \kappa^2(s_1^2 s_2 + s_1 s_2 s_3 + s_1 s_3 s_4 + s_1 s_2^2 s_3 + s_1 s_2 s_3 + s_2 s_3^2 s_4) \quad (19)$$

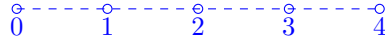
$$+ \kappa^3(s_1^2 s_2^2 s_3 + s_1^2 s_2 s_3 + s_1 s_2 s_3^2 + s_1 s_2^2 s_3^2) \quad (20)$$

$$= 1 + \kappa(s_1 + s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3) + \kappa^3(s_3 + s_2 s_3 + s_1 s_2 + s_1) + \kappa^4 \quad (21)$$

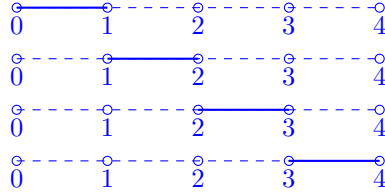
$$+ \kappa^2(s_2 + s_1 s_2 s_3 + s_1 s_3 s_4 + s_1 s_3 + s_1 s_2 s_3 + s_2 s_4) \quad (22)$$

ou $s_0 = s_4 = +1$. Les diagrammes correspondants sont, divisee par ordre,

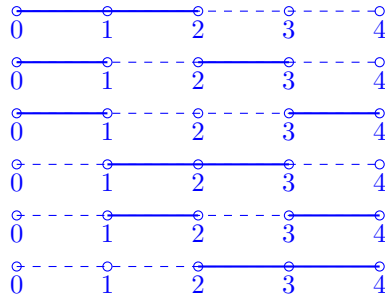
Ordre 0 On a un seule diagramme



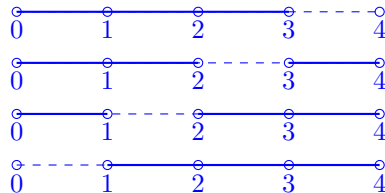
Ordre 1 On a quatre different diagrammes



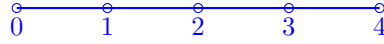
Ordre 2 On a



Ordre 3 On a



Ordre 4 On a un seule diagramme



- c) Considérons un site intérieur i . Pour un diagramme donné, ce site apparaît dans le produit des s_i un nombre de fois égal au nombre de liens connectés à ce site. Lors de la somme sur $s_i = \pm 1$, on a

$$\sum_{s_i = \pm 1} s_i^n = \begin{cases} 2 & \text{si } n \text{ est pair} \\ 0 & \text{si } n \text{ est impair} \end{cases} \quad (23)$$

Donc, pour qu'un diagramme contribue à la somme, chaque site intérieur doit être connecté à un nombre pair de liens. Les sites aux bords (0 et $N+1$) ne sont pas soumis à cette contrainte car ils sont fixés à $+1$.

- Q3.** a) D'après la règle de parité établie précédemment, chaque site intérieur doit être connecté à un nombre pair de liens pour que la somme sur les configurations de spins soit non-nulle. Pour les sites aux bords (fixés à $+1$), cette contrainte ne s'applique pas.

En considérant un site intérieur quelconque, il doit avoir soit 0 soit 2 liens. S'il a un seul lien ou un nombre impair de liens, la somme sur ce spin donnera zéro. Cette contrainte propage de proche en proche : si un site a deux liens, ses voisins doivent aussi avoir deux liens pour satisfaire la règle de parité.

Donc, seuls deux types de diagrammes sont possibles :

- Le diagramme vide (aucun lien) : contribue avec un facteur 1
- Le diagramme complètement rempli (tous les liens) : contribue avec un facteur κ^{N+1}

- b) Pour chacun de ces deux diagrammes valides, la somme sur les configurations de spins donne un facteur 2^N (car il y a N spins libres pouvant prendre deux valeurs). Le facteur global $[\cosh(\beta J)]^{N+1}$ est toujours présent.

Donc la fonction de partition s'écrit

$$Z_N(\beta) = [\cosh(\beta J)]^{N+1} 2^N (1 + \kappa^{N+1}) \quad (24)$$

où $\kappa = \tanh(\beta J)$.

