
Aspects numériques des simulations du modèle de Hubbard — Monte Carlo quantique et méthode d'entropie maximum

Hugo Touchette, David Poulin

Centre de recherche sur les propriétés électroniques des matériaux avancés,

Département de physique, Université de Sherbrooke,

Sherbrooke, Québec, Canada J1K 2R1.

{htouchet,dpoulin}@physique.usherb.ca

24 janvier 2000

Résumé

Nous présentons dans ce rapport une introduction complète à deux algorithmes couramment utilisés en physique du solide dans le cadre du problème à N -corps quantique. Le premier est l'algorithme de Blankenbecler, Scalapino et Sugar (BSS) (aussi appelé algorithme du déterminant), développé au début des années 80 dans le but de calculer numériquement les propriétés thermodynamiques de certains modèles d'électrons fortement corrélés, dont celui de Hubbard, étudié ici comme modèle pour la supraconductivité à haut T_c . Pour cette partie du rapport, notre étude présente d'abord le fonctionnement de l'algorithme pour s'attarder ensuite à certains de ses aspects numériques, en particulier ceux qui sont problématiques au niveau de la stabilité des calculs. Parmi ceux-ci, nous retrouvons les instabilités liées aux calculs à basse température, le choix de la décomposition de Trotter, le calcul des fonctions de Green et des observables à temps inégal, de même que le problème d'ergodicité. En deuxième partie, nous abordons le calcul des propriétés dynamiques du modèle de Hubbard, comme le poids spectral obtenu en prolongeant analytiquement les données Monte Carlo calculées en temps imaginaire. Pour cette section du rapport, nous présentons quelques éléments de la théorie de la régularisation et la méthode d'entropie maximum utilisés pour résoudre le problème numériquement mal posé que constitue le prolongement analytique des données Monte Carlo. Finalement, pour rendre ce rapport complet en soi, nous avons inclut en annexe une introduction à quelques outils d'analyse numérique ainsi qu'un guide de lecture renvoyant à des références de base sur la plupart des sujets traités dans ce rapport.

Table des matières

1	Introduction	6
2	Méthode du déterminant	10
2.1	Décomposition de Trotter	10
2.2	Transformation de Hubbard-Stratonovich	11
2.3	Échantillonnage Monte Carlo	14
2.4	Calculs en pratique	16
2.5	Calculs des statistiques	21
3	Théorie des fonctions de Green	23
3.1	Propriétés	24
3.2	Fonctions de Green à temps égal	25
3.3	Fonctions de Green à temps inégal	27
3.4	Fonctions de Green de Matsubara	30
3.5	Théorème de Wick	31
3.6	Self-énergie	32
4	Instabilités et problèmes numériques	34
4.1	Calculs à basses températures	34
4.2	Ergodicité	37
4.3	Autres aspects numériques	39
5	Propriétés spectrales	42
5.1	Prolongement analytique et problèmes mal posés	42
5.2	Algorithmes et méthodes de régularisation	44
5.3	Méthodes d'inférence bayésienne	45
5.4	Algorithme SVD	47
5.5	Algorithme de Bryan	48
5.6	Algorithme de Meshkov	54
5.7	Comparaison des algorithmes	56
A	Éléments d'analyse numérique matricielle	60
A.1	Normes vectorielle et matricielle	60
A.2	Décomposition en valeurs singulières	61
A.3	Conditionnement	61

B Relations de dispersion pour les électrons libres	64
C Guide de lecture	65

Remerciements

Les auteurs tiennent à remercier très chaleureusement le Professeur André-Marie Tremblay qui leur a offert l'opportunité d'évoluer au sein de son groupe de recherche. Sa grande sagesse, sa connaissance approfondie de la physique et sa porte toujours ouverte ne sont qu'une infime partie des qualités que nous lui reconnaissons. De plus, nous remercions Steve Allen pour de nombreuses conversations stimulantes, le partage de ses idées, de même que pour la lecture et la correction d'une version antérieure du présent travail. Merci également à Samuel Moukouri pour son étroite collaboration, et à Alain Veilleux qui nous a sorti plusieurs fois du pétrin grâce à sa connaissance inégalée de l'informatique. Finalement, nous aimerions remercier, pour leurs nombreux conseils, François Lemay, le Professeur David Sénéchal, Liang Chen et Christian Foisy, ce dernier du centre d'application du calcul parallèle de l'Université de Sherbrooke.

Adresse de correspondance

André-Marie Tremblay
Centre de recherche en physique du solide (CRPS),
Département de physique, Université de Sherbrooke,
Sherbrooke, Québec, Canada, J1K 2R1.
`tremblay@physique.usherb.ca`

Adresse Internet

La page web citée dans le texte renvoie au site suivant. Ce site contient plusieurs détails sur les méthodes de calcul, les programmes et certains résultats numériques.

`www.physique.usherb.ca/~tremblay/david`

1 | Introduction

Dès leur création, les calculateurs électroniques ont joué un rôle important dans la progression de la physique théorique. Depuis, les puissances de calcul se sont vues multipliées par des facteurs astronomiques et pourtant, nos ambitions sont encore limitées par le temps et l'espace mémoire nécessités par certains calculs. En particulier, dans le contexte de la physique de la matière condensée, la résolution exacte de certains problème à N -corps requiert une capacité calculatoire incroyablement élevée pour des systèmes de taille (nombre de corps en interaction) pourtant bien modeste. Pour ce genre de problème, la difficulté principale provient de la dépendance exponentielle des calculs (complexité «computationnelle») en fonction de la taille du système. Par exemple, la diagonalisation exacte d'un système quantique sur réseau non trivial comme le modèle de Hubbard croît approximativement comme $O(e^N)$, ce qui rend les calculs quasi impraticables. Il est donc indispensable de procéder à diverses approximations permettant de rendre la dépendance en taille polynomiale, c-à-d. d'ordre $O(N^p)$.

C'est dans cette optique générale que l'algorithme de Blankenbecler, Scalapino et Sugar (BSS) [23] a été développé au début des années 80 pour calculer les propriétés thermodynamiques de certains hamiltoniens quantiques, dont celui de Hubbard introduit dans le domaine de la supraconductivité à haute température par Anderson en 1987 [2] (voir [12] pour une étude numérique du modèle). Cet algorithme, que nous dénommons aussi «méthode du déterminant» ou «algorithme Monte Carlo quantique» (MCQ), est basé sur une méthode Monte Carlo de calcul stochastique (essentiellement une marche aléatoire dans un espace d'états) qui possède une dépendance polynomiale avec la taille des réseaux étudiés. Malgré cet avantage, il n'en demeure pas moins, cependant, que l'algorithme MCQ possède nombre de problèmes et d'instabilités numériques qui ont suscités beaucoup de recherches au cours de ces dernières années et qui font l'objet de ce travail.

Ce rapport technique présente une introduction complète à l'algorithme BSS, servant ici à l'étude du modèle de Hubbard, ainsi qu'une étude détaillée de plusieurs de ses aspects numériques. Nous nous attardons, en particulier, sur les aspects qui sont problématiques du point de vue de la stabilité des calculs. La division du travail est la suivante. Dans la première section de ce travail, nous introduisons brièvement le modèle de Hubbard pour poursuivre ensuite, dans la section 2, avec la présentation de la méthode du déterminant, de la méthode Monte Carlo et des techniques statistiques utilisées dans les simulations numériques. Suit, dans la section 3, une discussion sur le calcul des fonctions de Green portant principalement sur les instabilités liées aux calculs à basse température et du calcul stable des fonctions de Green à temps inégal. Cette

section contient également en préambule plusieurs éléments importants de la théorie des fonctions de Green en plus de traiter du calcul d'observables (théorème de Wick, susceptibilités diverses et self-énergie). Dans la section 4, nous traitons des instabilités et problèmes numériques, notamment du choix de la décomposition de Trotter et du problème d'ergodicité.

Pour terminer cette «revue numérique» de l'algorithme BSS, nous abordons dans la section 5 le calcul des quantités en fréquences réelles, dites *dynamiques*, que l'on obtient en prolongeant analytiquement les données obtenues du Monte Carlo en temps imaginaire. Comme nous le verrons, ce prolongement analytique des données Monte Carlo se réduit à l'inversion d'une transformée de Laplace et est, en-soi, un problème mal posé ou mal conditionné (*ill-conditionned*), c.-à-d. extrêmement sensible à la qualité des données à inverser et conséquemment, numériquement très instable. Aussi, présentons-nous les moyens conventionnels servant à régulariser une telle procédure et, tout particulièrement, la méthode d'entropie maximum introduite dans ce contexte par Gubernatis (cf. [16] pour les références originales). Nous expliquons en détail trois différentes approches au problème de prolongement analytique et en faisons une brève comparaison.

Finalement, pour rendre ce travail plus complet, nous avons placé en annexes quelques notions utiles à la compréhension de ce rapport, dont quelques éléments sommaires d'analyse numérique, en plus d'un guide de lecture qui situe le niveau de ce travail et qui facilitera, nous l'espérons, une première incursion dans ce domaine.

Hamiltonien de Hubbard

Le modèle quantique que nous allons considérer dans ce travail est celui de Hubbard (2D) représenté par le hamiltonien, écrit en seconde quantification, d'un système bidimensionnel d'électrons évoluant sur un réseau carré de $N_x \times N_y = N$ sites:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}. \quad (1.1)$$

La première somme, effectuée sur la variable de spin $\sigma = \uparrow\downarrow$ (spin $\pm\frac{1}{2}$) et sur les sites premiers voisins $\langle i, j \rangle$ du réseau carré, représente un terme d'énergie cinétique (terme de *saut*) où $c_{i\sigma}^\dagger$ crée un fermion de spin σ au site i , alors que son adjoint $c_{i\sigma}$ détruit un fermion de même spin sur le site i . Les états possibles d'occupation par site sont l'état vide $|0\rangle$, les états d'occupation simple $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$, ainsi que l'état de double occupation $|\uparrow\downarrow\rangle$ (spin opposé par le principe d'exclusion). La deuxième somme, quant à elle, représente l'énergie d'interaction coulombienne intra-site, c.-à-d. qui n'agit que lorsque deux fermions de spins opposés occupent le même site. Ce terme d'interaction non-linéaire, de type *liaisons fortes* [33, 14], est répulsive lorsque $U > 0$ et attractive dans le cas contraire.

Physiquement, la partie cinétique dicte un comportement ondulatoire des électrons (tendance à la délocalisation), et se diagonalise dans l'espace de Fourier ou espace réciproque. Le terme d'interaction, lui, diagonal en coordonnées réelles i, j , est à l'origine du comportement corpusculaire des électrons (tendance à la localisation). En dépit de

la simplicité de ces deux termes, la mise en jeu de ces opérateurs incompatibles, c.-à-d. non-diagonalisables dans la même base, fait en sorte que le hamiltonien de Hubbard révèle une foule de phénomènes coopératifs complexes. Sans entrer dans les détails de ces phénomènes, notons seulement que le modèle de Hubbard constitue un modèle pour le ferromagnétisme, l'antiferromagnétisme, et fort probablement, de façon très simplifiée, de la supraconductivité [33, 14].

Du côté de la supraconductivité, aucun calcul numérique à ce jour ne semble mettre en évidence une phase supraconductrice à $U > 0$. Il faut tout de même se garder de conclure définitivement qu'une telle phase n'existe pas sachant que, d'un point de vue numérique, la mise en évidence de transitions de phase est un problème extrêmement difficile à cause des effets de taille importants. Pour cette raison, plusieurs efforts de recherche se sont concentrés sur le modèle $U < 0$ qui présente, dans le cas limite $U \rightarrow -\infty$, un état supraconducteur résultant de l'appariement des fermions en paires bosoniques $|\uparrow\downarrow\rangle$ (condensation de Bose). Comme le modèle à $U < 0$ ne représente pas une situation physiquement possible, on justifie son étude comme modèle phénoménologique (par opposition à microscopique) d'un mécanisme encore inconnu à l'origine d'une interaction attractive.

Remarques:

1. Le hamiltonien de Hubbard est parfois écrit sous la forme

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) - \mu \sum_{i, \sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i \left(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right). \quad (1.2)$$

Le terme d'interaction de cette forme diffère de la première dans le fait que l'état demi-rempli du modèle (un électron par site, $\langle n_i \rangle = 1$) correspond à $\mu = 0$ (μ est le potentiel chimique ou le paramètre de remplissage), alors que pour la forme (1.1), ce même état correspond à $\mu = U/2$.

2. Une contribution de saut aux seconds voisins $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ peut être incluse avec le terme additionnel suivant [37]

$$K_2 = -t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right). \quad (1.3)$$

3. La plupart des propriétés du hamiltonien (1.1) qui nous occuperont ici résultent de la transformation canonique Lieb-Mattis [13]

$$c_{i\uparrow} \rightarrow c_{i\uparrow}, \quad c_{i\downarrow} \rightarrow (-1)^i c_{i\downarrow}^\dagger. \quad (1.4)$$

Cette transformation permet de passer du modèle répulsif au modèle attractif $H(t, U) \rightarrow H(t, -U) + UN_\uparrow$, en plus de transformer entre elles les observables reliées à la charge $Q \propto n_\uparrow + n_\downarrow$ et au spin $S_z \propto n_\uparrow - n_\downarrow$:

$$n_\uparrow + n_\downarrow \rightarrow n_\uparrow - n_\downarrow + 1 \Rightarrow Q \rightarrow S_z + 1 \quad (1.5a)$$

$$n_\uparrow - n_\downarrow \rightarrow n_\uparrow + n_\downarrow - 1 \Rightarrow S_z \rightarrow Q - 1. \quad (1.5b)$$

Nous verrons plus loin que cette transformation induit une symétrie particulière au niveau des fonctions de Green survenant à $U > 0$ lorsque $t' = 0$ et que le réseau est demi-rempli $\langle n_i \rangle = 1$. On parle dans ce dernier cas de symétrie particule-trou puisqu'il existe à demi-remplissage autant d'électrons que de trous, ces derniers se comportant également comme des fermions.

4. Dans les simulations, des conditions aux limites périodiques $i = N_x + 1 = 1$ et $j = N_y + 1 = 1$ sont adoptées de façon à enrouler le réseau en un tore. De plus, pour fixer les unités, nous utilisons, suivant la littérature courante, la convention $\hbar = k_B = 1$ dans ce travail de même que dans les simulations. L'inverse de la température β est mesuré en unités de $1/t$ alors que le couplage U est mesuré en unités de t .

2 | Méthode du déterminant

L'algorithme du déterminant est utilisé dans le but de calculer la moyenne thermodynamique de diverses quantités physiques d'intérêt. Pour une observable représentée par l'opérateur quantique O , cette moyenne thermodynamique se calcule, au sein de l'ensemble statistique grand canonique, en utilisant la formule bien connue

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr } O e^{-\beta(H-\mu N)}}{\text{Tr } e^{-\beta(H-\mu N)}}, \quad (2.1)$$

où H et N représentent respectivement l'opérateur hamiltonien de Hubbard et l'opérateur de nombre d'occupation (à distinguer du nombre de sites), alors que μ est le potentiel chimique fixant le remplissage du réseau. Cette trace n'est pas évaluée directement; en effet, nous montrons dans cette section-ci comment, en pratique, elle est transformée de façon à ce qu'elle devienne une trace sur des variables classiques (commutantes) par l'introduction d'un champ auxiliaire, puis calculée efficacement et avec une certaine précision à l'aide d'une méthode de calcul stochastique dite de Monte Carlo.

2.1. Décomposition de Trotter

La première simplification que nous effectuons concerne l'opérateur $H - \mu N$ qui peut être décomposé en une partie cinétique K et une partie d'interaction V pour lesquelles nous avons $[K, V] \neq 0$ et donc $e^{K+V} \neq e^K e^V$. Néanmoins, comme e^K et e^V sont facilement diagonalisables, il convient, de façon pratique, de les séparer à l'aide d'une *décomposition de Trotter-Suzuki* [36]:

$$e^{-\beta(K+V)} = \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau(K_l+V_l)} \simeq \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} e^{-\Delta\tau V_l} + O(\Delta\tau^2)N_\tau, \quad (2.2)$$

où $\Delta\tau = \beta/N_\tau$. L'entier N_τ est appelé le *nombre de tranches de temps imaginaires* du fait de l'analogie qui existe entre l'opérateur statistique $e^{-\beta H}$ et l'opérateur d'évolution e^{iHt} . À noter que pour l'instant, l'indice l affublé sur les opérateurs ne spécifie que l'ordre (arbitraire) du produit de ceux-ci.

L'approximation est dite de *premier ordre* parce qu'elle est exacte jusqu'à l'ordre $\Delta\tau$. En effet, le terme résiduel $O(\Delta\tau^2)$ [25, 33] provient évidemment du commutateur $[K, V]$ non-nul, et est la seule erreur systématique de l'algorithme MCQ. Le facteur N_τ devant $O(\Delta\tau^2)$ vient du nombre de fois que le commutateur $[K, V]$ est négligé. Comme

$N_\tau = \beta/\Delta\tau$, l'erreur totale est d'ordre $\Delta\tau$. En pratique, on contourne cette erreur en extrapolant les valeurs des observables pour $\Delta\tau \rightarrow 0$, étant donnée que la décomposition est exacte lorsque $N_\tau \rightarrow \infty$. D'autres types de décomposition d'ordre supérieur sont aussi envisageables; nous y revenons dans la section 4.

2.2. Transformation de Hubbard-Stratonovich

Une simplification supplémentaire de la trace peut être opérée en rendant la partie d'interaction V quadratique en opérateurs de fermions par une transformation de Hubbard-Stratonovich (HS) discrète (cf. [33] pour les références originales). Cette transformation, qui transpose le problème des électrons en interaction (terme non-quadratique) en un problème sans interaction mais avec un champ auxiliaire, peut être vu comme une application de la formule

$$e^{A^2/2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}x^2 - Ax} dx, \quad (2.3)$$

permettant de calculer, à gauche, l'exponentielle d'un terme quadratique ($e^{A^2/2}$) par une intégrale complète sur une variable intermédiaire x (le champ auxiliaire) de termes exponentiels e^{-Ax} linéaires en A [20].

Transformation

De façon plus spécifique, la transformation, dans le cas de l'algorithme MCQ, consiste à introduire un *champ classique auxiliaire* (le champ HS) de variables discrètes réelles $x_{i,l} = \pm 1$ à chaque tranche de temps $l = 1, \dots, N_\tau$ et pour chacun des sites du réseau spatial $i = 1, \dots, N$. On remplace ainsi le réseau spatial de N sites par un réseau espace-temps de NN_τ sites qui reproduit la dynamique fermionique après avoir intégré tous les degrés de liberté du champ auxiliaire. En définissant pour chaque tranche de temps l et chaque site i

$$V_{i,l} = Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} - \mu(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}), \quad (2.4)$$

nous pouvons écrire

$$e^{-\Delta\tau V_i} = e^{-\Delta\tau \sum_i^N V_{i,l}} = \prod_{i=1}^N e^{-\Delta\tau V_i}, \quad (2.5)$$

puisque les opérateurs de nombre commutent. Nous obtenons alors, pour chaque site i, l du réseau espace-temps, un terme de la forme

$$e^{-\Delta\tau V_{i,l}} = e^{-\Delta\tau [U(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) - (\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{U}{4}]} \quad (2.6)$$

sur lequel nous appliquons la *transformation HS discrète* [12]:

$$e^{-\Delta\tau U(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2})} = \begin{cases} e^{-\Delta\tau \frac{U}{4} \frac{1}{2}} \sum_{x_{i,l} = \pm 1} e^{\lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow})}, & U > 0 \\ e^{-\Delta\tau \frac{U}{4} \frac{1}{2}} \sum_{x_{i,l} = \pm 1} e^{\lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)}, & U < 0 \end{cases} \quad (2.7)$$

avec $x_{i,l} = \pm 1$. Le paramètre λ est fixé par $\cosh(\lambda) = e^{\Delta\tau|U|/2}$, ou les formules équivalentes

$$\tanh^2(\lambda) = \tanh(\Delta\tau|U|/4), \quad \lambda = \ln(e^{\Delta\tau|U|/2} + \sqrt{e^{\Delta\tau|U|} - 1}). \quad (2.8)$$

Par cette transformation, on voit que l'interaction coulombienne à deux corps est remplacée par une interaction à un corps quadratique en opérateurs de fermions

$$Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \rightarrow \begin{cases} \lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}), & U > 0 \\ \lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1), & U < 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

qui a pour effet de coupler le champ HS avec la composante nette du spin ($n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}$) ou la charge nette ($n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}$) selon le signe de l'interaction U .