- Q4.** a) L'énergie libre par site dans la limite thermodynamique est

$$\begin{aligned} f(\beta) &= - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \ln Z_N(\beta) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N} \ln ([\cosh(\beta J)]^{N+1} 2^N (1 + \kappa^{N+1})) \\ &= - \frac{1}{\beta} (\ln[\cosh(\beta J)] + \ln 2) \end{aligned} \quad (25)$$

où le terme $\ln(1 + \kappa^{N+1})$ disparaît dans la limite $N \rightarrow \infty$ car $|\kappa| < 1$ pour tout β fini. L'énergie interne par site est alors

$$u(\beta) = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} = -J \tanh(\beta J)$$

La chaleur spécifique par site est

$$c(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial^2 \beta f}{\partial \beta^2} = -\beta^2 \frac{\partial u}{\partial \beta} = \beta^2 J^2 \operatorname{sech}^2(\beta J) \quad (26)$$

Cette chaleur spécifique présente les comportements asymptotiques suivants :

- À haute température ($\beta J \ll 1$) : $c(\beta) \approx (\beta J)^2$
- À basse température ($\beta J \gg 1$) : $c(\beta) \approx 4(\beta J)^2 e^{-2\beta J}$

L'absence de singularité dans ces quantités thermodynamiques, représenté en Fig. 1, indique l'absence de transition de phase dans le modèle d'Ising 1D, contrairement au cas 2D qui présente une transition à température finie.

Part II — Simulation Monte Carlo

Q1. Voir le notebook

Q2. Voir le notebook

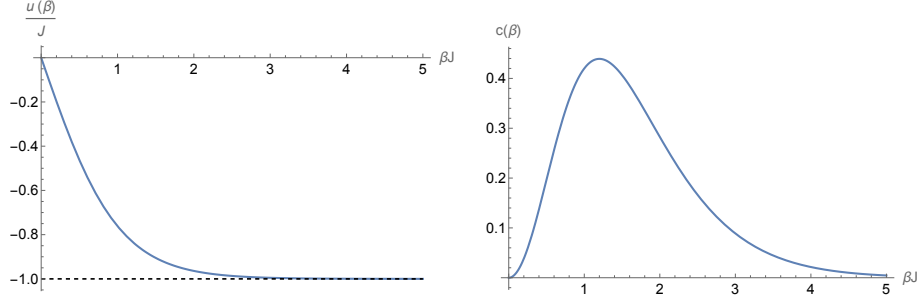


Figure 1: Courbes d'énergie et de chaleur spécifique pour le modèle Ising 1D.

Q3. Voir le notebook

Part III — Fonction de corrélation

Q1. a) Pour calculer la fonction de corrélation, nous devons d'abord évaluer $\langle s_i s_{i+r} \rangle$. En utilisant la même technique de développement haute température que précédemment

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{1}{Z_N(\beta)} \sum_{\mathbf{s}} s_i s_{i+r} e^{\beta J \sum_{j=0}^N s_j s_{j+1}} \quad (27)$$

En utilisant la même transformation avec $\kappa = \tanh(\beta J)$, on obtient

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{[\cosh(\beta J)]^{N+1}}{Z_N(\beta)} \sum_{\mathbf{s}} s_i s_{i+r} \prod_{j=0}^N (1 + \kappa s_j s_{j+1}) \quad (28)$$

Par la règle de parité de la Q3, Part I, seuls les diagrammes où tous les sites sont connectés à un nombre pair de liens contribuent. Pour calculer $\langle s_i s_{i+r} \rangle$, seuls les deux diagrammes suivants satisfont cette condition : celui avec une ligne continue de r liens connectant les sites i et $i+r$, et celui qui connecte le site i au bord et le site $i+r$ au bord. Donc

$$\langle s_i s_{i+r} \rangle = \frac{[\cosh(\beta J)]^{N+1} 2^N (\kappa^r + \kappa^{N+1-r})}{[\cosh(\beta J)]^{N+1} 2^N (1 + \kappa^{N+1})} = \kappa^r \frac{1 + \kappa^{N+1-2r}}{1 + \kappa^{N+1}}. \quad (29)$$