Calcul de la trace

Suivant les étapes de la section précédente, nous pouvons écrire la fonction de partition sous la forme

$$Z = \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\Delta\tau[U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})]} \quad (2.10a)$$

$$= \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\Delta\tau[U(n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}) - (\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) - \frac{U}{4}]}, \quad (2.10b)$$

qui devient, par la transformation de Hubbard-Stratonovich pour $U < 0$ (le cas $U > 0$ est similaire),

$$Z = \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\Delta\tau \frac{U}{4}} \sum_{x_{i,l}=\pm 1} e^{\lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)} e^{\Delta\tau(\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} e^{\Delta\tau \frac{U}{4}}. \quad (2.11)$$

Maintenant, en utilisant l'identité suivante:

$$\prod_l^{N_\tau} \prod_i^N \sum_{x_{i,l}=\pm 1} e^{x_{i,l}} = \prod_l^{N_\tau} \left(e^{x_{1,l}^+} + e^{x_{1,l}^-} \right) \left(e^{x_{2,l}^+} + e^{x_{2,l}^-} \right) \dots \left(e^{x_{N,l}^+} + e^{x_{N,l}^-} \right) \quad (2.12a)$$

$$= \sum_{\{x_{i,l}\}} \prod_l^{N_\tau} \prod_i^N e^{x_{i,l}}, \quad (2.12b)$$

nous pouvons réorganiser la somme sur la variable $x_{i,l}$ en une somme sur toutes les configurations $\{x_{i,l}\}$ du réseau espace-temps:

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{\lambda x_{i,l}(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} - 1)} e^{\Delta\tau(\mu - \frac{U}{2})(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})} \quad (2.13a)$$

$$= \sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\lambda x_{i,l} e^{(n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow})[\lambda x_{i,l} + \Delta\tau(\mu - \frac{U}{2})]}}, \quad (2.13b)$$

qui devient, en séparant les composantes de spin,

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l} \prod_i^N e^{-\lambda x_{i,l}} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} e^{n_{i,\sigma} V_{i,l}^\sigma}, \quad (2.14)$$

où $V_{i,l}^\sigma = \lambda x_{i,l} + \Delta\tau(\mu - U/2)$. Comme la trace est faite sur les variables fermioniques, le terme contenant la variable HS peut être mis en évidence, ce qui nous laisse

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \text{Tr} \prod_l^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l^\sigma} \prod_i^N e^{n_{i,\sigma} V_{i,l}^\sigma}, \quad (2.15)$$

ayant défini

$$S = \prod_l^{N_\tau} \prod_i^N e^{-\lambda x_{i,l}} = \exp\left(-\lambda \sum_l^{N_\tau} \sum_i^N x_{i,l}\right). \quad (2.16)$$

Finalement, en développant les opérateurs K_l et $n_{i,\sigma}$ en opérateurs de seconde quantification [33], nous obtenons

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \text{Tr} \left[\prod_l^{N_\tau} D_l^\sigma(\{x_{i,l}\}) \right], \quad (2.17)$$

où

$$D_l^\sigma(\{x_{i,l}\}) \equiv e^{-\Delta\tau c_{i,\sigma}^\dagger K_{ij} c_{j,\sigma}} e^{c_{i,\sigma}^\dagger (V_l^\sigma)_{ij} c_{j,\sigma}}, \quad (2.18)$$

et $K_{ij} = -t$ pour i, j premiers voisins. Dans le présent contexte, l'opérateur $D_l^\sigma(\{x_{i,l}\})$ constitue un opérateur d'évolution de la tranche de temps imaginaire $l-1$ à la tranche l , séparée de la première par un intervalle de temps $\Delta\tau$. L'opérateur d'évolution en temps imaginaire de la tranche l_2 à l_1 est défini par

$$U^\sigma(l_1, l_2) = D_{l_1}^\sigma \dots D_{l_2+1}^\sigma. \quad (2.19)$$

Avec cette définition, nous pouvons écrire

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \text{Tr} [U^\sigma(N_\tau, 0)]. \quad (2.20)$$

Comme dernière simplification, on peut démontrer, suivant [33, p.139], que la trace sur les variables fermioniques se ramène à un déterminant, de sorte que la fonction de partition devient

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} S \prod_{\sigma=\pm 1} \det[1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \dots B_1^\sigma] \quad (2.21)$$

où

$$B_l^\sigma = e^{-\Delta\tau K} e^{V_l^\sigma} \quad (2.22a)$$

$$K_{ij} = -t, \quad i, j \text{ premiers voisins}, \quad (2.22b)$$

$$(V_l^\sigma)_{ij} = \begin{cases} \delta_{ij} [\sigma \lambda x_{i,l} + \Delta\tau(\mu - U/2)], & U > 0 \\ \delta_{ij} [\lambda x_{i,l} + \Delta\tau(\mu - U/2)], & U < 0. \end{cases} \quad (2.22c)$$

À noter que la somme intervenant dans l'éq.(2.21) est effectuée sur toutes les configurations possibles du champ HS, et que 1 représente la matrice identité $N \times N$. Remarquons aussi à ce point que l'évaluation de la trace sur les variables fermioniques a eu pour effet de remplacer l'opérateur K par une matrice $N \times N$ symétrique, que nous noterons encore par K , alors que V_l^σ représente la matrice d'interaction qui est diagonale. En considérant une interaction positive, il faut se rappeler que $S = 1$.

Valeurs moyennes

Nous démontrons ici que le *poids statistique* $\pi(\{x_{i,l}\})$, aussi appelé poids thermodynamique ou poids de Boltzmann, associé à une configuration $\{x_{i,l}\}$ particulière est donnée à $U > 0$ par

$$\pi(\{x_{i,l}\}) = \prod_{\sigma=\pm 1} \det[1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \dots B_1^\sigma]. \quad (2.23)$$

En effet, à l'aide de la fonction de partition écrite sous la forme (2.21), la valeur moyenne, au sens thermodynamique, d'une observable O se réduit à

$$\langle O \rangle = \frac{\sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} O \prod_{\sigma=\pm 1} U^\sigma(N_\tau, 0)}{\sum_{\{x_{i,l}\}} \text{Tr} \prod_{\sigma=\pm 1} U^\sigma(N_\tau, 0)} = \frac{\sum_{\{x_{i,l}\}} \langle O \rangle_{\{x\}}^0 \pi(\{x_{i,l}\})}{\sum_{\{x_{i,l}\}} \pi(\{x_{i,l}\})}, \quad (2.24)$$

où $\langle O \rangle_{\{x\}}^0$ dénote la valeur moyenne, au sens quantique, de l'opérateur O pour une configuration donnée du champ HS (champ sans interaction d'où l'indice supérieur 0):

$$\langle O \rangle_{\{x\}}^0 = \frac{\text{Tr} O \prod_{\sigma=\pm 1} U^\sigma(N_\tau, 0)}{\text{Tr} \prod_{\sigma=\pm 1} U^\sigma(N_\tau, 0)}. \quad (2.25)$$

2.3. Échantillonnage Monte Carlo

Le problème que nous devons résoudre maintenant consiste à évaluer des valeurs moyennes de la forme (2.24) ou, tout simplement, une somme telle que

$$A = \sum_x a(x) \wp(x), \quad (2.26)$$

sur un ensemble de valeurs x correspondant aux configurations $\{x_{i,l}\}$ ($a(x)$ correspond à l'observable à calculer et $\wp(x) = \pi(\{x_{i,l}\})$). La difficulté majeure que l'on rencontre en tentant d'évaluer cette somme est la taille gigantesque du domaine de définition de la variable x . Dans le cas qui nous occupe, chaque variable du réseau espace-temps peut prendre les valeurs ± 1 , ce qui fait qu'il existe au total 2^{NN_τ} configurations possibles du champ HS pour lesquelles $a(x)$ et $\wp(x)$ doivent être évalués si l'on désire calculer

A exactement. Évidemment, un tel problème, de complexité exponentielle en N et N_τ dans le pire des cas, est hors de portée numériquement tout comme l'est d'ailleurs le problème original du calcul de la trace sur les états quantiques!

Pour sortir de cette impasse, nous optons pour un calcul approximatif de A en nous restreignant à un sous-ensemble *représentatif* de l'ensemble complet des configurations du champ. Le problème, dans ce cas, se réduit à choisir les valeurs du sous-ensemble représentatif dont la taille sera fonction de ce que nous entendons par approximation. Plus précisément, étant donnée $\delta > 0$, comment choisir efficacement les valeurs de x nous permettant d'obtenir $\tilde{A} = A_{\text{exacte}} \pm \delta$? Une première méthode, dans ce sens, consisterait à considérer x comme une variable aléatoire, notée usuellement X , qui serait échantillonnée aléatoirement sur un intervalle donné pour les calculs jusqu'à ce que l'erreur statistique sur A devienne inférieure à δ (algorithme de type *Monte Carlo* direct). Cette méthode n'est cependant pas la plus efficace pour des questions de convergence [15], pas plus que ne l'est celle qui consisterait à générer toutes les configurations dans un ordre prédéterminé. En pratique, on utilise plutôt une variation de la méthode Monte Carlo proposée par Metropolis, Rosenbluth, Rosenbluth, Teller et Teller ($M(RT)^2$) (voir [15] pour les références originales). L'algorithme $M(RT)^2$ consiste à calculer la somme (2.26) en parcourant le domaine de X à la manière d'une marche aléatoire en générant récursivement des échantillons x pour décider, au fur et à mesure du processus de génération, lesquels sont acceptés ou rejetés selon leur importance statistique. Les règles régissant la génération et la sélection des échantillons sont les suivantes: étant donnée une valeur x (état présent ou effectif) et sa mesure statistique $\wp(x)$, nous générons, par un moyen arbitraire déterministe ou aléatoire, une deuxième valeur test x' que l'on accepte avec une certaine probabilité $P(x \rightarrow x') = P(x'|x)$. Si la valeur test est acceptée (le choix s'effectue en comparant $P(x'|x)$ à un nombre aléatoire η uniformément distribué dans l'intervalle $[0, 1]$ et on accepte x' si $\eta < P$), elle devient la valeur effective $x \rightarrow x'$ pour une prochaine itération de l'algorithme. Les échantillons acceptés forment ainsi une chaîne

$$\{x\}_M = \{x_1 \rightarrow x_2 \rightarrow \dots \rightarrow x_M\} \quad (2.27)$$

de M valeurs reliées entre elles par une fonction de transition $P(x'|x)$ choisie de façon à ce que la fréquence d'apparition des x converge vers la distribution de probabilité recherchée (distribution cible), c.-à-d.,

$$\wp(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \#(x \in \{x\}_M). \quad (2.28)$$

La séquence générée peut ainsi être utilisée dans le calcul de valeurs moyennes en utilisant la formule

$$A = \sum_x a(x) \wp(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M a(x_j) \quad (2.29)$$

qui ne fait intervenir aucune probabilité (*biased sampling*). Le nombre M de configurations acceptées est fixé de façon à ce la différence entre les valeurs moyennes (2.26) et (2.29) soit comprise dans un intervalle $\pm \delta \rightarrow 0$ (limite thermodynamique).

Il existe plusieurs choix pour la probabilité de transition $P(x'|x)$ menant au calcul de la distribution cible $\wp(x)$ (en fait il en existe une infinité). D'un point de vue physique, le choix de cette probabilité de transition est dicté par la condition *de bilan détaillé*

$$P(x'|x)\wp(x) = P(x|x')\wp(x') \quad (2.30)$$

exprimant le fait qu'à l'approche de l'équilibre $\frac{1}{M} \#(x \in \{x\}_M) \simeq \wp(x)$, la probabilité que la marche aléatoire passe à x' partant de x est tout aussi probable, en moyenne, que le mouvement inverse [15, 4]. Il est facile de vérifier que le choix

$$P(x'|x) = \min(1, r), \quad r = \frac{\wp(x')}{\wp(x)}, \quad (2.31)$$

proposé originalement par M(RT)² satisfait le critère de bilan détaillé. L'une des formes alternatives couramment utilisée, satisfaisant aussi le critère (2.30), est la distribution de *bain de chaleur*

$$P(x'|x) = \frac{r}{1+r}, \quad (2.32)$$

aussi appelée *algorithme de Baker* [4].

Remarque:

1. En théorie des chaînes de Markov, la fonction de transition $P(x'|x)$ définit une chaîne de Markov homogène et discrète sur les valeurs x . Dans ce contexte, il est possible de démontrer [15] que l'équation de bilan détaillé ne constitue pas une condition suffisante pour que la fréquence des valeurs de la chaîne $\{x\}_M$ converge vers $\wp(x)$ lorsque $M \rightarrow \infty$. Pour qu'il en soit ainsi, il faut démontrer que toute distribution initiale sur les états converge vers une distribution limite *unique*. En termes plus techniques, il faut que la chaîne de Markov soit ergodique, au sens des chaînes de Markov, c.-à-d. irréductible et apériodique. Dans ce cas, la condition de bilan détaillée nous assure que la distribution $\wp(x)$ est bien la distribution d'équilibre satisfaisant $\sum_x P(x'|x)\wp(x) = \wp(x')$.

2.4. Calculs en pratique

Nous sommes maintenant en possession de tous les éléments nous permettant de procéder à la description de l'algorithme BSS. Toutefois, avant de passer à cette étape, nous allons établir quelques notations et résultats qui seront utilisés pour simplifier les calculs numériques.

Notons tout d'abord que la fonction de partition peut être mise sous la forme ($U > 0$)

$$Z = \sum_{\{x_{i,l}\}} \prod_{\sigma=\pm 1} \det \left[(G^\sigma)^{-1} \right] \quad (2.33)$$

où G^σ est une matrice $N_\tau \times N_\tau$ composée des sous-matrices B_l^σ de taille $N \times N$:

$$G^\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -B_{N_\tau}^\sigma \\ -B_1^\sigma & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -B_2^\sigma & 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -B_{N_\tau-1}^\sigma & 1 \end{pmatrix}^{-1} \quad (2.34)$$

Cette matrice constitue une *fonction de Green* qui, comme nous l'avons vu plus haut (opérateur U , éq.2.19), joue le rôle de propagateur dans l'espace-temps pour le problème des électrons sans interaction. Comme nous serons à même d'approfondir dans la prochaine section, cette fonction, à elle seule, sert au calcul de toute observable exprimée au moyen des opérateurs de fermions. Sans présager de cet aspect de G , remarquons seulement pour l'instant que

$$(G^\sigma)_{l_1=1, l_2=1} = G^\sigma(l_1 = 1, l_2 = 1) = [1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \cdots B_1^\sigma]^{-1}, \quad (2.35)$$

$G^\sigma(l_1, l_2)$ étant une matrice $N \times N$.

Remarques:

1. De façon générale, les éléments de G , que nous désignons aussi sous le terme fonctions de Green, sont notés

$$G^\sigma(l_1, l_2) = (G^\sigma)_{l_1, l_2}, \quad (2.36)$$

avec $l_1, l_2 \in [1, N_\tau]$.

2. Nous avons assigné l'expression $(1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \cdots B_1^\sigma)^{-1}$ à la fonction de Green $l_1 = l_2 = 1$ (temps égal). Cette même fonction est associée dans [33] à la tranche 0, sans pourtant que cette tranche n'existe selon la définition de l . Il faut savoir dans ce cas que cette dernière notation considère le 0 comme un indice de temps imaginaire prenant les valeurs $[0, N_\tau]$. Nous établissons cette distinction plus en détail dans la prochain section.

Au niveau de l'algorithme [32], c'est la matrice $e^{-\Delta\tau K}$ (dénotée dans le programme par H) et les matrices $e^{V_l^\sigma}$ (VUP et VDWN pour les deux composantes de spin) qui sont utilisées dans les calculs numériques. L'exponentielle de K peut être calculée de plusieurs façons [20, 11]: soit de façon directe en utilisant des algorithmes de diagonalisation (TRED, TQLI de la librairie EISPACK) ou bien, indirectement sachant que le terme cinétique est diagonal dans l'espace de Fourier. Dans les deux cas, nous nous trouvons à factoriser la matrice K selon $K = \Lambda^T \text{diag}(\varepsilon_k) \Lambda$ dans le but d'obtenir la matrice de *saut*

$$e^{-\Delta\tau K} = \Lambda^T \text{diag}(e^{-\Delta\tau\varepsilon_k}) \Lambda, \quad (2.37)$$

les ε_k étant les énergies propres des fermions libres (voir annexe), et Λ la matrice composée des vecteurs propres associés à ces valeurs propres.

Dans le programme présentement utilisé, la diagonalisation du terme cinétique s'effectue de façon indirecte à partir de sa forme analytique dans l'espace de Fourier. Ceci nous permet d'inclure facilement un terme t' de saut aux seconds voisins difficilement traitable par la méthode des matrices éparses [33, 37]. Nous modifions, en plus, la définition de l'interaction afin que le potentiel chimique se retrouve dans la matrice de hopping:

$$\varepsilon_k(t_x, t_y, t') \rightarrow \varepsilon_k(t_x, t_y, t') - \mu. \quad (2.38)$$

On fixe ainsi le demi-remplissage à $\mu = 0$, contrairement à la forme (2.22c) avec laquelle le demi-remplissage est atteint lorsque $\mu = U/2$. Pour ce qui est des matrices d'interaction définies pour chaque tranche de temps et pour les composantes de spin, seuls les N éléments diagonaux $(e^{V_i^\sigma})_i = e^{(V_i^\sigma)_i}$ sont conservés dans un vecteur de dimensions N . Les matrices VUP et VDWN contiennent la totalité de l'information qui nous permet de reproduire les configurations du champ auxiliaire. Pour des raisons pratiques cependant, nous définissons une matrice supplémentaire de taille $N \times N_\tau$, la matrice SPIN composée de ± 1 , donnant directement l'état du champ HS.

La mise à jour d'une fonction de Green après le basculement d'une variable du champ HS est facilement calculable à partir de la matrice \mathbf{G} . En effet, soit les configurations $\{x_{i,l}\}$ et $\{x'_{i,l}\}$, auxquelles sont associées les fonctions de Green \mathbf{G} et \mathbf{G}' (on omet l'indice de spin). On peut dériver, à l'aide de formules analogues à celles de Morrison-Woodbury-Shermann [33, 38], la formule suivante:

$$\mathbf{G}' = (e^{-V'+V})\mathbf{G} - (e^{-V'+V})\mathbf{G} \left[1 - e^{-V+V'} \right] \mathbf{G}'. \quad (2.39)$$

Si $\{x_{i,l}\}$ et $\{x'_{i,l}\}$ ne diffèrent que d'une seule variable $x_{i,l} = -x'_{i,l}$ (basculement unique), la relation précédente se réduit à (somme sur les indices répétés)

$$G'_{mn} = G_{mn} + (G_{mi} + \delta_{mi}) \left[\left(e^{(V'_i)_{ii} - (V_i)_{ii}} - 1 \right) \frac{1}{1 + (G_{ii} - 1) \left(1 - e^{(V'_i)_{ii} - (V_i)_{ii}} \right)} \right] G_{in}. \quad (2.40)$$

du fait que la matrice $[1 - e^{-V+V'}]$ ne contient qu'un élément non-nul sur sa diagonale à la position (i, l) [33, p.547-550]. Dans cette dernière équation, $G_{ij} = (G(l, l))_{ij}$. Au niveau de l'algorithme, cette dernière expression est extrêmement utile étant donné qu'elle nous permet de calculer la fonction de Green sans recourir à des produits matriciels, contrairement à l'éq.(2.35). Dans la même lignée, il est possible de calculer le rapport des déterminants des fonctions de Green G et G' à l'aide de la relation suivante:

$$R \equiv \frac{\det(G)}{\det(G')} = 1 + [G(l, l) - 1]_{ii} [1 - e^{-V+V'}]_{ii}, \quad (2.41)$$

que l'on dérive à partir de l'éq.(2.40), sachant que $\det(AB) = \det(A)\det(B)$.

Remarque:

1. L'expression complète de R , en tenant compte de l'indice de spin, est

$$R_{\uparrow}R_{\downarrow} = \frac{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det \left[(G'^{\sigma})^{-1} \right]}{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det \left[(G^{\sigma})^{-1} \right]} \quad (2.42)$$

à $U > 0$. Pour une interaction attractive, $U < 0$, il faut en plus introduire le facteur S de l'éq.(2.16)

$$R_{\uparrow}R_{\downarrow} = \frac{e^{-\lambda x'_{i,l}} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G'^{\sigma})^{-1}]}{e^{-\lambda x_{i,l}} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G^{\sigma})^{-1}]} = e^{2\lambda x_{i,l}} \frac{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G'^{\sigma})^{-1}]}{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G^{\sigma})^{-1}]} \quad (2.43)$$

Passons maintenant à la description de l'algorithme.

Algorithme. Pseudo-code approximatif du programme `hubb.f`.

```

Initialisation
DO  $nmes = 1, nsweep + nwarm$ 
  DO  $l = 1, N_{\tau}$ 
    IF(mod( $l, nmodul$ ) = 1) THEN
      Calcul de  $G(l, l)$ 
      IF( $l = 1$  et  $nmes > nwarm$ ) THEN
        Calcul des observables + fcts Green à temps inégal
      END IF
    ELSE
      Enroulement de  $G(l, l)$ 
    END IF
  DO  $i = 1, N$ 
    Balayage ( $i, l$ ) du champ HS
  END DO
END DO

```

1. *Initialisation.* La toute première étape du programme consiste à calculer la matrice de hopping (2.37), qui demeure constante tout au long d'une simulation, ainsi qu'à initialiser le registre **SPIN** à partir duquel on calcule les matrices d'interaction (2.22c) (**VUP** et **VDWN**). Le champ HS est initialisé soit à partir d'une configuration archivée ou aléatoirement à l'aide d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires.
2. *Génération et échantillonnage des configurations.* Débute ensuite la simulation en tant que telle qui consiste à balayer $nmes + nwarm$ fois le réseau espace-temps. Ici, $nmes$ est le nombre de mesures Monte Carlo, c.-à-d. le nombre de fois qu'on mesure une observable sur une configuration du champ auxiliaire, et $nwarm$ et le

nombre d'itérations de *thermalisation* servant à amener graduellement le réseau HS à la température désirée partant de la configuration initiale aléatoire ($\beta \rightarrow 0$) [37, figs. 3.5, 3.7].

Le balayage des sites procède comme suit: partant de la première tranche de temps ($l = 1$), nous calculons la fonction de Green

$$G^\sigma(1, 1)_{ij} = \left[\frac{1}{1 + B_{N_\tau}^\sigma B_{N_\tau-1}^\sigma \dots B_1^\sigma} \right]_{ij}, \quad (2.44)$$

puis visitons un à un les sites de l'espace réel $i = 1, \dots, N$. Pour chacun des sites, nous tentons un basculement $x_{i,l} \rightarrow -x_{i,l}$ qui est accepté selon la probabilité (bain de chaleur)

$$P(x_{i,l} \rightarrow -x_{i,l}) = \frac{|R_\uparrow R_\downarrow|}{1 + |R_\uparrow R_\downarrow|}, \quad (2.45)$$

où R_σ est donné par la formule (2.41) dans laquelle nous avons restauré l'indice de spin. Si le basculement est accepté, nous recalculons la fonction de Green à partir de l'équation (2.40). Dans le cas contraire, nous passons au site suivant.