Dans la limite $N \rightarrow \infty$, si on considère r fixée (ne dépendant pas de N), on a, pour le fait que $\kappa < 1$, que les termes κ^{N+1} et κ^{N+1-2r} sont sous-dominants, donc la fonction de corrélation est simplement

$$C_\beta(r) = \kappa^r = [\tanh(\beta J)]^r \quad (30)$$

b) La fonction de corrélation peut être réécrite sous forme exponentielle

$$C_\beta(r) = [\tanh(\beta J)]^r = e^{r \ln(\tanh(\beta J))} = e^{-r/\xi} \quad (31)$$

où la longueur de corrélation ξ est donnée par

$$\xi = -\frac{1}{\ln(\tanh(\beta J))} \quad (32)$$

Cette longueur de corrélation a les comportements asymptotiques suivants :

- À haute température ($\beta J \ll 1$) : $\xi \approx \frac{1}{2\beta J}$
- À basse température ($\beta J \gg 1$) : $\xi \approx -\frac{1}{2} e^{2\beta J}$

La longueur de corrélation diverge exponentiellement quand $T \rightarrow 0$. Cette divergence est caractéristique d'un point critique à température nulle, confirmant l'absence de transition de phase à température finie dans le modèle d'Ising 1D.

Le fait que ξ soit finie pour tout $T > 0$ implique que les corrélations décroissent toujours exponentiellement avec la distance. Cette décroissance exponentielle est liée au coût énergétique de création de domaines de spins opposés, qui est fini en 1D mais devient infini en 2D à basse température.

Q2. Voir le notebook

Exercice 2 Ising 2D

On considère une variante en deux dimensions du modèle déjà étudié. Le degré de liberté consiste en $N \times N$ spins $\{s_{i,j}\}_{i,j=1}^N$, où chaque spin peut prendre deux valeurs : $s_{i,j} = \pm 1$. L'hamiltonien du système est donné par

$$\mathcal{H} = -J \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^{N-1} (s_{i,j} s_{i+1,j} + s_{i,j} s_{i,j+1}) - J \sum_{i=1}^{N-1} (s_{N,i} s_{N,i+1} + s_{i,N} s_{i+1,N}) + \mathcal{C}(\{s_{i,j}\}_{i,j=1}^N) \quad (33)$$

où J est la constante de couplage entre spins voisins (nous considérerons $J > 0$, cas ferromagnétique) et \mathcal{C} est le terme concernant les conditions aux bords. Pour le reste de l'exercice on va considérer des conditions au bord toroïdales (i.e. periodiques)

$$\mathcal{C}(\{s_{i,j}\}_{i,j=1}^N) = -J \sum_{i=1}^N s_{i,N} s_{i,1} - J \sum_{i=1}^N s_{N,i} s_{1,i} \quad (34)$$

Part I — Développement haute température

Q1. a) En utilisant l'identité $e^{\beta x} = \cosh(\beta)(1 + x \tanh(\beta))$ pour $x = \pm 1$, montrez que l'on peut écrire

$$Z_N(\beta) = [\cosh(\beta J)]^{2N^2} \sum_{\{s_{i,j}\}} \prod_{(i,j) \sim (i',j')} (1 + \kappa s_{i,j} s_{i',j'}) \quad (35)$$

où $\kappa = \tanh(\beta J)$ et la notation $(i, j) \sim (i', j')$ désigne les paires de sites premiers voisins.

- b) Développez le produit dans l'expression de $Z_N(\beta)$. Expliquez pourquoi chaque terme de ce développement peut être représenté par un diagramme où les liens entre sites voisins représentent un facteur κ .
- c) Pour un diagramme donné, montrez que la somme sur les configurations de spins $\sum_{\{s_{i,j}\}}$ est nulle sauf si chaque site (sauf les bords) est connecté à un nombre pair de liens.

Q2. En utilisant l'analyse précédente,

- a) Calculez l'énergie libre par site dans la limite thermodynamique

$$f(\beta) = - \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\beta N^2} \ln Z_N(\beta) \quad (36)$$

à l'ordre κ^{10} .

- b) En déduire l'énergie interne par site $u(\beta)$ et la chaleur spécifique $c(\beta)$ au même ordre.

Part II — Développement basse température

- Q1.** a) Dans la limite basse température ($\beta \rightarrow \infty$), quel est l'état fondamental du système compte tenu des conditions aux bords?
- b) Quelle est l'énergie de cet état fondamental?
- c) Classifiez les trois premières excitations possibles au-dessus de l'état fondamental. Quelle est leur énergie et leur dégénérescence?