Lorsque tous les sites d'une tranche de temps ont été visités, nous passons à la tranche de temps suivante. Pour cette tranche (l), nous avons besoin de la fonction de Green que nous calculons à partir de la formule suivante:

$$G^\sigma(l, l)_{ij} = \left[\frac{1}{1 + B_{l-1}^\sigma B_1^\sigma B_{N_\tau}^\sigma \dots B_l^\sigma} \right]_{ij}, \quad (2.46)$$

ou bien, par la formule dite d'*enroulement*

$$G^\sigma(l + 1, l + 1) = B_l^\sigma G^\sigma(l, l) (B_l^\sigma)^{-1}. \quad (2.47)$$

Ce dernier calcul nécessite moins d'opérations matricielles que la formule (2.46) mais est beaucoup plus instable numériquement étant donnée sa forme itérative. Ainsi, en pratique, on calcule les fonctions de Green par enroulement sauf en un certain nombre de tranches de temps imaginaire, à tous les *nmodul* tranches pour être plus précis, où le calcul s'effectue de façon stable à partir de l'expression (2.46).

3. *Calcul des observables.* Après stabilisation, on procède au calcul d'une liste prédéterminée d'observables (moyenne $\langle \cdot \rangle_{\{x\}}^0$) sur une tranche spécifique quelconque, ici $l = 1$. Le choix de cette tranche est totalement arbitraire (remarque §3.2), et le fait que les observables ne soient calculées qu'à cette tranche a pour but de décorrélérer les moyennes obtenues par rapport à des observables qui seraient calculées à toutes les tranches. Les configurations du champ HS, rappelons-le, sont générées par des basculements successifs de $x_{i,l}$, induisant une grande corrélation statistique entre les fonctions de Green successives $G(l, l)$ et $G(l + 1, l + 1)$.

Cette section du programme commande aussi le calcul des fonctions à temps inégal à partir desquelles nous calculons toutes les observables dynamiques (section 3).

2.5. Calculs des statistiques

Pour une observable O , un calcul Monte Carlo génère une série de L données $\{O\}_L = \{O(x_1), O(x_2), \dots, O(x_L)\} = \{O_1, O_2, \dots, O_L\}$ (mesures brutes) correspondant aux valeurs $\langle O \rangle_{\{x\}}^0$ prises sur L configurations du champ HS. À partir de ces données, plusieurs quantités statistiques peuvent être obtenues. D'abord, nous pouvons calculer la *valeur moyenne Monte Carlo* (moyenne thermodynamique)

$$\langle O \rangle_{\text{mc}} = \frac{1}{L} \sum_{j=1}^L O(x_j). \quad (2.48)$$

La *variance* associée à cette moyenne est calculée par

$$\text{var}(O) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (O_i - \langle O \rangle)^2 \quad (2.49)$$

alors que l'*écart-type* est défini comme $\sigma = \sqrt{\text{var}(O)}$.

Remarques:

1. Formellement, le facteur $L - 1$ devrait apparaître dans l'expression de la variance au lieu du facteur L . Toutefois, comme nous traitons un grand nombre de mesures (typiquement plus de 100 000), on peut faire l'approximation $L - 1 \simeq L$ afin de calculer la variance.
2. Dans le programme `hubb.f` on calcule la variance en évaluant

$$\text{var}(O) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L O_i^2 - \left(\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L O_i \right)^2 \quad (2.50)$$

au lieu d'utiliser l'expression (2.49) qui suppose le calcul préalable de $\langle O \rangle$.

Ce qu'il y a d'important à noter au sujet des statistiques est que l'écart-type ne constitue pas, en général, une mesure significative de l'erreur Monte Carlo sur la valeur $\langle O \rangle$. En fait, par le théorème de la limite centrale appliqué au processus Monte Carlo, l'erreur est plutôt donnée par $\sqrt{\text{var}(O)/N}$ si les données O_i sont statistiquement indépendantes et distribuées normalement [15, 4]. À l'opposé, si les données sont complètement dépendantes, l'erreur est $\sqrt{\text{var}(O)}$. En pratique, les valeurs O_i ne sont ni complètement dépendantes, ni complètement indépendantes statistiquement du fait que les configurations générées au cours d'une simulation ne le sont pas non plus; en effet, chaque configuration est obtenue d'une autre par le renversement d'une variable $x_{i,l}$ et on passe de l'une à l'autre par l'intermédiaire d'un nombre pseudo-aléatoire. On peut vérifier par contre que l'hypothèse des données distribuées normalement est valide

dans la plupart des cas, exception faite des simulations où l'on retrouve le problème d'ergodicité (chapitre 4).

Subsiste tout de même le problème de l'indépendance statistique des données que l'on contourne efficacement en utilisant deux stratégies. La première consiste, comme nous l'avons noté plus haut, à mesurer les observables sur des tranches de temps relativement éloignées l'une de l'autre. La deuxième consiste, quant à elle, à regrouper les mesures brutes $\{O_1, \dots, O_L\}$ en blocs (*bins*) de K mesures ($L \bmod K = 0$) moyennées entre elles pour obtenir L/K nouvelles mesures $\{O'_1, \dots, O'_{L/K}\}$ moins corrélées. Le choix de K dépend d'une foule de facteurs: la taille et les paramètres des simulations, le nombre de mesures L , pour ne citer quelques exemples (se référer à [33] et à la page web pour plus de précisions).

3 | Théorie des fonctions de Green

Formellement, une fonction de Green est une moyenne quantique ou thermodynamique d'opérateurs de seconde quantification (opérateurs de champ) de la forme $\langle c(t)c^\dagger(t') \rangle$ ou $\langle c^\dagger(t')c(t) \rangle$, t' et t étant des instants arbitraires. En théorie quantique, ces temps sont réels et on interprète $\langle c(t)c^\dagger(t') \rangle$ comme l'amplitude de probabilité qu'une particule créée par $c^\dagger(t')$ à un instant t' soit annihilée plus tard à un instant t ; la particule se propage de t' à t et on parle ainsi de propagateur (l'interprétation de $\langle c^\dagger(t')c(t) \rangle$ est quelque peu différente, [34]). En physique statistique, comme seules des moyennes thermodynamiques stationnaires, et donc indépendantes du temps, sont considérées, la notion de temps perd un peu de son sens. Cependant, en vertu de l'analogie entre les opérateurs $e^{-\beta H}$ et e^{iHt} notée auparavant, il est tout même possible de définir un temps imaginaire fictif en considérant le point de vue de Heisenberg des opérateurs [33, 1]. Selon ce point de vue, nous pouvons définir les opérateurs

$$c_{i,\sigma}(\ell) = e^{\ell\Delta\tau(H-\mu N)} c_{i,\sigma} e^{-\ell\Delta\tau(H-\mu N)} \quad (3.1a)$$

$$c_{i,\sigma}^\dagger(\ell) = e^{\ell\Delta\tau(H-\mu N)} c_{i,\sigma}^\dagger e^{-\ell\Delta\tau(H-\mu N)}, \quad (3.1b)$$

à partir desquels est définie la *fonction de Green en temps imaginaire*

$$G^\sigma(\ell_1, \ell_2)_{ij} = \left\langle T_i c_{i,\sigma}(\ell_1) c_{j,\sigma}^\dagger(\ell_2) \right\rangle_{\{x\}}^0 = \begin{cases} \left\langle c_{i,\sigma}(\ell_1) c_{j,\sigma}^\dagger(\ell_2) \right\rangle_{\{x\}}^0, & \ell_1 > \ell_2 \\ -\left\langle c_{j,\sigma}^\dagger(\ell_2) c_{i,\sigma}(\ell_1) \right\rangle_{\{x\}}^0, & \ell_2 > \ell_1 \end{cases}. \quad (3.2)$$

Dans cette équation, T_i est l'*opérateur d'ordre chronologique*

$$TA(t_1)B(t_2) = \begin{cases} A(t_1)B(t_2), & t_1 > t_2 \\ B(t_2)A(t_1), & t_1 < t_2 \end{cases}, \quad (3.3)$$

On définit aussi les fonctions de Green en temps imaginaire sous la forme suivante:

$$G^\sigma(\tau)_{ij} = \begin{cases} \left\langle c_{i,\sigma}(\tau) c_{j,\sigma}^\dagger \right\rangle_{\{x\}}^0, & \tau > 0 \\ -\left\langle c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}(\tau) \right\rangle_{\{x\}}^0, & \tau < 0. \end{cases}, \quad (3.4)$$

avec $\tau = \ell_1 - \ell_2 \in [-\beta, \beta]$. Cette forme est justifiée par certaines propriétés des fonctions de Green énoncées dans la section suivante.

Remarque:

1. Nous avons introduit dans la définition précédente l'*indice de temps* ℓ que l'on doit distinguer de l'*indice de tranche de temps* l . La différence entre ces deux variables réside dans le fait que la valeur $\ell = 0$ est permise pour rendre compte de cas $c_{i,\sigma}(0) = c_{i,\sigma}$, alors que $l \in \{1, \dots, N_\tau\}$ par définition (voir remarque §3.2 pour plus de détails).

Par analogie avec l'interprétation des fonctions de Green en temps réel, on interprète l'éq.(3.2) comme le propagateur d'un fermion se déplaçant sur le champ libre HS. Notons toutefois que cette interprétation ne doit pas être prise trop littéralement pour la simple raison que le champ HS n'est pas un champ physique; il ne constitue qu'un champ fictif ayant pour but de transformer l'interaction entre les fermions par une interaction avec un champ classique reproduisant la dynamique quantique du problème par l'entremise d'une trace sur les configurations $\{x_{i,l}\}$. Cette remarque étant faite, notons, ou rappelons plutôt, qu'il existe deux niveaux de fonctions de Green, tout comme il existe deux niveaux de moyennes: le premier est une moyenne quantique calculée pour une configuration particulière du champ HS (définition ci-haut faisant intervenir $\langle \cdot \rangle_{\{x\}}^0$), alors que le deuxième réfère à la moyenne des ces fonctions évaluée sur toutes les configuration du champ (moyenne thermodynamique $\langle \cdot \rangle$). Au risque de brouiller cette distinction, mais pour simplifier la notation, nous délaissions l'indice supérieur 0 et l'indice $\{x\}$ sur la moyenne de $G(l_1, l_2)$ et nous désignons les fonctions de Green thermodynamiques aussi par G .

3.1. Propriétés

Les fonctions de Green satisfont plusieurs propriétés. Nous en mentionnons ici quelques unes qui sont démontrées en partie dans [33, 34]. Il est à noter que toutes ces propriétés, à l'exception faite de l'anticommutateur, de l'invariance sous rotation dans le cas $U < 0$, et de la propriété cyclique de la trace sont vérifiées au niveau des moyennes Monte Carlo.

1. *Invariance sous translation du temps.* $G(\tau_1, \tau_2)$ est une fonction qui ne dépend que de la différence de temps $\tau = \tau_1 - \tau_2 \in [-\beta, \beta]$, c.-à-d.,

$$G(\tau_1, \tau_2) = G(\tau, 0) \equiv G(\tau). \quad (3.5)$$

2. *Propriété cyclique de la trace* (temps égal). Pour $1 \leq n < N_\tau$,

$$G(N_\tau + n, N_\tau + n) = G(n, n). \quad (3.6)$$

3. *Condition d'antipériodicité* (temps inégal). $-\beta < \tau < 0$,

$$G(0^\pm + \tau) = -G(\beta^\pm + \tau). \quad (3.7)$$

4. *Anticommutateur.*

$$G(\tau = 0^+) - G(\tau = 0^-) = 1 \quad (3.8)$$

5. *Invariance sous rotation du spin.* Pour $U < 0$ ou $\langle n \rangle = 1$,

$$G^\uparrow(\{x_{i,l}\}) = G^\downarrow(\{x_{i,l}\}). \quad (3.9)$$

La condition d'antipériodicité et l'anticommutateur sont illustrées dans la figure 3.1 représentant une fonction de Green typique.

Remarques:

1. Pour $U = 0$, $G(\tau) = 0.5$ à $\mathbf{k} = \mathbf{k}_F$. Dans ce cas, on dit qu'il n'y a aucune dynamique HS puisque que G est constante pour tous les temps τ .
2. À demi-rempli au niveau de Fermi $G(\tau = 0^+) = G(\tau = \beta^-) = 0.5$.
3. $G(\tau = 0^+) + G(\tau = \beta^-) = 1$, valide pour tout vecteur d'onde.
4. La fonction de Green devient de plus en plus concave au fur et à mesure que $|U|$ croît.
5. Pour les calculs numériques, seul l'intervalle de temps $[0^+, \beta^-]$ peut être considéré.
6. La propriété d'invariance sous translation dans le temps permet de considérer formellement une tranche de temps $l = 0$, différente de $\ell = 0$, qui coïncide exactement avec la tranche N_τ , de même qu'une tranche $N_\tau + 1$ coïncidant avec la tranche 1, et ainsi de suite. Cette propriété est illustrée dans la figure 3.2 sur laquelle on présente aussi la distinction à faire entre les variables l et ℓ .

3.2. Fonctions de Green à temps égal

En calculant explicitement la valeur moyenne $\langle T_l c_{i,\sigma}(\ell_1) c_{j,\sigma}^\dagger(\ell_2) \rangle_{\{x\}}^0$, il est possible de démontrer (annexe 5 de [33]) que l'expression matricielle des fonctions de Green à temps égal ($l_1 = l_2 = l$) est

$$G^\sigma(l, l)_{ij} = \left\langle c_{i,\sigma}(l) c_{j,\sigma}^\dagger(l) \right\rangle_{\{x\}}^0 = \left(\frac{1}{1 + B_{l-1}^\sigma \cdots B_1^\sigma B_{N_\tau}^\sigma \cdots B_l^\sigma} \right)_{ij} \quad (3.10)$$

où les matrices B_l^σ , $l = 1, \dots, N_\tau$, sont définies dans l'éq.(2.22a). Aussi, 1 dénote la matrice identité ($N \times N$) et la division est à interpréter comme l'inverse matriciel.

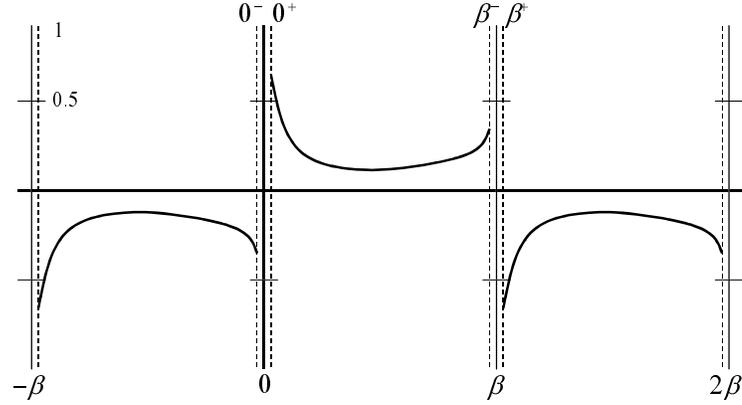


Figure 3.1: Fonction de Green $G(\tau, \mathbf{k})$ typique sur l'intervalle $[-\beta, 2\beta]$.

Remarque:

1. En rapport avec la remarque précédente, nous adoptons dans ce travail une convention d'indice différente de celle utilisée dans [33] pour ce qui est de la formule précédente. Au lieu d'écrire les fonctions de Green en utilisant l'indice de temps ℓ , nous utilisons l'indice de tranche l pour bien mettre en évidence le fait que les matrices B_l^σ ne sont définies que pour $l = 1, \dots, N_\tau$. Cette différence de notation, encore une fois soulignée dans la figure 3.2, peut facilement être mise en correspondance avec la notation de [33] par le changement $l \rightarrow l - 1$. C'est aussi cette convention (l) qui est utilisé dans le programme `hubb.f`.

Afin de s'exercer à manipuler l'expression précédente, nous dérivons maintenant l'éq.(2.47) présentée dans la section décrivant l'algorithme Monte Carlo comme la formule d'*enroulement*. Pour cela, notons seulement que le produit $B_l G(l, l) B_l^{-1}$ peut se réécrire comme

$$\begin{aligned}
 B_l(1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_l)^{-1} B_l^{-1} &= [B_l(1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_l) B_l^{-1}]^{-1} \\
 &= (1 + B_l \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_{l-1})^{-1} \\
 &= G(l + 1, l + 1),
 \end{aligned} \tag{3.11}$$

de sorte que

$$G^\sigma(l + 1, l + 1) = B_l^\sigma G^\sigma(l, l) (B_l^\sigma)^{-1}. \tag{3.12a}$$

En sens inverse du temps, c.-à-d. en considérant un produit à $l - 1$, on obtient

$$G^\sigma(l - 1, l - 1) = (B_{l-1}^\sigma)^{-1} G^\sigma(l, l) B_{l-1}^\sigma. \tag{3.13}$$

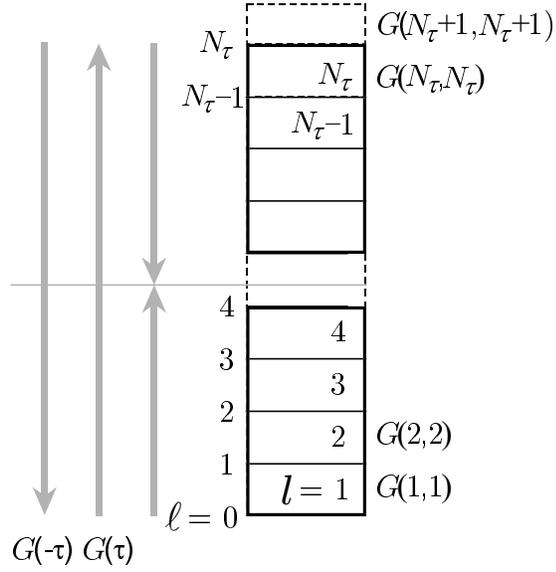


Figure 3.2: Disposition des tranches de temps l par rapport aux temps imaginaires l et évolution des fonctions de Green $G(\tau)$ dans le temps (cf. explication dans le texte.)

3.3. Fonctions de Green à temps inégal

Des formules similaires à l'éq.(3.10) existent pour les fonctions de Green à temps inégal ($l_1 \neq l_2$). Elles sont dérivées dans [33, 12] en convention de notation l et ont pour expressions en convention l :

$$G(l_1, l_2) = B_{l_1-1} B_{l_1-2} \cdots B_{l_2} \frac{1}{1 + B_{l_2-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_{l_2}} \quad (3.14a)$$

$$= \frac{1}{1 + B_{l_1-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_{l_1}} B_{l_1-1} \cdots B_{l_2}, \quad l_1 > l_2. \quad (3.14b)$$

Il est facile de voir que ces expressions peuvent s'écrire comme un semi-enroulement

$$G(l_1, l_2) = B_{l_1-1} \cdots B_{l_2} G(l_2, l_2), \quad (3.15a)$$

$$= G(l_1, l_1) B_{l_1-1} \cdots B_{l_2}, \quad l_1 > l_2, \quad (3.15b)$$

que nous notons de façon symbolique de la manière suivante:

$$G(\uparrow, -) = B \cdots B G(-, -) \quad (3.16a)$$

$$G(-, \downarrow) = G(-, -) B \cdots B \quad (3.16b)$$

afin d'indiquer qu'un produit de B à gauche augmente l'indice de temps de gauche et, inversement, qu'un produit à droite réduit l'indice de droite. Ces produits symboliques

de *propagation* sont valides pour $l_1 > l_2$ de même que pour $l_1 < l_2$ pour autant que les fonctions de Green résultantes soient interprétées correctement en considérant l'ordre chronologique. Pour abaisser l'indice de gauche ou augmenter l'indice de droite, on a plutôt

$$G(\downarrow, -) = B^{-1} \cdots B^{-1} G(-, -) \quad (3.17a)$$

$$G(-, \uparrow) = G(-, -) B^{-1} \cdots B^{-1}, \quad (3.17b)$$

l'ordre précis des indices dans les produits étant

$$G(l_1, l_2) = B_{l_1}^{-1} \cdots B_{l_2-1}^{-1} G(l_2, l_2) \quad (3.18a)$$

$$= G(l_1, l_1) B_{l_1}^{-1} \cdots B_{l_2-1}^{-1} \quad l_1 < l_2. \quad (3.18b)$$

Par la propriété d'invariance sous translation dans le temps, la seule fonction de Green à calculer est la fonction $G(\tau)$. Cette fonction, pour tous les temps $\tau = 0, 1, \dots, N_\tau$, peut être calculée selon plusieurs méthodes différentes (figure 2). L'une de celles-ci consiste à propager la fonction $G(1, 1) = G(\tau = 0)$ (convention de temps zéro utilisée dans le programme) avec l'éq.(3.16a) (propagation directe)

$$G(0) = G(1, 1)$$

$$G(1) = G(2, 1) = B_1 G(1, 1)$$

$$G(2) = G(3, 1) = B_2 G(2, 1) = B_2 B_1 G(1, 1)$$

$$\vdots$$

$$G(N_\tau) = G(N_\tau + 1, 1) = B_{N_\tau} G(N_\tau, 1) = B_{N_\tau} \cdots B_1 G(1, 1) \quad (3.19)$$

Une autre méthode consiste à propager

$$G(\beta^-) = -G(0^-) = 1 - G(0^+), \quad (3.20)$$

c.-à-d. $1 - G(1, 1)$ en utilisant l'éq.(3.17b) (propagation inverse)

$$G(N_\tau) = G(N_\tau + 1, 1) = [1 - G(1, 1)]$$

$$G(N_\tau - 1) = G(N_\tau + 1, 2) = G(N_\tau + 1, 1) B_1^{-1}$$

$$G(N_\tau - 2) = G(N_\tau + 1, 3) = G(N_\tau + 1, 2) B_2^{-1} \\ = G(N_\tau + 1, 1) B_1^{-1} B_2^{-1}$$

$$\vdots$$

$$G(0) = G(N_\tau + 1, N_\tau + 1) = G(N_\tau + 1, N_\tau) B_{N_\tau}^{-1}$$

$$= G(N_\tau + 1, 1) B_1^{-1} B_2^{-1} \cdots B_{N_\tau}^{-1}. \quad (3.21)$$

En pratique, dans le but d'éviter les erreurs numériques qui s'accumulent dans les produit de propagation, nous conjugons l'effort des deux méthodes en procédant au calcul de $G(\tau)$ par propagation directe pour la moitié des temps $\tau = 0, 1, \dots, N_\tau/2$, et

par propagation inverse aux temps $\tau = N_\tau, N_\tau - 1, \dots, N_\tau/2 + 1$. L'erreur sur $G(1, 1)$, dans ce cas, est propagée seulement sur un demi-intervalle, $[0, \beta/2]$ ou $]\beta/2, \beta]$ selon le type de propagation, au lieu de l'intervalle complet $[0, \beta]$. De plus, comme pour le calcul des fonctions de Green à temps égal, on calcule $G(\tau)$ à l'aide d'un produit itératif du genre $G(n + 1, 1) = B_n G(n, 1)$, sauf après un nombre de tranches précis (*nmodul*) où le produit $B_n \cdots B_1$ est calculé complètement en utilisant certaines procédures de stabilisation, pour être ensuite multiplié par $G(1, 1)$ (cf. section §4.1). Ceci permet d'enrayer la majeure partie des «imperfections» de $G(\tau)$ prédominantes à basse température.