Q2. a) En déduire que l'expression de la fonction de partition à basse température peut s'écrire comme:

$$Z_N(\beta) = e^{-\beta E_0} \left(\left(\sum_{k=0}^{10} a_{2k} e^{-2k\beta J} \right) + o(e^{-20\beta J}) \right) \quad (37)$$

où les coefficients a_i sont à déterminer. Expliquez pourquoi seuls les termes paires contribuent à la somme.

- b) En déduire l'énergie libre, l'énergie interne et la chaleur spécifique dans cette limite.

* Part III — Simulation Monte Carlo

On veut aussi implémenter un algorithme efficace pour simuler le Monte Carlo dans le cas en deux dimensions. Encore un fois on va implémenter l'algorithme de Metropolis et nous utiliserons un tableau de type `bool` de dimension N^2 pour définir l'état du système.

- Q1.** On veut aussi implémenter un algorithme efficient pour simuler le Monte Carlo dans le cas en deux dimension.
- a) Implémenter la fonction qui calcule la différence en énergie pour un flip de spin $s_{i,j} \rightarrow -s_{i,j}$. (*Rappel: on considère des conditions au bord periodiques!*). On notera cette fonction par `energy_variation_2d(s: np.array, J: float, pos: tuple) -> float:`.
 - b) Implémenter la fonction qui fait tourner l'algorithme de Metropolis pour un nombre de steps fixe N^2 `n_steps`.
On notera cette fonction par `def metropolis_simulation_2d(s_init: np.ndarray, J: float, beta: float, n_steps: int) -> np.ndarray:`.
 - c) Implémenter la fonction qui calcule l'énergie par spin comme `def energy_per_spin_2d(s: np.ndarray, J: float) -> float:`.
 - d) Implémenter la fonction qui calcule le chaleur spécifique par site comme `def specific_heat_per_spin(T: float, J: float) -> float:`.
- Q2.** Produire une figure de la distribution de magnétisation pour les valeurs de la température $T/J \in \{2.0, 2.6, 3.0\}$ après la thermalisation. Que notez vous? Est ce que il y a un changement de comportement quelque part?

Part IV — Solution Exacte et Comparaison avec les Expansions

La solution exacte du modèle d'Ising 2D, obtenue par Onsager en 1944, représente une avancée mathématique majeure utilisant la méthode de la matrice de transfert. L'énergie libre $f(\beta)$ par site est donnée par:

$$-\beta f(\beta) = \ln(2 \cosh 2\beta J) + \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\theta \ln \left[\frac{1}{2} \left(1 + \sqrt{1 - \left(\frac{2 \sinh 2\beta J}{\cosh^2 2\beta J} \right)^2 \sin^2 \theta} \right) \right]. \quad (38)$$

- Q1.** En dérivant par rapport à β , démontrez que l'énergie moyenne par site s'écrit

$$e(\beta) = -J \coth 2\beta J \left[1 + \frac{2}{\pi} (2 \tanh^2 2\beta J - 1) \int_0^{\pi/2} d\phi \left(1 - \left(\frac{2 \sinh 2\beta J}{\cosh^2 2\beta J} \right)^2 \sin^2 \phi \right)^{-\frac{1}{2}} \right] \quad (39)$$

Les solutions précédentes dépendent d'une intégrale. Pour estimer sa valeur, vous pouvez la calculer avec python avec la routine: `scipy.integrate.quad`.

- Q2.** Nous allons maintenant comparer quatre approches différentes pour calculer l'énergie du système : la simulation Monte Carlo, la solution exacte d'Onsager, le développement à haute température et le développement à basse température.
- a) Tracez sur un même graphique la solution exacte d'Onsager et les résultats de la simulation Monte Carlo pour un système de taille $N = 128$.
 - b) Ajoutez au graphique précédent les développements à haute et basse températures. Utilisez des courbes différentes pour représenter chaque ordre du développement.
 - c) Commentez le graphique obtenu.

Part V — Le Cumulant de Binder

Le cumulant de Binder (ou plus précisément, la kurtosis) est un outil puissant pour l'étude numérique des transitions de phase, notamment pour déterminer la température critique et la classe d'universalité d'un système. Pour un système de taille N , il est défini comme

$$U_N = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_N}{3 \langle m^2 \rangle_N^2} \quad (40)$$

où $m = \frac{1}{N^2} \sum_{i,j=1}^N s_{i,j}$ est l'aimantation par site et $\langle \cdot \rangle_N$ désigne la moyenne thermique pour un système de taille linéaire N .

- Q1.** Pour $T > T_c$ (phase paramagnétique), la distribution de l'aimantation devient gaussienne dans la limite thermodynamique. Montrez que pour le cas gaussienne on a que $U_N = 0$.
- Q2.** Pour $T < T_c$ (phase ferromagnétique), la distribution de l'aimantation tend vers deux pics de Dirac en $\pm m_*(T)$ où $m_*(T)$ est l'aimantation spontanée. Montrez que pour cette distribution on a que $U_N = \frac{2}{3}$.

- * **Q3.** Écrivez une fonction qui calcule le cumulatif de Binder à partir d'une série temporelle d'aimantations obtenue par simulation Monte Carlo.
- * **Q4.** Pour le modèle d'Ising 2D, effectuez des simulations Monte Carlo pour des réseaux avec $N \in \{8, 16, 32, 64\}$ aux températures $T/J \in \{2.0, 2.1, 2.2, 2.3, 2.4, 2.5\}$. Pour chaque taille et température échantillonnez de l'ordre de 10^3 configurations indépendantes à l'équilibre. Calculez U_N et représentez graphiquement $U_N(T)$ pour les différentes tailles.
- * **Q5.** À partir de vos données
a) Estimez T_c à partir du point de croisement des courbes $U_N(T)$.
b) Comparez votre estimation avec la valeur exacte $T_c/J \simeq 2.269$ donnée par Onsager.

Solution of Exercise 2

Part I — Développement Haute Température

- Q1.** a) Partons de la fonction de partition

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{s_{i,j}\}} \exp \beta J \left(\sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^N s_{i,j} s_{i+1,j} + \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{N-1} s_{i,j} s_{i,j+1} + \sum_{i=1}^N s_{i,N} s_{i,1} + \sum_{i=1}^N s_{N,i} s_{1,i} \right) \quad (41)$$

en utilisant l'indice on a que cette expression se factorise sur les liens

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{s_{i,j}\}} \prod_{(i,j)-(i',j')} e^{\beta J s_{i,j} s_{i',j'}} \quad (42)$$

ou on indique $(i,j) - (i',j')$ un lien existante sur le réseau.

Pour chaque lien, nous pouvons appliquer l'identité donnée. Comme $s_{i,j} s_{i',j'} = \pm 1$, nous avons

$$e^{\beta J s_{i,j} s_{i',j'}} = \cosh(\beta J) (1 + s_{i,j} s_{i',j'} \tanh(\beta J)) \quad (43)$$

Le réseau a $2N^2$ liens au total en comptant les liens avec les bords fixes. En posant $\kappa = \tanh(\beta J)$, nous obtenons la forme désirée

$$Z_N(\beta) = [\cosh(\beta J)]^{2N^2} \sum_{\{s_{i,j}\}} \prod_{(i,j)-(i',j')} (1 + \kappa s_{i,j} s_{i',j'}) \quad (44)$$

- b) Le développement du produit donnera une somme de termes qui peuvent être organisés selon les puissances de κ

$$\prod_{(i,j)} (1 + \kappa s_{i,j} s_{i',j'}) = 1 + \sum_{\text{liens}} \kappa s_{i,j} s_{i',j'} + \sum_{\text{paires}} \kappa^2 s_{i,j} s_{i',j'} s_{k,l} s_{k',l'} + \dots \quad (45)$$

Chaque terme correspond à un choix de liens où nous prenons le facteur $\kappa s_{i,j} s_{i',j'}$ plutôt que 1. Ces choix peuvent être représentés par un diagramme où :

- Chaque site du réseau est un point
- Un lien est tracé entre deux sites voisins si nous avons choisi le facteur $\kappa s_{i,j} s_{i',j'}$ correspondant
- L'ordre en κ est le nombre de liens dans le diagramme

- c) Pour un diagramme donné avec certains liens choisis, nous avons une somme de la forme

$$\sum_{\{s_{i,j}\}} \prod_{\text{liens choisis}} s_{i,j} s_{i',j'} \quad (46)$$

Considérons un site intérieur particulier $s_{i,j}$. Ce spin apparaît dans le produit autant de fois qu'il y a de liens connectés à lui. Quand nous sommes sur $s_{i,j} = \pm 1$:

- Si le nombre de liens est pair : $\sum_{s_{i,j}=\pm 1} (s_{i,j})^{\text{pair}} = 2$
- Si le nombre de liens est impair : $\sum_{s_{i,j}=\pm 1} (s_{i,j})^{\text{impair}} = 0$

Donc un diagramme donne une contribution non nulle uniquement si chaque site intérieur est connecté à un nombre pair de liens. Les sites aux bords ont toujours $s = +1$ donc cette règle ne s'applique pas à eux.