Remarques:

1. La relation (3.20) se dérive à partir de l'anticommutateur (3.8) et de la propriété d'antipériodicité

$$\begin{aligned} -G(\tau = 0^-) &= 1 - G(\tau = 0^+) \\ &= G(\tau = 0^- + \beta). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Pour obtenir la relation voulue, nous adoptons la convention $G(\tau = 0^+) = G(l, l)$, $G(\tau = \beta^-) = G(N_\tau + 1, 1)$. Le fait d'utiliser 0^+ comme zéro du temps est totalement arbitraire; tout ce qui est requis dans ce cas est que β^- corresponde à N_τ . Inversement, β^+ doit être utilisé si 0^- représente l'origine du temps.

2. Le choix de $G(1, 1)$ comme fonction de départ pour calculer $G(\tau)$ est totalement arbitraire puisque la transformation HS ne fixe aucune référence quant au choix de la numérotation des tranches de temps imaginaire. Notons de plus que l'invariance sous translation dans le temps est vraie lorsque la trace sur les variables HS est effectuée exactement, ce qui n'est jamais totalement le cas. Ce dernier point est discuté brièvement dans la section 4.3.
3. Il est préférable de ne pas utiliser la formule de semi-enroulement direct lorsque la fonction de Green $G(\tau)$ à calculer est plus grande que la fonction précédente servant de «germe» au calcul parce qu'il y a alors amplification des erreurs. C'est pour cette raison que l'on trouve $G(\tau)$ à partir de $G(0)$ sur l'intervalle $[0, \beta/2]$ alors que $G(\beta) = [1 - G(0)]$ est utilisée pour l'intervalle $]\beta/2, \beta]$. (Rappelons que $G(\tau)$ diminue généralement en fonction de τ sur $[0, \beta/2]$, alors qu'elle augmente sur $]\beta/2, \beta]$.)
4. Le calcul de certaines observables nécessite la connaissance de la fonction de Green pour des temps négatifs, c-à-d. $G'_{ij}(l_1, l_2) = \langle c_i^\dagger(l_1) c_j(l_2) \rangle$, $l_1 < l_2$. Pour ces fonctions de Green, nous ne pouvons pas utiliser la propriété d'antipériodicité mentionnée plus haut puisque cette dernière est vérifiée à la limite thermodynamique seulement. Il faut donc calculer explicitement ces fonctions pour tous les temps négatifs $\tau = -1, -2, \dots, -l$, reliés. À temps égal, l'algèbre des commutateurs nous

indique que $G'_{ij}(l, l) = 1 - G_{ji}(l, l)$. À temps inégal, les règles d'évolution temporelles sont l'inverse de celles gouvernant l'évolution de G en tenant compte de la transposition, c-à-d.,

$$G'(\uparrow, -) = [B^{-1} \cdots B^{-1}]^T G'(-, -) \quad (3.23)$$

$$G'(\downarrow, -) = [B \cdots B]^T G'(-, -). \quad (3.24)$$

3.4. Fonctions de Green de Matsubara

Dans les calculs numériques on travaille beaucoup plus avec la transformée de Fourier des fonctions de Green G_{k_x, k_y} que les fonctions G_{ij} elles-mêmes. La relation entre ces deux matrices est simplement

$$G(l_1, l_2)_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{i, j} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_{ij}} G(l_1, l_2)_{ij}, \quad (3.25)$$

où $\mathbf{r}_{ij} = |i - j|$ et $\mathbf{k} = (2\pi n_x/N_x, 2\pi n_y/N_y)$, un *vecteur d'onde* de la zone de Brillouin avec $n_x = 1, \dots, N_x$, $n_y = 1, \dots, N_y$. Contrairement à G_{ij} qui est réel, $G_{\mathbf{k}}$ est une fonction complexe dont les parties réelle et imaginaire sont facilement calculables en séparant la fonction exponentielle dans la définition ci-haut. Lorsque $G_{ij} = G_{ji}$, comme dans le cas d'un paramètre de saut homogène $t_x = t_y$, on a que $\text{Im} G_{\mathbf{k}} = 0$ et on ne calcule donc que la partie faisant intervenir la fonction cosinus.

Une autre fonction de Green peut aussi être définie en prenant la transformée de Fourier sur le temps imaginaire. On définit alors la *fonction de Green de Matsubara* [34, 3]

$$G(i\omega_n, \mathbf{k}) = \int_0^\beta d\tau G(\tau, \mathbf{k}) e^{i\tau\omega_n} \quad (3.26a)$$

$$G(\tau, \mathbf{k}) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n\tau} G(i\omega_n, \mathbf{k}), \quad (3.26b)$$

où $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ sont les *fréquences de Matsubara* (fréquences impaires pour les fermions). En développant la fonction exponentielle, on trouve évidemment

$$\text{Re} [G(i\omega_n, \mathbf{k})] = \int_0^\beta d\tau G(\tau, \mathbf{k}) \cos(\tau\omega_n), \quad (3.27a)$$

$$\text{Im} [G(i\omega_n, \mathbf{k})] = \int_0^\beta d\tau G(\tau, \mathbf{k}) \sin(\tau\omega_n). \quad (3.27b)$$

Remarques:

1. Dans le calcul numérique de la fonction de Green de Matsubara, les intégrales précédentes sont «discrétisées» sur les temps $\tau = 0, \dots, N_\tau$, puis évaluées, de façon stable, à l'aide de la règle dite de *Filon* (cf. références dans le programme `hubb.f`).

2. À demi-rempli, $G(\tau, \mathbf{k}) = G(\beta - \tau, \mathbf{k} + \boldsymbol{\pi})$. Cette propriété est une conséquence de la symétrie de rotation et est valable pour les fonctions de Green exacte.

3.5. Théorème de Wick

Dans le formalisme de seconde quantification, tout opérateur représentant une observable physique peut s'écrire comme un produit d'opérateurs de création et d'annihilation [34, sec. 4.1]. Ce produit peut faire intervenir un nombre arbitraire d'opérateur c et c^\dagger , dont la moyenne est très difficile, voire impossible, à calculer exactement pour le problème général à N -corps. Dans le cadre des simulations Monte Carlo quantiques toutefois, il est possible de calculer facilement la moyenne de produits d'opérateurs puisque celle-ci est prise sur une configuration *fixe* du champ *libre* de Hubbard-Stratonovitch. Une observable du genre $\langle c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger c_4 \rangle_{\{x\}}^0$ se réduit par exemple à

$$\langle c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger c_4 \rangle_{\{x\}}^0 = \langle c_1^\dagger c_4 \rangle_{\{x\}}^0 \langle c_2 c_3^\dagger \rangle_{\{x\}}^0 + \langle c_1^\dagger c_2 \rangle_{\{x\}}^0 \langle c_3^\dagger c_4 \rangle_{\{x\}}^0 \quad (3.28)$$

qui n'est rien d'autre que l'expression du *théorème de Wick* [34, 1] exprimé symboliquement comme suit ($\langle \rangle_{\{x\}}^0 = \langle \rangle_0$)

$$\langle c_1^\dagger c_2 c_3^\dagger c_4 \rangle_0 = \langle c_1^\dagger \downarrow c_2 \downarrow c_3^\dagger \uparrow c_4 \uparrow \rangle_0 + \langle c_1^\dagger \downarrow c_2 \uparrow c_3^\dagger \downarrow c_4 \uparrow \rangle_0. \quad (3.29)$$

Les flèches indiquent quels opérateurs sont *contractés* en moyenne quadratique (il faut aussi ajouter un signe négatif pour chaque permutation impaire d'opérateurs). Pour des opérateurs qui dépendent du temps, on peut démontrer que les moyennes sur le champ HS se conforment aussi au théorème de Wick dont l'expression générale est

$$\begin{aligned} \left\langle T \left[a_i(\tau_i) a_j(\tau_j) a_k^\dagger(\tau_k) a_l^\dagger(\tau_l) \right] \right\rangle_0 &= \left\langle T \left[a_i(\tau_i) a_l^\dagger(\tau_l) \right] \right\rangle_0 \left\langle T \left[a_j(\tau_j) a_k^\dagger(\tau_k) \right] \right\rangle_0 \\ &\quad - \left\langle T \left[a_i(\tau_i) a_k^\dagger(\tau_k) \right] \right\rangle_0 \left\langle T \left[a_j(\tau_j) a_l^\dagger(\tau_l) \right] \right\rangle_0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

où T est l'opérateur d'ordre chronologique.

Dans le cas qui nous occupe ici, c.-à-d. pour des fermions comportant un degré de liberté de spin évoluant sur le champ HS, nous pouvons réduire toute observable à des fonctions de Green en utilisant le théorème de Wick et en adoptant les règles suivantes:

$$\left\langle c_{i\sigma}^\dagger \right\rangle = \langle c_{i\sigma} \rangle = 0 \quad (3.31)$$

$$\left\langle c_{i\sigma} c_{j\sigma'} \right\rangle = \left\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}^\dagger \right\rangle = 0, \quad (3.32)$$

$$\left\langle c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} \right\rangle = \left\langle c_{i\sigma} c_{j\sigma}^\dagger \right\rangle = 0, \quad \sigma \neq \sigma' \quad (3.33)$$

$$\left\langle c_{i\sigma}(\tau) c_{j\sigma}^\dagger \right\rangle = G_{ij}^\sigma(\tau) \quad (3.34)$$

$$\left\langle c_{i\sigma}^\dagger(\tau) c_{j\sigma} \right\rangle = G_{ij}'^\sigma(\tau). \quad (3.35)$$

En guise d'exercice, on laisse le soin au lecteur de vérifier le développement des observables qui suivent.

1. *Densité d'occupation.*

$$\begin{aligned} \langle n \rangle &= \sum_i \langle n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow} \rangle = \sum_i \langle c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} \rangle = \sum_i \langle 1 - c_{i\uparrow} c_{i\uparrow}^\dagger + 1 - c_{i\downarrow} c_{i\downarrow}^\dagger \rangle \\ &= \sum_i \left(2 - G_{ii}^\uparrow(l, l) - G_{ii}^\downarrow(l, l) \right) = \sum_i \left(G_{ii}^{\prime\uparrow}(l, l) + G_{ii}^{\prime\downarrow}(l, l) \right) \end{aligned} \quad (3.36)$$

2. *Fonction de corrélation de paire.*

$$\begin{aligned} P_{ij}(\tau) &= \langle c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\downarrow} c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \\ &= \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\downarrow} \rangle \langle c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow} \rangle + \langle c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger \rangle \langle c_{i\downarrow}(\tau) c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \\ &= G_{ij}^{\prime\downarrow}(\tau) G_{ij}^{\prime\uparrow}(\tau) + G_{ij}^\uparrow(\tau) G_{ij}^\downarrow(\tau) \end{aligned} \quad (3.37)$$

3. *Fonction de corrélation de charge.*

$$\begin{aligned} C_{ij}(\tau) &\equiv \langle \rho(\tau) \rho(0) \rangle_{ij} = \langle (n_{i\uparrow}(\tau) + n_{i\downarrow}(\tau))(n_{j\uparrow} + n_{j\downarrow}) \rangle \\ &= \langle c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle + \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle \\ &\quad + \langle c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle + \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \\ &= \left[\langle c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) \rangle + \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \rangle \right] \left[\langle c_{j\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow} \rangle + \langle c_{j\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow} \rangle \right] \\ &\quad + \langle c_{i\uparrow}^\dagger(\tau) c_{j\uparrow} \rangle \langle c_{i\uparrow}(\tau) c_{j\uparrow}^\dagger \rangle + \langle c_{i\downarrow}^\dagger(\tau) c_{j\downarrow} \rangle \langle c_{i\downarrow}(\tau) c_{j\downarrow}^\dagger \rangle \\ &= \left[G_{ij}^{\prime\uparrow}(\tau, \tau) + G_{ij}^{\prime\downarrow}(\tau, \tau) \right] \left[G_{ij}^{\prime\uparrow}(0, 0) + G_{ij}^{\prime\downarrow}(0, 0) \right] \\ &\quad + G_{ij}^{\prime\uparrow}(\tau) G_{ij}^\uparrow(\tau) + G_{ij}^{\prime\downarrow}(\tau) G_{ij}^\downarrow(\tau) \end{aligned} \quad (3.38)$$

3.6. Self-énergie

La *self-énergie* $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ est un facteur de renormalisation de l'énergie des électrons définie implicitement à partir des fonctions de Green de Matsubara par la relation [34]

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \zeta_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)} \quad (3.39)$$

avec $\zeta_{\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu$ et $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ étant l'énergie d'un fermion libre au vecteur d'onde \mathbf{k} (relations de dispersion en annexe).

Tout comme la fonction de Matsubara, en général $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n)$ est une quantité complexe dont les parties réelle Σ_R et imaginaire Σ_I sont calculées comme suit. D'abord, en inversant la relation (3.39), on peut écrire

$$G^{-1}(\mathbf{k}, i\omega_n) = i\omega_n - \zeta_{\mathbf{k}} - \Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n). \quad (3.40)$$

Finalement, définissant $G(\mathbf{k}, i\omega_n) = G_R(\mathbf{k}, i\omega_n) + iG_I(\mathbf{k}, i\omega_n)$ et $\Sigma(\mathbf{k}, i\omega_n) = \Sigma_R(\mathbf{k}, i\omega_n) + i\Sigma_I(\mathbf{k}, i\omega_n)$, on dérive facilement

$$G_R(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\frac{\zeta_{\mathbf{k}} + \Sigma_R(\mathbf{k}, i\omega_n)}{(\zeta_{\mathbf{k}} + \Sigma_R(\mathbf{k}, i\omega_n))^2 + (\omega_n - \Sigma_I(\mathbf{k}, i\omega_n))^2} \quad (3.41a)$$

$$G_I(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\frac{\omega_n - \Sigma_I(\mathbf{k}, i\omega_n)}{(\zeta_{\mathbf{k}} + \Sigma_R(\mathbf{k}, i\omega_n))^2 + (\omega_n - \Sigma_I(\mathbf{k}, i\omega_n))^2} \quad (3.41b)$$

$$\Sigma_R(\mathbf{k}, i\omega_n) = -\zeta_{\mathbf{k}} - \frac{G_R(\mathbf{k}, i\omega_n)}{G_R^2(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_I^2(\mathbf{k}, i\omega_n)} \quad (3.41c)$$

$$\Sigma_I(\mathbf{k}, i\omega_n) = \omega_n + \frac{G_I(\mathbf{k}, i\omega_n)}{G_R^2(\mathbf{k}, i\omega_n) + G_I^2(\mathbf{k}, i\omega_n)}. \quad (3.41d)$$

Le calcul des fonctions de Green $G(l_1, l_2)$ font intervenir un nombre important d'opérations matricielles (exponentielle, multiplication, inversion) qui sont fortement sensibles à la nature «finie» de la représentation des nombres réels sur les ordinateurs. Cette sensibilité numérique a comme effet négatif d'amplifier les erreurs d'arrondissement numérique et, par conséquent, de limiter en pratique la qualité des résultats des simulations pour différentes valeurs des paramètres β , U et t . Dans cette section, nous discutons de ces difficultés numériques et montrons comment plusieurs d'entre elles peuvent être contournées en utilisant diverses stratégies. D'autres instabilités et aspects numériques sont aussi abordés: le problème d'ergodicité, notamment, en plus du fameux problème du signe, ainsi que le choix de la décomposition de Trotter.

4.1. Calculs à basses températures

Les matrices B entrant dans l'expression des fonctions de Green contiennent des valeurs numériques distribuées sur plusieurs ordres de grandeur. En effet, en considérant le problème sans interaction ($U = 0$), on peut voir que les valeurs propres du produit des matrices

$$B_{N\tau} \cdots B_1 = e^{-\Delta\tau K} \cdots e^{-\Delta\tau K}, \quad (4.1)$$

qui n'est rien d'autre que $e^{-\beta K}$, vont de $e^{-4t\beta}$ à $e^{4t\beta}$ sachant que les énergies des électrons libres couvrent l'intervalle $[-4t, 4t]$. Au niveau numérique, ces éléments sont impossibles à conserver totalement; lors du calcul des fonctions de Green, certains éléments extrêmes des matrices sont nécessairement «écrasés» par les opérations d'arrondissement, laissant intactes seules les valeurs près de 1. En plus, l'opération d'inversion de ce produit amplifie fortement les erreurs présentes sur les valeurs d'ordre $O(e^{-\beta t})$, comme nous le démontrons en annexe. Il en résulte alors une instabilité des calculs s'accroissant à basse température (β élevé).

En présence d'une interaction la même conclusion, essentiellement, est applicable. Pour être plus sûr, il est possible de calculer le nombre de conditionnement κ de G ou des matrices B . Ce nombre, défini en annexe, mesure le facteur d'accroissement de l'erreur numérique $\delta L(B)$ associé à une opération linéaire L (produit, inversion, etc.) effectuée sur une matrice B représentée à une précision δB , c.-à-d. $\delta L(B) \simeq \kappa(B)\delta B$. Dans le cas du modèle de Hubbard, Matuttis [20] a calculé le nombre de conditionnement du produit $\prod_l B_l$ ci-haut pour différentes valeurs de β et U . Les conclusions de ses calculs sont que $\log \kappa$ est approximativement une fonction linéaire de β et de U , et qu'à partir de valeurs relativement conservatrices de β et U ($\beta \gtrsim 2$, $U \gtrsim 4$), κ est de l'ordre de 10^3 , valeur à partir de laquelle on considère une matrice *mal conditionnée*.

Pour palier à ce problème de conditionnement, on procède à une décomposition matricielle des matrices B sous la forme $B = QR$, Q étant une matrice orthogonale ($Q^T = Q^{-1}$) et R une matrice triangulaire supérieure. La justification du choix d'une telle forme de décomposition est simple: en tant que matrice orthogonale, Q possède un nombre de conditionnement égal à un, ce qui fait que des multiplications faisant intervenir Q sont stables comparativement à celles faisant intervenir B directement. Évidemment, pour économiser du temps, on ne factorise pas toutes les matrices B pour le calcul d'une fonction de Green; on procède plutôt à ce genre de décomposition après avoir multiplié un certain nombre (*nmodul*) de matrices B fixé au préalable. De plus, pour des raisons qui seront détaillées plus bas, on normalise les colonnes de Q telle que $Q = UD$, pour ainsi obtenir une nouvelle matrice orthogonale U et une matrice diagonale D contenant les normes des colonnes de Q . Explicitement donc, nous procédons au calcul de $G(l, l)$ comme suit. En un premier temps, nous calculons un produit relativement stable de a matrices B

$$1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_l = 1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots \underbrace{[B_{l+a} \cdots B_l]}_{U_1 D_1 V_1} \quad (4.2)$$

dont le résultat est décomposé sous une première forme $U_1 D_1 V_1$. Nous calculons ensuite un autre bloc de a matrices B qui est multiplié par la matrice orthogonale U_1 de la décomposition précédente, puis par D_1

$$1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots \underbrace{\{[(B_{l+2a} \cdots B_{l+a+1})U_1]D_1\}}_{U_2 D_2 V_2} V_1, \quad (4.3)$$

et procédons, encore une fois, à une décomposition pour obtenir $U_2 D_2 V_2$. En répétant cette procédure jusqu'à B_{l-1} , on en vient à obtenir

$$1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_l = 1 + U_{N_\tau/a} D_{N_\tau/a} V_{N_\tau/a} \cdots V_1 \quad (4.4)$$

puis

$$1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_l = 1 + U_{N_\tau/a} D_{N_\tau/a} V$$

en multipliant la série de matrices triangulaires. À ce point, on calcule la fonction de Green en utilisant l'identité suivante (on omet les indices N_τ/a):

$$1 + UDV = U(U^{-1}V^{-1} + D)V$$

de laquelle on tire facilement

$$\frac{1}{1 + B_{l-1} \cdots B_1 B_{N_\tau} \cdots B_l} = V^{-1}(U^{-1}V^{-1} + D)^{-1}U^{-1}. \quad (4.5)$$

Remarques:

1. Dans l'étape finale du calcul de la fonction de Green, le terme

$$U^{-1}V^{-1} + D = U^T V^{-1} + D \quad (4.6)$$

est factorisé sous la forme $U'D'V'$ de façon à obtenir

$$G = V^{-1}V'^{-1}D'^{-1}U'^{-1}U^{-1} = V^{-1}V'^{-1}D'^{-1}U'^T U^T. \quad (4.7)$$

2. Les matrices D et U s'inversent directement de façon stable; en particulier, $U^{-1} = U^T$. La seule matrice que nous avons à inverser complètement est la matrice triangulaire V .
3. Les seuls produits stables intervenant dans les étapes précédentes sont ceux qui contiennent les matrices orthogonales; tous les autres produits sont instables à un certain degré. L'efficacité de la méthode décrite ici réside dans le fait qu'on limite le plus possible les produits instables en remplaçant un bon nombre de ceux-ci par des produits stables au coût d'une décomposition UDV pour chaque produit stable effectué.