Q2. a) Donc à l'ordre κ^{10}

$$Z_N(\beta) = \cosh(\beta J)^{2N^2} 2^{2N^2} \left[1 + N^2 \kappa^4 + 2N^2 \kappa^6 + \left(7N^2 + \frac{N^2(N^2 - 5)}{2} \right) \kappa^8 \right. \quad (47)$$

$$\left. + (28N^2 + 2N^2(N^2 - 8)) \kappa^{10} + o(\kappa^{10}) \right] \quad (48)$$

L'énergie libre par site est

$$-\beta f(\beta) = \frac{1}{N^2} \log Z = 2 \log \cosh \beta J + 2 \log 2 + \kappa^4 + 2\kappa^6 + \left(\frac{9}{2} + \frac{N^2}{2} \right) \kappa^8 + \quad (49)$$

$$+ (2N^2 + 12) \kappa^{10} - \frac{N^2}{2} \kappa^8 - 2N^2 \kappa^{10} + o(\kappa^{10}) \quad (50)$$

où nous avons utilisé que pour $\epsilon \approx 0$ nous pouvons écrire $\log(1 + \epsilon) = \epsilon - \frac{\epsilon^2}{2} + O(\epsilon^3)$. On voit, et on peut le prouver à n'importe quel ordre, que la contribution des diagrammes déconnectés est toujours annulée par le développement du logarithme. On a

$$-\beta f(\beta) = 2 \log 2 \cosh \beta J + \kappa^4 + 2\kappa^6 + \frac{9}{2} \kappa^8 + 12\kappa^{10} + o(\kappa^{10}) \quad (51)$$

b) L'énergie interne par site est

$$u(\beta) = \frac{\partial(\beta f)}{\partial \beta} \approx -2J\kappa - \frac{4J}{\cosh^2(\beta J)} \kappa^3 - \frac{12J}{\cosh^2(\beta J)} \kappa^5 - \frac{36J}{\cosh^2(\beta J)} \kappa^7 - \frac{120J}{\cosh^2(\beta J)} \kappa^9 \quad (52)$$

La chaleur spécifique par site est

$$c(\beta) \approx \beta^2 J^2 \left(2 \operatorname{sech}^2(Jx) + 1080 \tanh^8(Jx) \operatorname{sech}^4(Jx) + 252 \tanh^6(Jx) \operatorname{sech}^4(Jx) \right. \quad (53)$$

$$+ 60 \tanh^4(Jx) \operatorname{sech}^4(Jx) + 12 \tanh^2(Jx) \operatorname{sech}^4(Jx) - 240 \tanh^{10}(Jx) \operatorname{sech}^2(Jx) \quad (54)$$

$$\left. - 72 \tanh^8(Jx) \operatorname{sech}^2(Jx) - 24 \tanh^6(Jx) \operatorname{sech}^2(Jx) - 8 \tanh^4(Jx) \operatorname{sech}^2(Jx) \right) \quad (55)$$

Ce développement est valide à haute température ($\beta J \ll 1$) où κ est petit.

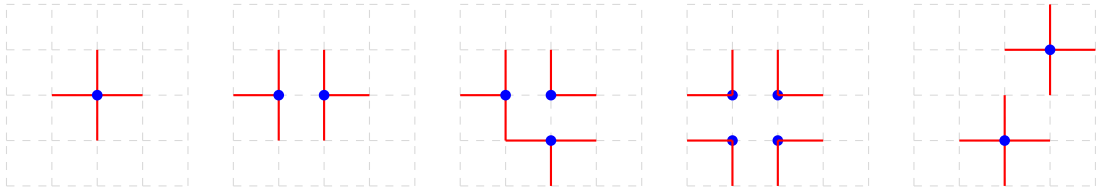
Part II — Développement Basse Température

Q1. a) Dans la limite basse température ($\beta \rightarrow \infty$), l'état fondamental est celui qui minimise l'énergie du système. Tous les spins s'alignent dans la même direction pour minimiser l'énergie d'interaction entre spins voisins parce que l'énergie est proportionnelle au nombre de liens frustrée. L'état fondamental est donc celui où tous les spins sont identiques, pointant soit tous vers le haut $+1$ out -1 .

b) L'énergie de l'état fondamental est proportionele au nombre de liens dans le systeme, donc

$$E_0 = -2JN^2. \quad (56)$$

c) On va considerer le suivantes



Les premières excitations correspondent à retourner un ou plusieurs spins par rapport à l'état fondamental. L'augmentation d'énergie corresponde a le nombre de lien frustrée: Si on considère de tourner un spin de $+1$ a -1 les liens avec ses voisins passent de $-J$ à $+J$, augmentant l'énergie de $2J$ par lien.

Le premier niveau excité: un seul spin retourné et donc l'énergie est de $E_1 = E_0 + 8J$. Vu que on peut choisir la position du spin on a une dégénérescence de N^2 .

Le deuxième niveau excité: deux spins retournés adjacents, énergie $E_2 = E_0 + 12J$. Leur dégénérescence est de $2N^2$.

Troisième niveau excité: on a que huit différents liés sont frustrés. Et donc on a une énergie $E_3 = E_0 + 16J$. Les configurations correspondantes sont: deux spins non adjacents, avec dégénérescence $\frac{N^2(N^2-5)}{2}$, quatre spins toutes adjacents, avec dégénérescence N^2 , trois spins en ligne, avec dégénérescence $2N^2$ et enfin trois spins en "L" adjacents avec dégénérescence $4N^2$.

Q2. a) La fonction de partition à basse température s'écrit

$$Z_N(\beta) = \sum_{\{\vec{s}\}} e^{\beta J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j} = e^{-\beta E_0} \sum_{\{\vec{s}\}} e^{-\beta \Delta E} = e^{-\beta E_0} \sum_{\Delta E} w(\Delta E) e^{-\beta \Delta E} \quad (57)$$

Où $E_0 = -2N^2J$, $\Delta E = 2N^2J - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j$ est la différence énergétique par rapport à l'état fondamental et $w(\Delta E)$ la dégénérescence correspondante. Puisque chaque lien brisé donne une contribution de $2J$ à ΔE , il n'y aura que des termes pairs dans l'expansion.

b) On appelle $w = e^{-2\beta J}$. À partir de là, nous pouvons calculer l'énergie libre:

$$-\beta f(\beta) = \frac{1}{N^2} \log Z = 2\beta J + w^4 + 2w^6 + \frac{9}{2}w^8 + 12w^{10} + o(w^{10}) \quad (58)$$

L'énergie interne:

$$u(\beta) = -2J(1 - 4w^4 - 12w^6 - 36w^8 - 120w^{10}) + o(w^{10}) \quad (59)$$

La chaleur spécifique:

$$c(\beta) = -\beta^2 \frac{\partial u}{\partial \beta} = 32J^2 \beta^2 e^{-20\beta J} (36e^{4\beta J} + 9e^{8\beta J} + 2e^{12\beta J} + 150) \quad (60)$$

qui montre un comportement exponentiel à basse température, typique des systèmes avec un gap d'énergie.

Part III — Simulation Monte Carlo

Q1. Voir le Notebook

Q2. Voir le Notebook

Part IV — Solution Exacte et Comparaison avec les Expansions

Q1. La dérivée du premier terme est

$$-\frac{d}{d\beta} \log(\cosh(2\beta J)) = -2J \tanh(2\beta J) \quad (61)$$

Pour le deuxième terme on peut définir

$$q(x) := \frac{2 \sinh(2x)}{\cosh^2(2x)}, \quad \frac{dq(x)}{dx} = 4J \operatorname{sech}(2\beta J) (\operatorname{sech}^2(2\beta J) - \tanh^2(2\beta J)), \quad (62)$$

le deuxième terme est une intégrale absolument convergente donc pour le théorème de convergence dominée on peut échanger l'intégrale et la dérivée pour obtenir

$$\frac{J}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin^2(\theta) q(\beta J) q'(\beta J)}{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2 + \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}} d\theta \quad (63)$$

Maintenant on veut séparer les termes qui sont dans l'intégrale. On commence par diviser et multiplier par $-J \coth(2\beta J)$

$$-\frac{\sin^2(\theta) q(\beta J) \tanh(2\beta J) q'(\beta J)}{\pi \left(1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2 + \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2} \right)} \quad (64)$$