Le but de la méthode de stabilisation décrite précédemment est de «contrôler» les valeurs numériques excessives afin de minimiser le nombre d'opérations liées à celles-ci. Dans la même lignée, il est possible d'ordonner les normes des colonnes des matrices Q de manière à isoler le plus possible les ordres de grandeur intervenant dans le produit $\prod_l B_l$. Ceci constitue en fait ce que nous appelons le *pivotage* qui peut être représenté comme suit. Imaginons que les matrices que nous manipulons contiennent des éléments se distribuant sur trois ordres de grandeur: X , x et z , en ordre décroissant. Avec cette notation, un produit UD s'écrit

$$\begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x & & \\ & X & \\ & & z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x & X & z \\ x & X & z \\ x & X & z \end{pmatrix}. \quad (4.8)$$

Le but du pivotage, pour ce genre de produit, est de ranger les ordres de grandeur toujours dans le même ordre, ici X , x , z , en remplaçant par exemple les produits consécutifs suivants

$$\left[\begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & & \\ & x & \\ & & z \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} x & & \\ & X & \\ & & z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X & X & z \\ X & X & z \\ X & X & z \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

par les produits

$$\left[\begin{pmatrix} x & x & x \\ x & x & x \\ x & x & x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & & \\ & x & \\ & & z \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} X & & \\ & x & \\ & & z \end{pmatrix} P = \begin{pmatrix} X & x & z \\ X & x & z \\ X & x & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X & & \\ & x & \\ & & z \end{pmatrix} P$$

$$= \begin{pmatrix} X & x & x \\ X & x & x \\ X & x & x \end{pmatrix} P, \quad (4.10)$$

P étant une matrice de permutation dont l'effet est de permuter les éléments de la première et de la seconde colonnes

$$\begin{pmatrix} X & & \\ & x & \\ & & x \end{pmatrix} P = \begin{pmatrix} x & & \\ & X & \\ & & x \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Clairement, cette opération préserve l'intégrité du résultat du produit tout en minimisant le mélange des ordres de grandeur. En répétant constamment cette procédure et en «ré-orthogonalisant» les produits, on est alors certain de regrouper les valeurs selon leur ordre de grandeur, de les traiter séparément et de réduire, conséquemment, l'effet des erreurs d'arrondissement.

Remarques:

1. La même procédure de décomposition UDV avec pivotage est utilisée lors du calcul des fonctions de Green à temps inégal. Dans les deux cas, cette stabilisation des calculs permet d'étendre considérablement la température limite à partir de laquelle les simulations deviennent instables: $\beta \simeq 16$ ou 18 avec stabilisation, comparativement à $\beta \simeq 8$ ou 10 sans stabilisation.
2. Plusieurs essais numériques ont démontré que le choix de la méthode de décomposition QR utilisée (QR par colonnes, QR par lignes, méthode de Housholder, etc.) n'a pratiquement aucun effet sur l'efficacité de la stabilisation.

4.2. Ergodicité

La fonction de transition $P(x'|x)$ de l'algorithme Monte Carlo permet en théorie de passer de n'importe quelle configuration x à une configuration différente x' , soit directement ou par l'intermédiaire d'autres configurations. Au cours d'une marche aléatoire infinie ($M \rightarrow \infty$), cela implique que toutes les configurations possibles du champ HS sont générées ou, en d'autres mots, que l'algorithme est *ergodique* (au sens des marches aléatoires). En pratique, cependant, la situation est tout autre: à fort couplage ($|U|/t \gtrsim 6 - 8$), l'exploration de l'espace des configurations du champ semble être confinée à un sous-ensemble de l'ensemble des 2^{NN_τ} configurations HS [26]. Ce problème, connu sous le nom de *problème de collement*, peut être mis en évidence de plusieurs façons, la plus directe étant le fait que les erreurs statistiques sur les valeurs Monte Carlo deviennent pathologiquement petite à U élevé. Une autre, plus convaincante, consiste à calculer un histogramme de $\langle n_\uparrow \rangle / N$ ou $\langle n_\downarrow \rangle / N$, pour mettre en évidence une distribution ne correspondant pas du tout à la distribution normale espérée, indiquant un «collement» des valeurs des valeurs de spin, (c.f. figures dans [26, 33]).

Dans le but de comprendre plus en détails l'origine de ce problème, on peut calculer, suivant [26], la fonction de partition du modèle de Hubbard à un site sans terme de saut ($t = 0$) pour trouver

$$Z = \begin{cases} \sum_{\{x_l\}} e^{-\beta(U/4-\mu)} [\cosh \beta\mu + \cosh(\Delta\tau\lambda \sum_l x_l)], & U > 0 \\ \sum_{\{x_l\}} e^{-\beta(U/4-\mu)} [\cosh(\Delta\tau\lambda \sum_l x_l - \beta\mu) + 1], & U < 0 \end{cases} \quad (4.12)$$

La conclusion principale que l'on tire de ce résultat est, qualitativement, que les deux configurations $\{x_l\}$ possédant toutes les mêmes valeurs (+1 ou -1) ont la plus grande probabilité d'apparaître dans un calcul Monte Carlo, alors que les configurations telles que $\sum_l x_l \simeq 0$ sont les moins probables (voir graphiques dans [26]). Le problème de collement, dans ce cas, s'explique par le fait qu'il est très improbable en pratique, c.-à-d. au cours d'une simulation de temps fini, de passer de l'un à l'autre des deux bassins de configurations $\sum_l x_l \simeq N_\tau$ et $\sum_l x_l \simeq -N_\tau$, prédominantes du point de vue des probabilités, seulement par l'utilisation de basculements locaux $x_l \rightarrow -x_l$.

Pour solutionner ce problème d'exploration de l'espace des configurations, on peut tenter de réduire $\Delta\tau$ à $U > 0$ ou augmenter $\beta\mu$ à $U < 0$ afin de minimiser la contribution du terme contenant la somme sur les variables x_l . Cependant, comme le paramètre λ dépend aussi de $\Delta\tau$, il est possible de montrer dans les deux cas que la fonction de partition est indépendante de N_τ en première approximation [26]. Reste alors la méthode directe qui consiste à forcer l'exploration de l'espace des configurations du champ en initialisant la marche aléatoire en différents endroits de l'espace des configurations (parallélisation) ou en perturbant la marche aléatoire à l'aide de basculements qui font intervenir plus de variables du champ. Cette dernière option constitue ce que nous appelons des *mouvements globaux* et consiste, précisément, à renverser les variables $x_{i,l}$ du réseau espace-temps d'un site donné sur toutes les tranches de temps, c.-à-d. $x_{i,l} \rightarrow -x_{i,l}$, $l = 1, \dots, N_\tau$, renversant par là un spin au site i . Dans le but de respecter les statistiques du système, ce genre de mouvement doit être accepté avec une probabilité donnée par la formule (2.45) avec

$$R_\downarrow R_\uparrow = \frac{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G'^\sigma)^{-1}]}{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G^\sigma)^{-1}]} \quad (4.13)$$

pour $U > 0$ et

$$R_\downarrow R_\uparrow = \frac{\prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\lambda x'_{i,l}} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G'^\sigma)^{-1}]}{\prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\lambda x_{i,l}} \prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G^\sigma)^{-1}]} = \exp\left(2\lambda \sum_l^{N_\tau} x_{i,l}\right) \frac{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G'^\sigma)^{-1}]}{\prod_{\sigma=\uparrow\downarrow} \det[(G^\sigma)^{-1}]}, \quad (4.14)$$

à $U < 0$.

Remarques:

1. L'efficacité des mouvements globaux est illustrée dans la figure 4.1 qui présente une simulation avec et sans mouvements globaux. Les paramètres de simulation sont $\beta = 4$, $U = 12$, $\mu = 0$ et $\Delta\tau = 0.1$.

2. Contrairement au cas des mouvements locaux, il n'existe pas de formule simple comme l'éq.(2.41) pour calculer R . Il faut donc évaluer cette quantité directement en calculant le déterminant.

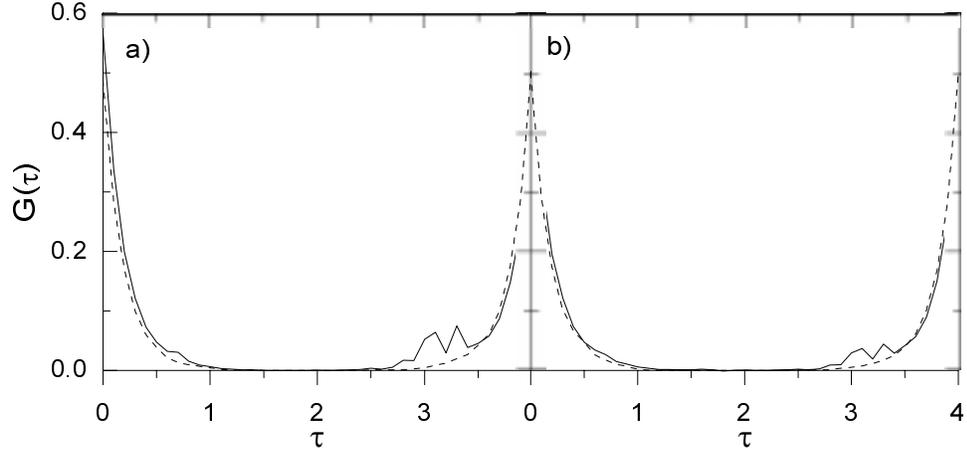


Figure 4.1: Simulations avec (trait pointillé) et sans (trait plein) mouvements globaux. Les paramètres de simulation sont $\beta = 4$, $U = 12$, $\langle n \rangle = 1$, $\Delta\tau = 0.1$. La figure a) a été obtenue après 2500 mesures tandis que la figure b) contient 5000 mesures.

4.3. Autres aspects numériques

- **Décomposition de Trotter.** Le choix de l'ordre de la décomposition de Trotter dicte, comme nous l'avons vu, l'ordre de l'erreur systématique en $\Delta\tau$. Dans notre présentation de l'algorithme du déterminant, nous avons choisi une décomposition de premier ordre; c'est aussi ce choix qui est utilisé couramment dans les simulations. Cependant, il faut savoir que d'autres décompositions sont aussi possibles. Par exemple, une décomposition de deuxième ordre de la forme

$$e^{-\beta H} = \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau K_l/2} e^{-\Delta\tau V_l} e^{-\Delta\tau K_l/2} + O(\Delta\tau^4) N_\tau \quad (4.15)$$

peut facilement être incluse dans l'algorithme sans avoir à manipuler constamment des produits de $e^{-\Delta\tau K_l/2}$. En effet, en insérant cette forme de décomposition dans la formule des fonctions de Green (on omet les facteurs $-\Delta\tau$)

$$\begin{aligned} G &= \frac{1}{1 + e^{K/2} e^V e^{K/2} e^{K/2} e^{V'} e^{K/2} \dots e^{K/2} e^{V''} e^{K/2}}, \\ &= \frac{1}{1 + e^{K/2} e^V e^K e^{V'} e^K \dots e^K e^{V''} e^{K/2}}, \end{aligned} \quad (4.16)$$

il est facile de voir qu'une fonction de Green à temps égal de deuxième ordre, notée $G^{(2)}$, s'obtient de la fonction au premier ordre $G^{(1)}$ par un produit du genre

$$G^{(2)} = e^{-K/2} G^{(1)} e^{K/2}. \quad (4.17)$$

Par ce simple produit donc, on remplace une fonction de Green dont l'erreur systématique est $O(\Delta\tau^2)$ par une fonction d'erreur proportionnelle à $O(\Delta\tau^4)$. Notons toutefois que $G^{(2)}(\mathbf{k}, \tau) = G^{(1)}(\mathbf{k}, \tau)$. En effet,

$$\begin{aligned} \sum_{ij} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_i} [e^{-K/2} G^{(1)} e^{K/2}]_{ij} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_j} &= T_{ki} (e^{-K/2})_{ij} T_{jl}^{-1} T_{lm} G_{mn}^{(1)} T_{no}^{-1} T_{op} (e^{K/2})_{pj'} T_{j'k}^{-1} \\ &= (e^{-K/2})_k T_{km} G_{mn}^{(1)} T_{nk}^{-1} (e^{K/2})_k. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Un autre type de décomposition de deuxième ordre est

$$e^{-\beta H} = \prod_{l=1}^{N_\tau} e^{-\Delta\tau V_l/2} e^{-\Delta\tau K_l} e^{-\Delta\tau V_l/2} + O(\Delta\tau^4) N_\tau. \quad (4.19)$$

Ce type de décomposition de Trotter est plus difficile à traiter numériquement étant donné qu'il est impossible de simplifier les facteurs $e^{V/2}$ sur des tranches de temps différentes comme nous l'avons fait pour la décomposition en $e^{K/2}$. Toutefois, comme $e^{V/2}$ est une matrice diagonale, les calculs peuvent être simplifiés quelque peu.

- **Brisure de symétrie et choix d'estimateurs.** Nous avons souligné à plusieurs reprises que la plupart de propriétés des fonctions de Green sont valables uniquement au niveau de la summation complète des variables HS et non pour des configurations individuelles du champ. L'un des exemples flagrant de cette affirmation est une violation de la symétrie de rotation se traduisant par le fait que

$$S_z S_z \neq \frac{1}{2} (S_x S_x + S_y S_y), \quad (4.20)$$

pour une configuration donnée. Ce problème en soi est non-trivial et on réfère à [33, 8] pour une discussion plus détaillée. Notons pour notre part qu'un aspect subtil de ce problème concerne le choix d'un bon estimateur pour une quantité physique donnée. Dans l'exemple ci-haut, la susceptibilité magnétique peut être calculée soit en utilisant les données de $S_z S_z$ sur plusieurs configurations du champ, ou bien les données de $\frac{1}{2}(S_x S_x + S_y S_y)$. En pratique, il a été observé que les deux choix ne sont pas équivalents du point de vue des statistiques: à $U > 0$, les résultats obtenus en utilisant $S_z S_z$ comme estimateur convergent dix fois plus rapidement que les résultats obtenus avec l'autre estimateur (consulter [33] pour les références originales à ce problème). Puisque dans le modèle répulsif la transformation HS a pour effet de coupler les variables $x_{i,l}$ avec la composante de spin (terme $\lambda x_{i,l} [n_{i\uparrow} - n_{i\downarrow}]$), il n'est pas étonnant que les calculs statistiques d'une observable reliée à la magnétisation dépende du choix de la forme de la transformation.

- **Problème du signe.** Pour que la quantité (2.23) puisse servir de poids de Boltzmann dans le processus Monte Carlo, il faut absolument qu'elle soit une fonction définie positive du champ $\{x_{i,l}\}$. Malheureusement, pour certains paramètres de simulation, cela n'est pas toujours le cas. En fait, on peut démontrer qu'à demi-rempli, le poids de Boltzmann est toujours positif [12] de même qu'à $U < 0$, puisque dans ce dernier cas $(V_l^\sigma)_{ij}$ ne dépend pas de σ . En dehors de ces régions de paramètres, on s'attend cependant à ce que $\pi(\{x_{i,l}\})$ puisse être négatif. Comme la marche aléatoire définie sur la chaîne de Markov dans le calcul Monte Carlo ne peut absolument pas tenir compte du signe du poids probabiliste, il faut inclure ce signe directement en prenant la valeur absolue du produit des déterminants comme poids d'échantillonnage et inclure le signe lors du calcul des observables:

$$\langle O \rangle_{\text{mc}} = \frac{\sum_{\{x_{\text{mc}}\}} \langle O \rangle_{\{x\}}^0 \text{sgn } \pi(\{x_{i,l}\})}{\sum_{\{x_{\text{mc}}\}} \text{sgn } \pi(\{x_{i,l}\})}. \quad (4.21)$$

Le problème du signe dans ce contexte se présente lorsque le signe de $\pi(\{x_{i,l}\})$ devient trop souvent négatif et que $|\langle \text{sgn } \pi(\{x_{i,l}\}) \rangle| \simeq 0$. De grandes fluctuations sont alors introduites au niveau du calcul des valeurs moyennes $\langle O \rangle_{\text{mc}}$. Sans entrer dans les détails de cette limitation de l'algorithme (liée à l'antisymétrie de la fonction d'onde des fermions), mentionnons que plusieurs comportements de $\langle \text{sgn } \pi(\{x_{i,l}\}) \rangle$ en fonction de β et de $\langle n \rangle$ ont été établis numériquement (cf. [37, 33] et références citées).

Dans cette section, nous montrons comment il est possible d'extraire, par prolongement analytique, des propriétés spectrales à partir des fonctions de Green obtenues par simulation Monte Carlo quantique. Nous appelons poids spectral la quantité suivante:

$$A_\sigma(t, \mathbf{k}) = \left\langle \left\{ c_{\mathbf{k},\sigma}(t), c_{\mathbf{k},\sigma}^\dagger(0) \right\} \right\rangle. \quad (5.1)$$

Évidemment, $A_\sigma(\omega, \mathbf{k})$ désigne la transformée de fourier du poids spectral, et c'est plutôt à cette fonction que nous allons nous attarder. Cette dernière quantité est très intéressante puisqu'elle peut être comparée directement aux mesures expérimentales ARPES (*Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy*) et se prête plus facilement à l'interprétation physique. En effet, soit un système Ω de N électrons. Si on introduit dans ce système un électron (trou) de vecteur d'onde \mathbf{k} ($-\mathbf{k}$) et de spin σ ($-\sigma$) pour former un nouveau système Ω' de $N + 1$ ($N - 1$) électrons, alors la quantité $A_\sigma(\omega, \mathbf{k})$ représente la probabilité que la différence d'énergie entre les deux systèmes soit ω , i.e. $\wp[E_{\Omega'} - E_\Omega = \omega]$. Dans le reste de cette section, nous omettons l'indice du vecteur d'onde ainsi que celui du spin.

5.1. Prolongement analytique et problèmes mal posés

Le problème de prolongement analytique, formellement, consiste à relier la fonction de Green $G(\tau)$, définie sur l'axe de temps imaginaire, à $A(\omega)$ qui est une fonction de fréquences réelles en «prolongeant» le temps imaginaire en un temps réel $\tau \rightarrow t$ (rotation de Wick). Pour y arriver, on considère la relation

$$G(ik_n) = - \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{A(\omega)}{ik_n - \omega}, \quad (5.2)$$

établie dans [34, sec. 4.5.3], de même que la définition de la fonction de Green de Matsubara

$$T \sum_{ik_n} e^{-ik_n\tau} G(ik_n) = G(\tau), \quad T = \beta^{-1}, \quad (5.3)$$

pour obtenir

$$G(\tau) = -T \int \frac{d\omega}{2\pi} \left(\sum_{ik_n} \frac{e^{-ik_n\tau}}{ik_n - \omega} \right) A(\omega). \quad (5.4)$$

Le signe négatif vient de la définition de G utilisée dans les simulations Monte Carlo. La fonction de Green utilisée dans les calculs analytiques n'a pas ce signe négatif. La

somme entre parenthèse sur les fréquences de Matsubara s'évalue en utilisant divers trucs d'analyse complexe et on peut montrer, suivant [34, 1], que

$$G(\tau) = \int \frac{d\omega}{2\pi} A(\omega) \frac{e^{-\omega\tau}}{1 + e^{-\omega\beta}} = \langle c(\tau)c^\dagger(0) \rangle \quad (5.5)$$

où l'intégrale est prise sur toutes les fréquences. Dans le contexte de cette dernière équation, le problème du prolongement analytique se réduit donc à un problème en apparence fort simple: connaissant la fonction $G(\tau)$, nous cherchons la fonction $A(\omega)$ qui obéit à la relation (5.5) et qui est normalisée.

Pour les calculs numériques, la relation (5.5) doit être discrétisée de façon à obtenir la forme matricielle suivante

$$G(\tau_i) = \sum_j \frac{e^{-\omega_j \tau_i}}{1 + e^{-\beta \omega_j}} A(\omega_j) \frac{\Delta\omega}{2\pi} = \sum_j K_{ij} A_j \iff \mathbf{G} = \mathbf{K} \mathbf{A}. \quad (5.6)$$

Dans cette expression, $\mathbf{G} = [G(\tau_i)]$ représente le vecteur de données Monte Carlo calculées aux temps $\{\tau_i\}_{i=0\dots N_\tau}$, $\Delta\tau = \beta/N_\tau$, alors que $\mathbf{A} = [A(\omega_j)\Delta\omega/2\pi]$ est un vecteur de dimension M dont les éléments sont pris sur les fréquences $\{\omega_j = \omega_{\min} + j\Delta\omega\}_{j=0\dots M}$, $\Delta\omega = (\omega_{\max} - \omega_{\min})/2\pi M$. Ici, nous avons fixé un domaine de fréquences en dehors duquel le poids spectral est négligeable. En pratique, nous devons soit connaître la nature du problème pour choisir ce domaine, ou encore choisir un vaste domaine de fréquences quitte à le réajuster *a posteriori*. Suite à cette discrétisation, le problème du prolongement se ramène à inverser l'équation matricielle $\mathbf{G} = \mathbf{K} \mathbf{A}$, c.-à-d. à calculer $\mathbf{A} = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{G}$.

Remarques:

1. Le calcul $\mathbf{A} = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{G}$ est un problème *analytiquement mal posé* lorsque $M > N_\tau$; dans ce cas, il n'y a pas suffisamment d'information dans \mathbf{G} pour calculer une solution *unique* \mathbf{A} (rang matriciel insuffisant).
2. Le système linéaire $\mathbf{A} = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{G}$, en plus d'être mal posé, est un problème numériquement *mal conditionné*, du fait du conditionnement de la matrice \mathbf{K}^{-1} qui est généralement très élevé. Le fait que $\kappa(\mathbf{K}^{-1})$ soit élevé s'explique intuitivement en observant que \mathbf{K} agit comme un filtre passe-bas: plusieurs poids spectraux dont les formes diffèrent à haute fréquence donne généralement lieu à des fonctions de Green relativement semblables. À l'inverse, \mathbf{K}^{-1} agit comme un filtre passe-haut qui amplifie de façon extrême toute fluctuation ou erreur statistique contenue dans les données Monte Carlo.
3. Un troisième obstacle s'oppose au calcul de \mathbf{A} ; c'est l'origine même de la fonction de Green dont nous disposons. Cette dernière étant obtenue par échantillonnage statistique, elle nous est connue qu'approximativement et à chacun de ses points est associée une erreur statistique qui augmente le nombre potentiel de solutions \mathbf{A} même lorsque le système $\mathbf{A} = \mathbf{K}^{-1} \mathbf{G}$ est bien posé.

5.2. Algorithmes et méthodes de régularisation

La plupart des approches utilisées en pratique pour solutionner le problème de prolongement analytique mal posé et mal conditionné peuvent être regroupées en deux catégories. Dans la première on tente de modifier le système linéaire $\mathbf{A} = K^{-1}\mathbf{G}$ dans le but de le solutionner de façon stable (e.g. algorithme SVD plus bas), tandis que dans la deuxième catégorie, le problème d'inversion est réduit en un problème d'optimisation consistant à minimiser itérativement l'écart entre un poids spectral «test» $\mathbf{A}^{(n)}$ et la solution réelle du problème fournie par les données de \mathbf{G} . Cet écart est habituellement évalué à l'aide du test χ^2 largement utilisé en statistique afin de déterminer si un échantillonnage statistique obéit à une distribution de probabilité particulière. La formulation du test est fort simple, elle consiste à calculer la fonctionnelle¹

$$\chi_n^2 = \frac{\left(G_i - \sum_j K_{ij} A_j^{(n)}\right)^2}{\sigma_i^2} \quad (5.7)$$

où σ_i dénote l'écart-type de la fonction de Green obtenue par Monte Carlo au point i , et $\mathbf{A}^{(n)}$ le poids spectral calculé à l'itération n du problème d'optimisation. Le terme $K\mathbf{A}^{(n)}$ étant la fonction de Green associée au poids spectral à l'itération n , χ_n^2 mesure en fait l'écart entre cette fonction de Green et celle obtenue lors de la simulation. Cet écart en chaque point est pondéré par l'inverse de l'écart-type. Ainsi si pour un i donné, G_i nous est connu avec une très grande précision, l'écart en ce point sera d'une grande importance dans le χ^2 ; au contraire, si G_i ne nous est connu qu'à une faible précision, l'écart en ce point sera de moindre importance. Évidemment $\chi^2 = 0$ signifie que $\mathbf{A}^{(n)}$ est une des solution exacte du problème.

Le problème de minimisation, explicitement, est le suivant. Pour l'itération initiale $n = 0$, nous choisissons un poids spectral «par défaut» $\mathbf{A}^{(0)}$ noté aussi \mathbf{A}^D . En général, nous choisissons une constante satisfaisant à la condition de normalisation. Nous pouvons également choisir une fonction qui satisfait des contraintes supplémentaires; par exemple, si nous connaissons les moments d'ordre 1 et 2 du poids spectral, soient

$$\mu_{1j} = A_j \omega_j \Delta\omega \quad (5.8a)$$

$$\mu_{2j} = A_j \omega_j^2 \Delta\omega - \mu_{1j}^2, \quad (5.8b)$$

il est approprié de choisir la distribution Gaussienne

$$A_j^D = C \exp [-(\omega_j - \mu_{1j})^2 / 2\mu_{2j}] \quad (5.9)$$

respectant ces moments. Le modèle par défaut étant choisi, l'étape suivante du problème de minimisation vise à transformer $\mathbf{A}^{(0)}$ en un nouveau poids spectral $\mathbf{A}^{(1)}$ pour lequel $\chi_1^2 < \chi_0^2$. Par la suite, une seconde minimisation de χ_1^2 donne lieu à une transformation

¹Si nous connaissons les corrélations $\langle \delta G_i \delta G_j \rangle = C_{ij}$, nous utilisons la forme générale de la fonctionnelle $\chi^2 = (K_{ij} A_j - G_i) [C^{-1}]_{ii'} (K_{i'j'} A_{j'} - G_{i'})$.

$\mathbf{A}^{(1)} \rightarrow \mathbf{A}^{(2)}$, et ainsi de suite jusqu'à l'obtention d'une solution finale $\mathbf{A}^{(n)}$ choisie lorsque χ_n^2 est arbitrairement près de 0. Le résultat de la dernière itération est noté $\tilde{\mathbf{A}}$ et la nature exacte de la transformation $\mathbf{A}^{(n)} \rightarrow \mathbf{A}^{(n+1)}$ dépend de l'algorithme de minimisation utilisé.

L'approche que nous venons de décrire comporte un problème fondamental: dans la limite $\chi_n^2 \rightarrow 0$, nous obtenons un poids spectral qui correspond exactement à la fonction de Green qui, elle, n'est connue qu'approximativement. De ce fait, nous introduisons injustement de l'information dans le système en respectant des détails de la fonction de Green qui sont en réalité des fluctuations statistiques. Pour éviter ce problème, nous devons non seulement minimiser χ^2 , mais également l'information (biais ou particularité superflue) contenue dans le poids spectral. La fonction qui mesure l'information d'une distribution \mathbf{A} est

$$S = \sum_i \left(A_i - A_i^D - A_i \ln \frac{A_i}{A_i^D} \right), \quad (5.10)$$

(cette formule est légèrement différente de celle de Shannon [28] puisqu'elle mesure l'information relative à \mathbf{A}^D). Cette fonction, dont nous justifions l'introduction dans la prochaine section, porte le nom d'*entropie* puisqu'elle possède la même forme mathématique que l'entropie de Gibbs. Afin d'obtenir un poids spectral obéissant le plus possible à la fonction de Green tout en introduisant le moins possible d'information supplémentaire, nous devons minimiser la fonctionnelle $\chi^2 - \alpha S$, où α est un paramètre ajustable qui sera discuté plus amplement ci-dessous.

5.3. Méthodes d'inférence bayésienne

Dans ce qui précède, nous avons ajouté une contrainte entropique au terme χ^2 dans le but de «régulariser» la solution du problème de prolongement analytique. Cette contrainte fait apparaître un nouveau paramètre α qui pondère l'importance relative de la contrainte entropique. Dans la limite $\alpha \rightarrow 0$, nous retrouvons le résultat initial, soit celui où le poids spectral respecte trop précisément la fonction de Green; à l'opposé, lorsque $\alpha \rightarrow \infty$, la solution est $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}^D$, le modèle par défaut. Dans le but d'éliminer tout paramètre arbitraire, il est nécessaire d'associer une probabilité $\wp(\alpha_i | \mathbf{G})$ à chacun des α_i choisis dans un certain domaine, le vecteur \mathbf{G} étant connu. Le poids spectral final est la moyenne des poids spectraux obtenus par les différents α_i pondérés par leur probabilité respective

$$\tilde{\mathbf{A}} = \sum_i \wp(\alpha_i | \mathbf{G}) \tilde{\mathbf{A}}^{\alpha_i}. \quad (5.11)$$

Afin de déterminer la distribution $\wp(\alpha_i | \mathbf{G})$, nous avons recours au théorème de Bayes qui stipule dans le cas de deux événements a et b que

$$\wp(a, b) = \wp(a|b)\wp(b) = \wp(b|a)\wp(a) \quad (5.12)$$

où $\wp(a|b)$ est la probabilité conditionnelle d'obtenir a étant donné b alors que $\wp(a, b)$ est la probabilité conjointe des événements a et b . En appliquant deux fois ce théorème à

la probabilité $\wp(\mathbf{A}|\mathbf{G})$, nous trouvons [16]

$$\wp(\mathbf{A}|\mathbf{G}) = \frac{\wp(\mathbf{A}, \mathbf{G})}{\wp(\mathbf{G})} = \frac{\wp(\mathbf{G}|\mathbf{A})\wp(\mathbf{A})}{\wp(\mathbf{G})}. \quad (5.13)$$

Le vecteur \mathbf{G} étant fixé, $\wp(\mathbf{G})$ n'est qu'une constante et nous ne nous attardons donc qu'aux deux autres termes de l'équation, soient $\wp(\mathbf{G}|\mathbf{A})$ et $\wp(\mathbf{A})$.

Afin de déterminer la forme de $\wp(\mathbf{G}|\mathbf{A})$, nous utilisons une méthode dite de maximum de vraisemblance [31]. Cette méthode est largement utilisée en statistique lorsqu'une distribution possède des paramètres ajustables. En général, la nature du problème dicte la forme analytique de la fonction de vraisemblance. Ici, nous nous intéressons à la probabilité associée à une fonction de Green $\mathbf{G} = [G(\tau_i)]$ obtenue par simulation Monte Carlo, connaissant la forme du poids spectral $\mathbf{A} = [A(\omega_j)\Delta\omega/2\pi]$ à laquelle nous associons la fonction de Green $\mathbf{G}^A = [G^A(\tau_i) = \sum_j K_{ij}A_j]$. Chaque variable aléatoire $G(\tau_i)$ obéit à une fonction de vraisemblance $f[G(\tau_i), \mathbf{G}^A]$. En supposant l'indépendance statistique de chaque temps imaginaire, la fonction de vraisemblance associée à \mathbf{G} devient

$$dP = \prod_{i=0}^N f[G(\tau_i), \mathbf{G}^A] \quad (5.14)$$

$$\ln dP = \sum_{i=0}^N \ln f[G(\tau_i), \mathbf{G}^A] = L. \quad (5.15)$$

Sous l'hypothèse que les fluctuations statistiques Monte Carlo sont Gaussiennes, le théorème de la limite centrale nous indique que peu importe la forme de la fonction f , lorsque le nombre de mesures tend vers l'infini $dP = e^L = e^{-\chi^2/2}$, de sorte que $\wp(\mathbf{G}|\mathbf{A}) \propto e^{-\chi^2/2}$. Ceci justifie donc tout logiquement l'utilisation du test χ^2 comme test de vraisemblance d'une solution.

L'expression du second terme est obtenue en appliquant directement la méthode de l'entropie maximale, une variante du principe de vraisemblance fondée formellement sur certains théorèmes de la théorie de l'information dits *d'équipartition* [31, chaps. 3, 11]. Dans le cas où nous ne possédons aucune information sur le système, le principe d'entropie maximum stipule que la probabilité associée à un poids spectral est simplement $\wp(\mathbf{A}) \propto e^{\alpha S(\mathbf{A})}$. Notons que certains éléments d'information supplémentaires (contraintes, moments, etc.) peuvent être inclus dans cette formulation en les insérant dans le modèle par défaut. Ainsi, nous obtenons l'expression

$$\wp(\mathbf{A}|\mathbf{G}) \propto e^{-(\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S)}. \quad (5.16)$$

indiquant, comme nous l'avions anticipé, que le poids spectral \mathbf{A} qui maximise la probabilité $\wp(\mathbf{A}|\mathbf{G})$ est celui qui minimise la fonctionnelle $\chi^2 - \alpha S$, modulo une constante multiplicative qui peut être incluse dans α .

Dans le but d'obtenir la forme finale du poids spectral, nous utilisons à nouveau l'inférence Bayésienne pour écrire:

$$\wp(\mathbf{A}, \alpha | \mathbf{G}) = \wp(\mathbf{A}, \alpha, \mathbf{G}) / \wp(\mathbf{G}) \quad (5.17a)$$

$$= \wp(\mathbf{G} | \mathbf{A}, \alpha) \wp(\mathbf{A} | \alpha) \wp(\alpha) / \wp(\mathbf{G}) \quad (5.17b)$$

$$= \wp(\mathbf{G} | \mathbf{A}) \wp(\mathbf{A} | \alpha) \wp(\alpha) / \wp(\mathbf{G}) \quad (5.17c)$$

$$\propto \wp(\alpha) e^{-(\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S)} \quad (5.17d)$$

où nous avons supposé que la fonction de vraisemblance ne dépend pas de α . Ainsi,

$$\tilde{\mathbf{A}} = \iint D\mathbf{A} d\alpha \mathbf{A} \wp(\mathbf{A}, \alpha | \mathbf{G}) \quad (5.18a)$$

$$= \iint D\mathbf{A} d\alpha \mathbf{A} \wp(\mathbf{A} | \mathbf{G}, \alpha) \wp(\alpha | \mathbf{G}) \quad (5.18b)$$

$$\approx \int d\alpha \tilde{\mathbf{A}}^\alpha \wp(\alpha | \mathbf{G}). \quad (5.18c)$$

En général, on suppose que $\wp(\alpha | \mathbf{G})$ ne dépend pas de \mathbf{G} et on choisit la probabilité *a priori* sur α comme étant $\wp(\alpha) \propto 1/\alpha$. Ce choix est justifié par un raisonnement d'invariance d'échelle, $\wp(\alpha) d\alpha$ ne devant pas dépendre du choix de normalisation du poids spectral.

Dans ce qui suit, nous décrivons et comparons trois algorithmes solutionnant le prolongement analytique de données Monte Carlo. Deux de ces algorithmes appartiennent à la deuxième catégorie des méthodes de minimisation et contiennent la contrainte entropique.

5.4. Algorithme SVD

L'algorithme SVD (*Singular Value Decomposition*) est sans doute le plus simple et le plus rudimentaire de tous les algorithmes de prolongement analytique. Cette méthode n'impose pas de contrainte entropique; son principe repose entièrement sur un théorème fondamental de l'algèbre linéaire, soit la décomposition en valeurs singulières [29, p.321], (annexe B.2).

Théorème 1. *Toute matrice $m \times n$ peut être factorisée comme $A = U\Sigma V^T$ où U et V sont des matrices orthogonales et Σ est diagonale*

$$A = U\Sigma V^T = \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 & \dots & \mathbf{u}_m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_r & \\ 0 & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{v}_1 \\ \vdots \\ \mathbf{v}_r \\ \vdots \\ \mathbf{v}_n \end{pmatrix} \quad (5.18s)$$

$m \times m$ $m \times n$ $n \times n$

où les $\{\sigma_i\}_{i=1\dots r}$ sont les valeurs singulières de la matrice A .

En appliquant cette décomposition à la matrice K^T , éq.(5.6), il est simple d'inverser la relation reliant G à A . En effet, les matrices U et V étant orthogonales, leur inverse est simplement leur transposé. Cependant, l'inversion de la matrice Σ présente une difficulté puisque certains éléments de sa diagonale sont faibles, voire même nuls (du point de vue numérique). Pour cette raison, nous choisissons de travailler dans une base réduite où nous éliminons les valeurs singulières inférieures à une constante arbitraire ε . Nous éliminons également tout le sous-espace engendré par ces valeurs singulières. Nous obtenons ainsi la décomposition spectrale suivante: $K_{Ms}^T = U_{Ms} \Sigma_{ss} V_{ss}^T$ où s est le nombre de valeurs singulières supérieures à ε . Le poids spectral est donc trivialement obtenu par

$$A_j = \sum_{l=1}^s \sum_{i=0}^N U_{il} \sigma_l^{-1} V_{li}^T G_i = \sum_{l=1}^s \sum_{i=0}^N U_{il} \sigma_l^{-1} V_{li} G_i. \quad (5.20)$$

Le fait de travailler dans une base réduite affecte considérablement le résultat de $\mathbf{A}(\omega)$ à haute fréquence. En particulier, $A(\omega)$ devrait être négligeable en dehors d'un certain intervalle, ce qui n'est pas observé dans la base réduite. Pour cette raison, nous modifions le noyau K en le multipliant par une fonction porte $f(\omega)$ qui est unité à basse fréquence et qui s'annule à haute fréquence (par rapport à U). Nous choisissons la fonction

$$f(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta|\omega|/12-U}} \quad (5.21)$$

(le facteur 12 est choisi pour reproduire le plus fidèlement les résultats obtenus par les autres techniques).

Remarque:

1. Le programme de l'algorithme SVD est appelé `lsvd.f` et a comme fichier d'entrée `lsvd.dat`. Nous ne décrivons pas chacun des paramètres qui figurent dans ce dernier fichier puisqu'ils sont identiques et en plus petit nombre que ceux du programme basé sur l'algorithme de Bryan présenté dans la section suivante.

5.5. Algorithme de Bryan

L'algorithme développé par Bryan [5] est beaucoup plus subtil que la méthode SVD, malgré le fait qu'il partage la même idée de base qui est la décomposition en valeurs singulières de la matrice K . Bryan de son côté va beaucoup plus loin en utilisant une base vectorielle adaptée spécifiquement à la nature du problème de minimisation. Puisque l'essence même du problème est la minimisation de $\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S$ et que S contient des termes logarithmiques, nous choisissons une décomposition sur une base exponentielle. Les détails de la méthode peuvent être trouvés dans [5]; nous en faisons ici un survol.

Comme nous l'avons mentionné plus haut, nous devons d'abord projeter le problème de minimisation sur une base réduite engendrée par les valeurs singulières non-nulles (au sens numérique) de la matrice K ; nous noterons les projections des différentes matrices

par l'exposant (s) . Évaluons d'abord les composantes du gradient de l'entropie

$$(\nabla S)_j = \frac{\partial}{\partial A_j} \sum_l A_l - A_l^D - A_l \ln \frac{A_l}{A_l^D} = -\ln \frac{A_j}{A_j^D}. \quad (5.22)$$

La minimisation de $\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S$, qui s'exprime par un gradient nul, prend donc la forme

$$-\alpha \ln \frac{\mathbf{A}}{\mathbf{A}^D} = \frac{1}{2} \left(K^{(s)} \right)^T \frac{\partial \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}} = \frac{1}{2} U^{(s)} \Sigma^{(s)} (V^{(s)})^T \frac{\partial \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}} \quad (5.23)$$

où $\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{A})$ est simplement $K\mathbf{A}$. Cette dernière relation exprime simplement que le vecteur $\ln \mathbf{A}$ est une combinaison linéaire des colonnes de la matrice $U^{(s)}$. Il est donc justifié d'utiliser une décomposition exponentielle du poids spectral de la forme

$$A_j = A_j^D \exp \left[\sum_{t=1}^s U_{jt}^{(s)} u_t \right], \quad (5.24)$$

nous permettant de transformer l'éq.(5.23) comme suit:

$$-\alpha U^{(s)} \mathbf{u} = \frac{1}{2} U^{(s)} \Sigma^{(s)} (V^{(s)})^T \frac{\partial \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}}. \quad (5.25)$$

Les colonnes de $U^{(s)}$ étant orthogonales, nous multiplions à gauche par $(U^{(s)})^T$ les deux membres de l'équation pour obtenir:

$$-\alpha \mathbf{u} = \frac{1}{2} \Sigma^{(s)} (V^{(s)})^T \frac{\partial \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}} \equiv \mathbf{g} \quad (5.26)$$

Notons que cette décomposition sur une base exponentielle présente un net avantage sur toute autre décomposition puisqu'elle nous assure toujours d'un poids spectral positif, ce qui n'est pas toujours trivial.

Afin de résoudre cette égalité numériquement, nous devons au préalable introduire certaines notations. D'abord,

$$\nabla \nabla \frac{1}{2} \chi^2 = K^T \frac{\partial^2 \frac{1}{2} \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{A}), \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}^2(\mathbf{A})} K = U \Sigma V^T \frac{\partial^2 \frac{1}{2} \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{A}), \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}^2(\mathbf{A})} V \Sigma U^T \quad (5.27)$$

où le gradient est pris selon la variable \mathbf{A} . Cette dernière équation nous permet de définir une nouvelle matrice

$$M = \Sigma V^T \left[\partial^2 \frac{1}{2} \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G}) / \partial \tilde{\mathbf{G}}^2 \right] V \Sigma \quad (5.28)$$

de sorte que $\nabla \nabla \frac{1}{2} \chi^2 = U M U^T$. Nous introduisons également la matrice D définie par $D = U^T \text{diag} \{ \mathbf{A} \} U$. Cette nouvelle notation nous permet d'écrire

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}} = \frac{1}{2} \Sigma V^T \frac{\partial^2 \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}^2} V \Sigma U^T \text{diag} \{ \mathbf{A} \} U = M D \quad (5.29)$$

où nous avons utilisé la règle de chaîne

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}} = \frac{1}{2} \Sigma V^T \frac{\partial^2 \chi^2(\tilde{\mathbf{G}}, \mathbf{G})}{\partial \tilde{\mathbf{G}}^2} \frac{\partial \tilde{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{A}} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial \mathbf{u}}. \quad (5.30)$$

Nous tentons désormais de résoudre $\mathbf{g} + \alpha \mathbf{u} = 0$ de façon itérative. Soit \mathbf{u}_0 la solution de cette équation, alors

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}_0) + \alpha \mathbf{u}_0 = 0 \approx \mathbf{g}(\mathbf{u}) + \alpha \mathbf{u} + [\mathbf{g}'(\mathbf{u}) + \alpha \mathbf{1}] [\mathbf{u} - \mathbf{u}_0]. \quad (5.31)$$

Ainsi, l'incrément $\delta \mathbf{u}$ qui fait tendre \mathbf{u} vers \mathbf{u}_0 est donné par l'équation

$$(\alpha \mathbf{1} + MD) \delta \mathbf{u} = -\alpha \mathbf{u} - \mathbf{g}. \quad (5.32)$$

Cette équation peut être résolue par une simple méthode de diagonalisation. La connaissance de $\delta \mathbf{u}$ nous permet de calculer un nouveau $\mathbf{u} = \mathbf{u} + \delta \mathbf{u}$, donc un nouveau \mathbf{A} par l'éq.(5.24). Ce nouveau poids spectral nous permet de réévaluer les matrices M et D pour ainsi commencer une nouvelle itération.