Aussi le premier partie on peut la voir comme

$$-2J \tanh(2\beta J) = -J \coth(2\beta J) \int_0^{\pi/2} \frac{4 \tanh^2(2\beta J)}{\pi} d\theta \quad (65)$$

après on considère la somme de deux pour obtenir que

$$\frac{\partial \beta f(\beta)}{\partial \beta} = -\frac{J \cosh(2\beta J)}{\pi} \int_0^{\pi/2} \left[4 \tanh^2(2\beta J) - \frac{\sin^2(\theta) q(\beta J) \tanh(2\beta J) q'(\beta J)}{\left(1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2 + \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}\right)} \right] d\theta \quad (66)$$

On va simplifier le terme dans l'intégrale. On veut considérer la définition de q en eq. (62), donc

$$\sin^2(\theta) q(\beta J) \tanh(2\beta J) q'(\beta J) = 8 \tanh^2(2\beta J) \sin^2(\theta) \operatorname{sech}^2(2\beta J) (\operatorname{sech}^2(2\beta J) - \tanh^2(2\beta J)) \quad (67)$$

$$= 2q(\beta J)^2 \sin^2(\theta) (\operatorname{sech}^2(2\beta J) - \tanh^2(2\beta J)) \quad (68)$$

donc le on a que devien

$$\frac{4 \tanh^2(2\beta J) - 2 \sin^2(\theta) q(\beta J)^2 (\tanh^2(2\beta J) + \operatorname{sech}^2(2\beta J)) + 4 \tanh^2(2\beta J) \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}}{\sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2} \left(1 + \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}\right)} \quad (69)$$

Ou on a factorisée le dénominateur aussi. Maintenant on peut utiliser le fait que $\tanh^2(x) + \operatorname{sech}^2(x) = 1$ pour simplifier ultérieurement pour obtenir

$$\frac{4 \tanh^2(2\beta J) - 2 \sin^2(\theta) q(\beta J)^2 + 4 \tanh^2(2\beta J) \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}}{\sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2} \left(1 + \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}\right)} \quad (70)$$

maintenant on tente de simplifier la deuxième partie du dénominateur et on obtien que

$$\frac{4 \tanh^2(2\beta J) - 2 + 2 \sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}}{\sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}} = 2 + 2 \frac{2 \tanh^2(2\beta J) - 1}{\sqrt{1 - \sin^2(\theta) q(\beta J)^2}} \quad (71)$$

et donc la forme final.

Q2. Voir le Notebook

Part V — Le Cumulant de Binder

Q1. Dans la phase paramagnétique ($T > T_c$), la distribution de l'aimantation devient gaussienne dans la limite thermodynamique en raison du théorème central limite

$$P(m) \propto \exp\left(-\frac{m^2}{2\sigma^2}\right) \quad (72)$$

où $\sigma^2 = \langle m^2 \rangle$. Pour une distribution gaussienne, les moments pairs sont reliés par

$$\langle m^4 \rangle = 3 \langle m^2 \rangle^2 \quad (73)$$

En substituant cette relation dans l'expression du cumulant de Binder

$$U_L = 1 - \frac{\langle m^4 \rangle_L}{3 \langle m^2 \rangle_L^2} = 1 - \frac{3 \langle m^2 \rangle^2}{3 \langle m^2 \rangle^2} = 0 \quad (74)$$

Q2. Dans la phase ferromagnétique ($T < T_c$), la distribution tend vers

$$P(m) = \frac{1}{2} [\delta(m - m_*) + \delta(m + m_*)] \quad (75)$$

Pour cette distribution on a que $\langle m^2 \rangle = m_*^2$ et que $\langle m^4 \rangle = m_*^4$. D'où

$$U_L = 1 - \frac{m_*^4}{3 m_*^4} = \frac{2}{3} \quad (76)$$

Q3. Voir le Notebook

Q4. Voir le Notebook

Q5. Voir le Notebook

À la température critique, le système présente une invariance d'échelle. Les fonctions de corrélation et les moments de l'aimantation suivent des lois d'échelle universelles. Le cumulant de Binder étant un rapport de moments, il devient indépendant de la taille du système à T_c . Les courbes $U_L(T)$ pour différentes tailles doivent donc se croiser en T_c . Ce croisement fournit une méthode pour déterminer numériquement la température critique.