Pour accélérer la convergence des premières itérations, nous utilisons une forme légèrement différente de l'équation (5.32), soit

$$((\alpha + \mu) \mathbf{1} + MD) \delta \mathbf{u} = -\alpha \mathbf{u} - \mathbf{g}. \quad (5.33)$$

Le facteur μ est généralement choisi de l'ordre de 1 dans les premières itérations et diminue lorsqu'on s'approche de la solution. Ce facteur permet également d'imposer un certain contrôle sur l'incrément $\delta \mathbf{u}$. En effet, on impose la condition $\delta \mathbf{u}^T K \delta \mathbf{u} \leq \sum_j A_j^D = 1$, à défaut de quoi l'incrément est refusé. De cette façon, nous nous assurons que l'incrément n'est pas plus grand que la fonction que nous incrémentons. Dans cette éventualité, on augmente μ , ce qui devrait nous permettre de trouver un plus petit incrément. Les itérations sont arrêtées lorsqu'un certain critère de convergence est satisfait. Puisque le programme tente de minimiser la quantité $\frac{1}{2} \chi^2 - \alpha S$, le test de convergence le plus simple vérifie que

$$\left[\frac{1}{2} \chi_n^2 - \alpha S_n \right] - \left[\frac{1}{2} \chi_{n-1}^2 - \alpha S_{n-1} \right] < \epsilon \left[\frac{1}{2} \chi_n^2 - \alpha S_n \right] \quad (5.34)$$

où ϵ est une petite constante arbitraire et où l'indice n désigne l'étape de l'itération. Bryan propose un test de convergence plus élaboré: plutôt que de vérifier la convergence de $\frac{1}{2} \chi^2 - \alpha S$, on s'attarde à la quantité

$$2 \left| \alpha \frac{\partial S}{\partial \mathbf{u}} - \frac{\partial \frac{1}{2} \chi^2}{\partial \mathbf{u}} \right|^2 / \left(\left| \alpha \frac{\partial S}{\partial \mathbf{u}} \right| + \left| \frac{\partial \frac{1}{2} \chi^2}{\partial \mathbf{u}} \right| \right)^2. \quad (5.35)$$

Intuitivement, nous voyons que ce critère compare le module de la différence des vecteurs gradients avec les vecteurs mêmes. En général, ce critère de convergence est plus difficile à satisfaire, en particulier pour des petites valeurs de α . Pour cette raison, les deux types de convergence sont optionnels dans la présente version du programme.

Dans ce qui suit, nous décrivons les paramètres d'entrée `bry.dat` du programme `bryan.f`:

moy	Prefixe		
5	Beta		β
1	Remplissage		
0	Mu sans U/2		
50	Nb points d'entree (TRAN)		N
4	U		U
8	N dimension X		
8	M dimension Y		
401	Nb points sortie (nw)		M
-10	wmin (0. pour les bosons)		ω_{\min}
10	wmax		ω_{\max}
20	Nb de valeurs de alpha (nalpha)		
1	alpha1		
10	alpha2		
5000	Nb d'itérations (niter)		
b	Type de test de convergence ''b'' Bryan ''s'' Simple		
2	Nb de vecteurs d'onde		
6	Nb options (nopt)		No.
y	Matrice de covariance		(1)
y	Imposer la symetrie de G		(2)
y	Moments du modèle par défaut		(3)
n	Doubler le nombre de mesures		(4)
y	Calculer le facteur de scaling		(5)
n	Calculer l'incertitude		(6)
n	Calcul de la susceptibilité		

	KX	KY	Scaling
	4	8	0.42
	2	2	1.3
			Alpha
			1.6
			0

1. *Matrice de covariance.* Fait appel aux corrélations entre les tranches de temps imaginaires (note en bas de page de la section 5.2). Si ces corrélations sont connues, le programme de prolongement analytique en tient compte lors du calcul de χ^2 . L'option de calcul de la matrice de covariance doit être choisie lors du calcul Monte Carlo.
2. *Imposer la symétrie de G.* Dans le cas demi-rempli, la transformation particule-trou (section 2.2) nous révèle une symétrie entre $G_{\mathbf{k}}(\tau)$ et $G_{\mathbf{k}+\boldsymbol{\pi}}(\beta - \tau)$ qui peut être utilisée afin de doubler le nombre de mesures. Cette option se traduit donc

par la simple transformation

$$G_{\mathbf{k}}(\tau) \rightarrow \frac{1}{2} (G_{\mathbf{k}}(\tau) + G_{\mathbf{k}+\boldsymbol{\pi}}(\beta - \tau)) \quad (5.36)$$

ainsi qu'une réévaluation des incertitudes statistiques.

3. *Moments du modèle par défaut.* Calcul les deux premiers moments du poids spectral pour ensuite utiliser un modèle par défaut Gaussien respectant ces contraintes. On utilise les formules suivantes pour fixer les moments [35]

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \left\langle \left\{ c_{\mathbf{k},\sigma}, c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle = 1 \quad (5.37a)$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \omega A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = \left\langle \left\{ [c_{\mathbf{k},\sigma}, (H - \mu N)], c_{\mathbf{k},\sigma}^{\dagger} \right\} \right\rangle = \epsilon_{\mathbf{k}} - \mu + U n_{-\sigma} \quad (5.37b)$$

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \omega^2 A_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) = (\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + 2U(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)n_{-\sigma} + U^2 n_{-\sigma} \quad (5.37c)$$

4. *Doubler le nombre de mesures.* Utilise simplement l'identité $G_{\mathbf{k}}(\tau) = G_{\mathbf{2}\boldsymbol{\pi}-\mathbf{k}}(\tau)$, afin de doubler le nombre de mesures comme le fait l'option 2 (en tout, il existe 16 symétries).
5. *Calcul du facteur de scaling.* [16] Ce facteur sert à corriger l'évaluation des incertitudes statistiques Monte Carlo de la fonction de Green, puisque cette dernière est évaluée sous l'hypothèse de l'indépendance statistique des mesures. En fait, cette option sert plutôt comme test de cohérence interne: si la correction proposée est négligeable, nous ne pouvons rien conclure, mais si la correction suggérée est importante, les incertitudes Monte Carlo sont probablement mal évaluées. L'inférence Bayésienne nous montre que

$$\wp(\alpha | \mathbf{G}, \mathbf{A}^D) = \prod_i \left(\frac{\alpha}{\alpha + \lambda_i} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left[-\frac{1}{2} \chi^2 + \alpha S \right] \wp(\alpha) \quad (5.38)$$

où $\{\lambda_i\}$ sont les valeurs propres de $\text{diag}\{\mathbf{A}\} \nabla \nabla \frac{1}{2} \chi^2 \text{diag}\{\mathbf{A}\}$. Ainsi, le α possédant la probabilité maximale doit obéir à l'équation

$$\frac{d\wp(\alpha | \mathbf{G})}{d\alpha} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad -2\alpha S = \sum_i \frac{\lambda_i}{\lambda_i + \alpha} = N_g. \quad (5.39)$$

Maintenant, on renormalise les incertitudes Monte Carlo en les multipliant par un facteur d'échelle (*scaling*) σ^* : $\sigma_i \rightarrow \sigma_i \times \sigma^*$, de sorte que $\chi^2 \rightarrow \chi^2/\sigma^{*2}$ et $\lambda_i \rightarrow \lambda_i/\sigma^{*2}$. Le même type de raisonnement Bayésien nous permet de conclure que le maximum de $\wp(\mathbf{G} | \alpha, \sigma^*)$, α étant fixé, doit respecter $\chi^2/\sigma^{*2} + N_g = N_{\tau}$, N_{τ} étant le nombre de tranches de temps imaginaire.

6. *Calcul de l'incertitude.* Il est difficile d'associer une incertitude à chaque fréquence du poids spectral en raison des fortes corrélations existant entre ces fréquences. Il est cependant possible d'évaluer l'incertitude associée à la quantité

$$H[\omega_1, \omega_2] = \int_{\omega_1}^{\omega_2} A(\omega) d\omega. \quad (5.40)$$

Un développement au deuxième ordre de la probabilité du poids spectral donne

$$\wp(\mathbf{A} | \mathbf{G}, \mathbf{A}^D, \alpha) \propto \exp - \left[\frac{1}{4} \delta \mathbf{A}^T \nabla \nabla (\chi^2 - 2\alpha S) \delta \mathbf{A} \right] \quad (5.41)$$

donc, une matrice de covariance donnée par

$$\langle \delta \mathbf{A}(\omega) \delta \mathbf{A}(\omega') \rangle = -\nabla \nabla \left(\frac{1}{2} \chi^2 - \alpha S \right)^{-1}. \quad (5.42)$$

Ainsi, l'incertitude associée à la quantité $H[\omega_1, \omega_2]$ est

$$\langle \delta H^2[\omega_1, \omega_2] \rangle = \iint_{\omega_1 \omega_1}^{\omega_2 \omega_2} d\omega d\omega' \langle \delta \mathbf{A}(\omega) \delta \mathbf{A}(\omega') \rangle. \quad (5.43)$$

Remarques:

1. Pour utiliser le résultat de l'option (5), nous devons faire un premier prolongement analytique en activant le calcul du facteur de scaling et en fixant le scaling à 1 pour chaque vecteur d'onde et en laissant varier α sur une plage de fréquences donnée. Ceci peut être accompli en choisissant des valeurs limites α_{\min} et α_{\max} et en fixant le paramètre α de chaque vecteur d'onde à 0. Suite à ce calcul, nous connaissons la valeur optimale de α ainsi que le facteur d'échelle suggéré par l'analyse des données. Afin d'utiliser ces résultats, nous effectuons un second prolongement analytique en précisant, pour chaque vecteur d'onde, la valeur optimale de α ainsi que le scaling suggéré.
2. Il est possible d'évaluer des incertitudes sur le poids spectral à l'aide de la distribution de probabilité sur α . Pour chaque ω_i , nous calculons l'incertitude

$$\sigma^2(\omega_i) = \sum_j [A^{\alpha_j}(\omega_i)]^2 \wp(\alpha_i) - \left[\sum_j A^{\alpha_j}(\omega_i) \wp(\alpha_i) \right]^2. \quad (5.44)$$

3. Il existe plusieurs symétries pouvant être utilisées en fonction du problème étudié. Par exemple, si nous étudions un système carré et que $t_x = t_y$, il doit y avoir symétrie d'échange $x \leftrightarrow y$. En tout, il existe jusqu'à 16 symétries pouvant être utilisées (en comptant les combinaisons). Elles sont présentes dans les versions les plus récentes du programme.

5.6. Algorithme de Meshkov

Le dernier algorithme que nous présentons est l'algorithme de Meshkov [30]. L'idée derrière cet algorithme est de transformer le problème du prolongement analytique en un problème de minimisation d'une fonction quadratique avec des contraintes linéaires. Contrairement à l'algorithme de Bryan, l'algorithme de Meshkov n'exploite pas la nature particulière du problème de minimisation, soit la forme logarithmique de la mesure d'information. Afin de se défaire de cette dépendance logarithmique, nous développons au deuxième ordre en $A(\omega)$ la contrainte entropique près d'une fonction positive f

$$S[A] = \int \left[A^D - A + A \ln \left(\frac{A}{A^D} \right) \right] d\omega \quad (5.45a)$$

$$S[A|f] = \int \left\{ \left(A^D - \frac{f}{2} \right) + \left[\ln \left(\frac{f}{A^D} \right) + 1 \right] A + \frac{A^2}{2f} \right\} d\omega + O(A^3). \quad (5.45b)$$

En particulier, si f est choisie comme le minimum de l'éq.(5.45a), alors la fonction A qui minimise (5.45b) est également le minimum de l'entropie (5.45a).

À première vue, il semble que le problème se réduit à trouver une solution de façon itérative en utilisant la règle:

$$A^{(n+1)}(\omega) = \min_A \left[\frac{1}{2} \chi_A^2 - \alpha S[A|A^{(n)}] \right]. \quad (5.46)$$

Or, dès la première itération, on voit apparaître certaines plages de fréquences où $A(\omega) < 0$. Évidemment, puisque $A(\omega)$ représente une probabilité, ce genre de solution est inacceptable. Afin de résoudre ce problème, et pour des raisons de stabilité numérique, nous choisissons plutôt la règle suivante:

$$A^{(n+1)}(\omega) = \min_{A>0} \left[\frac{1}{2} \chi_A^2 - \alpha S[A|f^{(n)}] \right], \quad f^{(n)} = (1 - \xi)A^{(n)} + \xi A^{(n-1)} \quad (5.47)$$

où $\xi \in [0, 1]$ est un paramètre ajustable et où $A^{(0)}(\omega) = A^{(-1)}(\omega) = A^D(\omega)$. En général, on utilise $\xi \sim 0.3$. Le résultat final n'est pas sensible à ce paramètre, seul le temps de calcul en est affecté.

Il est à noter que l'argument du min de l'éq.(5.47) impose une contrainte supplémentaire sur le problème. Afin de résoudre ce problème, Meshkov utilise une méthode de résolution directe basée sur une décomposition en valeurs singulières. Après avoir discrétisé le poids spectral, la fonction que nous tentons de minimiser à la $n + 1$ ^{ème} itération peut s'écrire sous la forme²

$$F\{\mathbf{A}\} = \frac{1}{2} \chi_{\mathbf{A}}^2 - \alpha S_{\mathbf{A}} \quad (5.48a)$$

²Encore une fois, cette équation peut être généralisée dans le cas où nous connaissons les corrélations $\langle \delta G_j \delta G_{j'} \rangle = C_{jj'}$. Nous devons seulement modifier la définition de χ^2 .

$$= \frac{1}{2} \sum_i \sigma_i^{-2} \left(G_i - \sum_j K_{ij} A_j \right)^2 \quad (5.48b)$$

$$+ \alpha \sum_j \left\{ \left[\ln \left(\frac{f_j^{(n)}}{A_j^D} \right) - 1 \right] A_j + \frac{A_j^2}{2f_j^{(n)}} \right\}$$

$$\equiv - \sum_j F'_j \left(\mathbf{f}^{(n)} \right) A_j + \frac{1}{2} \sum_{ij} F''_{ij} \left(\mathbf{f}^{(n)} \right) A_i A_j + cte \quad (5.48c)$$

au second ordre. Évidemment, s'ajoutent à cette équation quadratique les M contraintes de positivité $A_j \geq 0$. Les coefficients de l'éq.(5.48c) sont donnés par (5.48b); ils sont explicitement

$$F'_j \left(\mathbf{f}^{(n)} \right) \equiv \sum_i \sigma_i^{-2} G_i K_{ij} - \alpha \left[\ln \left(\frac{f_j^{(n)}}{A_j^D} \right) - 1 \right] \quad (5.49a)$$

$$F''_{ij} \left(\mathbf{f}^{(n)} \right) \equiv \sum_l \sigma_l^{-2} K_{li} K_{lj} + \alpha \frac{\delta_{ij}}{f_j^{(n)}} \quad (5.49b)$$

Nous devons par la suite diagonaliser la matrice du terme quadratique de la forme $F'' = U\Phi U^T$ ou encore $F''_{ij} = \sum_l U_{il} \phi_l U_{jl}$. À l'aide de cette transformation, nous effectuons une substitution

$$A_i = \sum_j U_{ij} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} (\bar{\psi}_j + \psi_j), \quad \bar{\psi}_j \equiv \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} \sum_l U_{lj} F'_l. \quad (5.50)$$

Nous réécrivons maintenant l'éq.(5.48c) à l'aide de ces nouvelles définitions. Cette partie est simple mais tout de même très calculatoire. Nous utilisons la convention des indices répétés afin d'alléger la notation et omettons temporairement la constante additive:

$$F = -F'_h A_h + \frac{1}{2} F''_{hk} A_h A_k \quad (5.51a)$$

$$= -F'_h U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} (\bar{\psi}_j + \psi_j) + \frac{1}{2} F''_{hk} U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} (\bar{\psi}_j + \psi_j) U_{ki} \frac{1}{\sqrt{\phi_i}} (\bar{\psi}_i + \psi_i) \quad (5.51b)$$

$$= -F'_h U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} \left(\frac{1}{\sqrt{\phi_j}} U_{lj} F'_l + \psi_j \right)$$

$$+ \frac{1}{2} F''_{hk} U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} \left(\frac{1}{\sqrt{\phi_j}} U_{lj} F'_l + \psi_j \right) U_{ki} \frac{1}{\sqrt{\phi_i}} \left(\frac{1}{\sqrt{\phi_i}} U_{mi} F'_m + \psi_i \right) \quad (5.51c)$$

$$= -F'_h F'_l U_{hj} U_{lj} \frac{1}{\phi_j} - F'_h U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} \psi_j + \frac{1}{2} F''_{hk} U_{hj} U_{ki} U_{lj} U_{mi} \frac{1}{\phi_j \phi_i} F'_l F'_m$$

$$+ F''_{hk} U_{hj} U_{ki} U_{lj} F'_l \frac{1}{\phi_j \sqrt{\phi_i}} \psi_i + \frac{1}{2} F''_{hk} U_{hj} U_{ki} \frac{1}{\sqrt{\phi_j} \sqrt{\phi_i}} \psi_j \psi_i. \quad (5.51d)$$

Maintenant, en substituant la forme diagonale de la matrice F'' , nous obtenons

$$\begin{aligned} F &= -F'_h F'_l U_{hj} U_{lj} \frac{1}{\phi_j} - F'_h U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} \psi_j + \frac{1}{2} U_{hr} \phi_r U_{kr} U_{hj} U_{ki} U_{lj} U_{mi} \frac{1}{\phi_j \phi_i} F'_l F'_m \\ &+ U_{hr} \phi_r U_{kr} U_{hj} U_{ki} U_{lj} F'_l \frac{1}{\phi_j \sqrt{\phi_i}} \psi_i + \frac{1}{2} U_{hr} \phi_r U_{kr} U_{hj} U_{ki} \frac{1}{\sqrt{\phi_j} \sqrt{\phi_i}} \psi_j \psi_i. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Finalement, en utilisant l'orthogonalité de la matrice U , c.-à-d. la propriété $U_{ik} U_{jk} = \delta_{ij}$, on trouve

$$\begin{aligned} F &= -F'_h F'_l U_{hj} U_{lj} \frac{1}{\phi_j} - F'_h U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} \psi_j + \frac{1}{2} U_{kj} U_{ki} U_{lj} U_{mi} \frac{1}{\phi_i} F'_l F'_m \\ &+ U_{kj} U_{ki} U_{lj} F'_l \frac{1}{\sqrt{\phi_i}} \psi_i + \frac{1}{2} \sqrt{\phi_j} U_{kj} U_{ki} \frac{1}{\sqrt{\phi_i}} \psi_j \psi_i \end{aligned} \quad (5.53a)$$

$$\begin{aligned} &= -F'_h F'_l U_{hj} U_{lj} \frac{1}{\phi_j} - F'_h U_{hj} \frac{1}{\sqrt{\phi_j}} \psi_j + \frac{1}{2} U_{li} U_{mi} \frac{1}{\phi_i} F'_l F'_m \\ &+ U_{lj} F'_l \frac{1}{\sqrt{\phi_i}} \psi_i + \frac{1}{2} \psi_i \psi_i \end{aligned} \quad (5.53b)$$

$$= -\frac{1}{2} F'_h F'_l U_{hj} U_{lj} \frac{1}{\phi_j} + \frac{1}{2} \psi_i \psi_i, \quad (5.53c)$$

ou, plus explicitement, $F\{\mathbf{A}\} = \frac{1}{2} \|\psi\|^2 + cte$. Ainsi, minimiser $F\{\mathbf{A}\}$ revient à minimiser $\|\psi\|^2$. La contrainte de positivité se traduit simplement par une contrainte linéaire donnée par l'éq.(5.50)

$$\sum_j \Gamma_{ij} \psi_j \geq \gamma_i; \quad \Gamma_{ij} = \frac{U_{ij}}{\sqrt{\phi_j}}, \quad \gamma_i = -\sum_j \Gamma_{ij} \bar{\psi}_j. \quad (5.54)$$

Nous avons donc transformé le problème de prolongement analytique en un problème de moindres carrés sous contrainte linéaire. Ce genre de problème peut facilement être résolu à l'aide de routines connues sous la dénomination *NNLS (Non-Negative Least Squares)* disponibles dans les bibliothèques de calcul numérique courantes.

Remarque:

1. Le fichier de paramètres du programme de l'algorithme de Meshkov, appelé `mesh.f`, est `input.dat`. Encore une fois, nous ne décrivons pas chacun des paramètres qui y figurent puisqu'ils sont identiques et en plus petit nombre que ceux du programme basé sur l'algorithme de Bryan, exception faite du paramètre ξ décrit ci-haut.

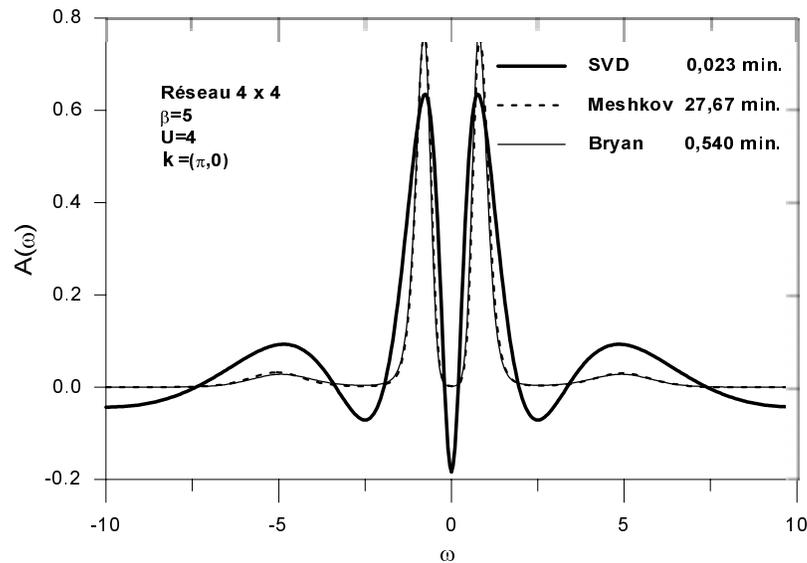


Figure 5.1: Poids spectraux obtenus par prolongement analytique de données d’une simulation Monte Carlo de 300 000 mesures. Les temps requis par les différentes approches sont indiqués sur la figure.

5.7. Comparaison des algorithmes

Nous allons maintenant comparer les résultats obtenus par les différents algorithmes de prolongement analytique. L’avantage principal de l’algorithme SVD est sa rapidité. Typiquement, le prolongement analytique est effectué en quelques secondes. Cependant, le résultat final ne peut servir que qualitativement. En effet, la fonction porte utilisée pour restreindre le noyau K aux hautes fréquences introduit un paramètre arbitraire, soit la fréquence de coupure. Le poids spectral est très fortement influencé par ce paramètre et, malheureusement, nous ne possédons aucun moyen de le fixer. De plus, les poids spectraux obtenus à l’aide de cet algorithme sont parfois négatifs, ce qui est impossible physiquement. Néanmoins, étant donnée sa grande rapidité, l’algorithme SVD peut servir de test préliminaire ou encore de comparaison. En général, il accentue les structures perçues par les autres algorithmes (figure 5.1), probablement en raison de l’absence de contrainte entropique. En particulier, si nous n’observons pas de pseudo-gap dans le poids spectral obtenu par SVD, il est à parier que nous en observerons jamais. Outre sa grande rapidité, cet algorithme présente l’avantage d’être très «robuste» en ce sens que l’exécution se rend à terme à chaque fois sous une seule condition: le noyau K doit être numériquement diagonalisable.

L’algorithme de Meshkov semble donner des résultats fiables. Cependant, son utilisation a été délaissée en raison du temps qu’il requière à l’exécution, typiquement de l’ordre de 30 minutes sur un super-ordinateur. De plus, sa robustesse est de loin infé-

rieure à celle de l'algorithme SVD; il est possible que la routine de minimisation d'un carré sous contrainte de positivité (NNLS) ne puisse vérifier les critères de convergence, ce qui stoppe l'exécution. Du reste, lorsque l'exécution se rend à terme, le résultat semble physiquement acceptable.

Nous utilisons principalement l'algorithme de Bryan, puisque ce dernier semble être le compromis idéal entre la qualité du résultat et le temps d'exécution, qui est de l'ordre de la minute. Quant à la qualité du spectre et la robustesse de l'algorithme, elles sont *grosso modo* les mêmes que celles de l'algorithme de Meshkov, variant d'un cas à l'autre. Le principal défaut de l'algorithme de Bryan est son extrême sensibilité aux erreurs statistiques Monte Carlo. Jarrell [16] propose un test permettant de vérifier si l'évaluation des erreurs statistiques semble conforme au résultat obtenu (option 5 décrite à la section 5.5). Toutefois, nous devons nous méfier avant de systématiquement renormaliser les barres d'erreurs car il est possible que la fonction de Green $G(\tau)$ soit parfaitement lisse tout en possédant de grandes barres d'erreur, par exemple, si la fonction de Green est obtenue en faisant la moyenne statistique de plusieurs simulations, chacune ayant «collé» dans un différent sous-espace des phases. Dans cette éventualité, la renormalisation des erreurs serait injustifiée.

Face à ce problème, il est tentant de vouloir formuler une méthode systématique nous permettant d'appliquer correctement le facteur σ^* , enlevant ainsi toute subjectivité du problème de prolongement analytique. Le programme `bryan.f` est l'accomplissement d'une telle tentative. La motivation principale qui nous conduit à ce programme est la déformation du problème de minimisation introduite par le paramètre α non nul. En effet, la contrainte entropique est introduite afin de nous permettre de choisir parmi tous les poids spectraux qui minimisent χ^2 celui qui est le moins «biaisé» par rapport à l'information statistique contenue dans la fonction de Green. Cependant, la fonction qui minimise $\chi^2 - \alpha S$ ne minimise pas nécessairement χ^2 . Le programme `bryan.f` règle ce problème en ajoutant une itération sur le modèle par défaut \mathbf{A}^D . En résumé, à chaque itération, α est fixé à $\chi^2(\mathbf{A}^D)$ et \mathbf{A}^D est fixé à la solution de l'itération précédente. Ainsi, après un grand nombre d'itérations, αS tend vers 0 nous assurant ainsi que le résultat final est un minimum de χ^2 . La contrainte entropique nous sert seulement de guide pour se diriger vers la solution qui minimise l'information. Cette astuce élimine également le problème du scaling puisque ce dernier ne joue plus aucun rôle lorsque la contrainte entropique disparaît du problème. En général, cette approche semble donner de bons résultats, comme l'illustrent les fines structures sur la figure 5.2. Nous ne pouvons pas toujours utiliser une telle méthode systématique puisqu'il est parfois nécessaire d'exercer un contrôle sur le facteur de scaling, comme mis en évidence dans [9].

Quelques critères de qualité

Pour les quantités spectrales, nous pouvons distinguer deux types de facteurs de qualité: la qualité *physique* et la qualité *numérique*. La qualité physique reflète l'accord avec les prédictions physiques, les moments étant les seuls critères de comparaison quantitatifs dont nous disposons. En général, ils sont respectés jusqu'au troisième chiffre significatif

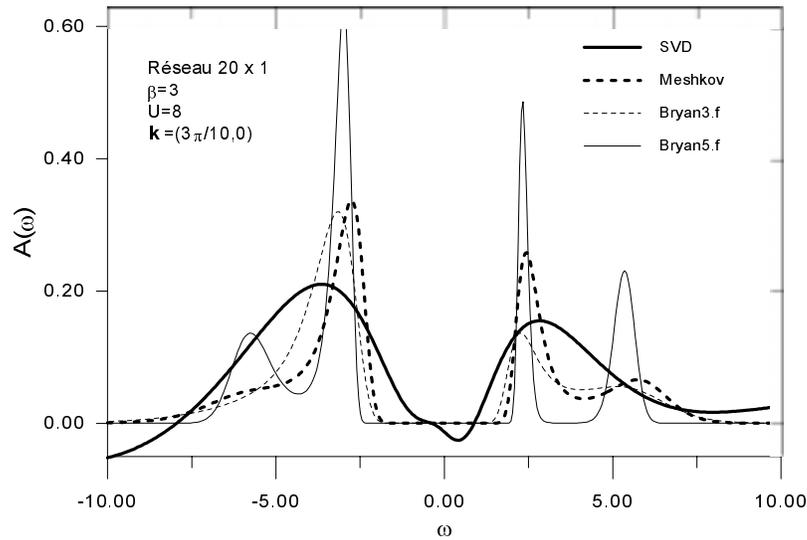


Figure 5.2: Poids spectraux obtenus par prolongement analytique de données d'une simulation Monte Carlo de 196 000 mesures.

par les algorithmes de Bryan et de Meshkov! De plus, cet accord nous permet de valider, en partie, nos simulations Monte Carlo, puisque toute l'information contenue dans le poids spectral est présente dans la fonction de Green, y compris les moments.

La qualité numérique nous indique simplement comment s'est effectuée la minimisation de la quantité $\frac{1}{2}\chi^2 - \alpha S$. Ceci peut être vérifié très simplement en notant la valeur numérique finale de la quantité même. En général, il est préférable que cette dernière soit inférieure ou de l'ordre du nombre de tranche de temps imaginaire N_τ . De plus, les deux termes devraient contribuer également, c.-à-d. $\frac{1}{2}\chi^2 \approx -\alpha S \lesssim \frac{1}{2}N_\tau$. Il est également possible de juger directement de la qualité numérique en comparant la fonction de Green Monte Carlo au vecteur final $\mathbf{G} = K\tilde{\mathbf{A}}$.

Il est à noter que les deux facteurs de qualité ne vont pas de pair: il est fort possible que la qualité numérique soit excellente sans toutefois qu'il y ait accord avec les prédictions physiques, et ce pour deux raisons. La première est que les données obtenues par simulation Monte Carlo peuvent être mauvaises dû à un manque de mesures ou un problème de collement. La seconde est que, par définition, un problème mal posé est un problème à solution non unique. À l'aide des algorithmes d'entropie maximum, nous choisissons, parmi l'ensemble des solutions, celle qui minimise l'entropie. Or, il est possible que cette solution ne soit pas la solution physique.

Annexe A | Éléments d'analyse numérique matricielle

A.1. Normes vectorielle et matricielle

Une norme vectorielle (ou matricielle) sur \mathbb{R}^n (ou $\mathbb{R}^{n \times m}$, $\mathbb{R}^{n \times m}$ étant isomorphe à \mathbb{R}^n) est une application $\|\cdot\| : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ satisfaisant les propriétés suivantes:

1. $\|0\| = 0$
2. $\|x\| \geq 0$, $x \in \mathbb{R}^n$
3. $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$, $x, y \in \mathbb{R}^n$
4. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|$, $\alpha \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n$.

Définition 1. Une norme est dite consistante [11] lorsque $\|Au\| \leq \|A\| \|u\|$ ou $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$ ($u \in \mathbb{R}^n; A, B \in \mathbb{R}^{n \times m}$).

La norme vectorielle la plus connue est sans nul doute la norme euclidienne qui est un cas particulier de la p -norme de Hölder:

$$\|x\|_p^p = \sum_{i=1}^n |x_i|^p, \quad p \geq 1. \quad (\text{A.1})$$

qui obéit à la propriété suivante:

$$|x^T y| \leq \|x\|_p \|y\|_q, \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1. \quad (\text{A.2})$$

Le cas $p = q = 2$ correspond évidemment à l'inégalité de Cauchy-Schwarz.

Parmi les normes matricielles, mentionnons la norme de Frobenius

$$\|A\|^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m |a_{ij}|^2, \quad (\text{A.3})$$

qui est aussi une norme consistante. C'est cette norme qui sera sous-entendue dans nos calculs de la section sur le conditionnement. Mentionnons finalement que la norme euclidienne ainsi que la norme de Frobenius sont invariantes sous transformations orthogonales (ou unitaires si les normes sont généralisées aux nombres complexes):

$$\|Qx\|_2 = \|x\|_2, \quad Q^T Q = 1 \quad (\text{A.4a})$$

$$\|UAV\| = \|A\|, \quad U^T U = V^T V = 1. \quad (\text{A.4b})$$

A.2. Décomposition en valeurs singulières

Une décomposition en valeurs singulières d'une matrice carrée $A^{n \times n}$ est une factorisation matricielle de la forme [38]

$$A = U\Sigma V^T, \quad (\text{A.5})$$

où $U^T = U^{-1}$, $V^T = V^{-1}$ et où $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ avec $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$. Les σ_i sont appelées les *valeurs singulières* de la matrice A . Cette factorisation est unique sous permutations des colonnes de A et dans le cas d'une matrice hermitique ($A^\dagger = A$), les valeurs singulières sont reliées aux valeurs propres λ_i de A par la relation $\sigma_i = \lambda_i^2$.

Comme U et V sont des matrices orthogonales, il est facile de résoudre le système linéaire $Ax = b$ à l'aide de la décomposition en valeurs singulières de A . Pour ce faire, on utilise la formule

$$x = (U\Sigma V^T)^{-1} b = V \text{diag}(1/\sigma_i) U^T b = \sum_{i=1}^n \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i, \quad (\text{A.6})$$

qui souligne d'emblée l'effet de σ_i sur la précision numérique de x . En effet, si l'erreur sur b est de l'ordre de ξ , alors l'imprécision sur x ira comme $\xi / \min(\sigma_i)$, donc, si l'une des valeurs singulières est pratiquement nulle, la solution calculée numériquement peut s'éloigner de la solution exacte de plusieurs ordre de grandeurs et peut tout aussi bien être incalculable si l'une des valeurs singulières est inférieure à l'epsilon machine¹. D'ailleurs, une matrice est singulière (non-inversible) si et seulement si l'une de ses valeurs singulières est nulle.

A.3. Conditionnement

Analytiquement, on distingue deux classes de matrices lorsque l'on considère la solution d'un système linéaire de la forme $Au = b$. Il y a d'abord les matrices singulières ($\det A = 0$) pour lesquelles il n'existe pas de solution unique au système puis les matrices non-singulières (inversibles) avec lesquelles on construit une solution unique. Au niveau numérique, l'analyse faite précédemment semble indiquer qu'il faille ajouter une troisième classe correspondant aux matrices quasi ou numériquement singulières. Les trois exemples qui suivent indiquent de quelle façon cette nouvelle classe peut être définie.

Exemple 1. [7, p. 30] Soit une matrice A ainsi que u et $u + \Delta u$, les solutions des deux systèmes linéaires

$$Au = b \quad (\text{A.7a})$$

$$A(u + \Delta u) = b + \Delta b. \quad (\text{A.7b})$$

¹L'epsilon machine (ε) est défini comme étant la plus petite valeur positive telle qu'au niveau de la machine, $1 + \varepsilon = 1$. En Fortran 90, cette valeur est fournie par la fonction intrinsèque EPSILON.

De (A.7b), on tire $\Delta u = A^{-1}\Delta b$ et en utilisant une norme consistante, on obtient $\|\Delta u\| \leq \|A^{-1}\| \|\Delta b\|$. En supposant finalement que $b \neq 0$, l'inégalité suivante est vérifiée:

$$\frac{\|\Delta u\|}{\|u\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}. \quad (\text{A.8})$$

Exemple 2. [7, p. 30] Soit le système $(A + \Delta A)(u + \Delta u) = b$. Suivant des étapes similaires à ce qui a été fait dans l'exemple précédent, l'inégalité suivante peut être dérivée:

$$\frac{\|\Delta u\|}{\|u + \Delta u\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}. \quad (\text{A.9})$$

Exemple 3. [10] Soit le système linéaire $(A + \varepsilon F)u(\varepsilon) = b + \varepsilon f$ auquel on a ajouté une perturbation paramétrisée par ε . En développant $u(\varepsilon)$ linéairement autour de la solution non-perturbée $u(0)$

$$u(\varepsilon) = u(0) + \varepsilon \dot{u}(0) + O(\varepsilon^2), \quad (\text{A.10})$$

et en utilisant une norme consistante, il est possible de dériver l'inégalité suivante:

$$\frac{\|u(\varepsilon) - u\|}{\|u\|} \leq \|A^{-1}\| \|A\| (\rho_A + \rho_b) + O(\varepsilon^2), \quad (\text{A.11})$$

où

$$\rho_A = \varepsilon \frac{\|F\|}{\|A\|} \quad \rho_b = \varepsilon \frac{\|f\|}{\|b\|} \quad (\text{A.12})$$

représentent respectivement l'incertitude absolue de A et de b découlant de la perturbation.

Exemple 4. Considérons le produit $AA = B$ et une perturbation à ce produit

$$(A + \delta A)(A + \delta A) = B + \delta B. \quad (\text{A.13})$$

En supposant que $[A, \delta A] = 0$ et en négligeant le terme δA^2 , on trouve aisément que $2A\delta A \simeq \delta B$, et donc

$$\frac{\|\delta B\|}{\|B\|} \sim \|A^{-1}\| \|A\| \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}. \quad (\text{A.14})$$

Définition 2. Le conditionnement ou le nombre de conditionnement (condition number) $\kappa(A)$ d'une matrice A , ou d'un système linéaire représenté par A , est

$$\kappa(A) = \|A^{-1}\| \|A\|. \quad (\text{A.15})$$

Comme les exemples précédents le démontrent, $\kappa(A)$ mesure la sensibilité de la solution du système linéaire $Au = b$ ou du calcul de produits matriciels vis-à-vis des variations sur A ou b . Ainsi, un système ou un problème sera dit *mal conditionné* [7] ou *incorrectement posé* (*ill-posed*) lorsque son conditionnement sera très grand ($\kappa(A) \rightarrow \infty$) et à l'inverse, bien conditionné lorsque κ sera de l'ordre de l'unité. En outre, il est possible

de démontrer [10, 38] que $\kappa(A)$ peut être interprétée formellement comme une métrique définie dans l'espace des matrices mesurant la distance relative de A par rapport à l'ensemble des matrices singulières.

Remarques:

1. Il est possible d'imaginer plusieurs définition du conditionnement en utilisant diverses normes matricielles. Cependant, toutes ces définitions sont équivalentes du fait que toutes les normes matricielles sont reliées par des constantes multiplicatives [10].
2. Le conditionnement d'une matrice ne doit pas être considéré dans un sens trop large: un système linéaire $Au = b$ peut être mal conditionné alors que la recherche des valeurs propres de A peut être un problème bien conditionné.
3. Même si le déterminant est une mesure de singularité, il n'est pas une mesure de conditionnement car il existe des matrices A telles que $\det(A) \approx 0$ et $\kappa(A) \approx 1$.

Théorème 2. [7, p. 31] *Pour toute matrice A ,*

1. $\kappa(A) \geq 1$
2. $\kappa(A) = \kappa(A^{-1})$
3. $\kappa(\alpha A) = \kappa(A)$, pour tout scalaire $\alpha \neq 0$
4. $\kappa(A) = 1$ si A unitaire ou orthogonale
5. $\kappa(A)$ est invariant sous transformation orthogonale ou unitaire

Théorème 3. [7] *Soit $\|\cdot\|_2$, la norme matricielle euclidienne et A , une matrice carrée quelconque. Alors,*

$$\kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\max(\sigma_i)}{\min(\sigma_i)}. \quad (\text{A.16})$$

où σ_i sont les valeurs singulières de A .

Une approximation de $\kappa(A)$, très utilisée en pratique, est

$$\kappa(A) = \frac{\max(\lambda_i)}{\min(\lambda_i)}, \quad (\text{A.17})$$

où λ_i dénotent les valeurs propres de A .

Annexe B | Relations de dispersion pour les électrons libres

On présente ci-dessous les relations de dispersion des électrons libres pour différentes tailles de réseaux anisotropes ($t_x - t_y - t'$) en imposant des conditions aux limites périodiques. Ces relations sont obtenues en effectuant la transformée de Fourier de la partie cinétique du hamiltonien de Hubbard.

Type	Taille	Énergie $\varepsilon_{\mathbf{k}}$
t	2×1	$-t \cos k$
t	$n \times 1, (n > 2)$	$-2t \cos k$
$t_x - t_y$	2×2	$-t_x \cos k_x - t_y \cos k_y$
$t_x - t_y - t'$	2×2	$-t_x \cos k_x - t_y \cos k_y - t' \cos k_x \cos k_y$
$t_x - t_y$	$n \times 2, (n > 2)$	$-2t_x \cos k_x - t_y \cos k_y$
$t_x - t_y - t'$	$n \times 2, (n > 2)$	$-2t_x \cos k_x - t_y \cos k_y - 2t' \cos k_x \cos k_y$
$t_x - t_y$	$n \times m, (n > 2, m > 2)$	$-2t_x \cos k_x - 2t_y \cos k_y$
$t_x - t_y - t'$	$n \times m, (n > 2, m > 2)$	$-2t_x \cos k_x - 2t_y \cos k_y - 4t' \cos k_x \cos k_y$

Tableau 1. Relations de dispersion pour différentes tailles de réseaux.

La lecture et la compréhension de ce rapport nécessitent diverses connaissances préalables que l'on peut trouver dans les références suivantes.

Références de base

1. *Algèbre linéaire*. Factorisation matricielle, diagonalisation, théorie matricielle générale: Strang [29], Ciarlet [7], chaps. 1 et 2.
2. *Calcul et analyse numérique*. Algorithmique, conditionnement, recettes numériques d'algèbre linéaire: Numerical recipes [38], Ciarlet [7], Higham [11](avancé), Golub [10], Bevington [22].
3. *Connaissances de base de la mécanique quantique*. Notation de Dirac, espaces de Hilbert, opérateurs, représentation matricielle: Cohen-Tannoudji [6], tomes 1 et 2.
4. *Mécanique quantique avancée*. Matrice densité, représentation de Heisenberg, Schrödinger et d'interaction, systèmes à plusieurs particules, symétrisation, moments angulaire: Sénéchal [27], Cohen-Tannoudji [6], Tremblay [34], Fetter et Walecka [1].
5. *Seconde quantification*. Représentation de nombre d'occupation, en débutant avec l'oscillateur harmonique quantique: Cohen-Tannoudji [6], Sénéchal [27], Tremblay [34], Bogolubov [21].
6. *Physique statistique classique*. Variables gaussiennes, ensembles statistiques, fonction de partition: Reif [24].
7. *Physique statistique quantique*. Trace thermodynamique, distributions quantiques, bosons, fermions: Tremblay [34], Reif [24], Bourbonnais [3].
8. *Méthodes Monte Carlo*. Marches aléatoires, échantillonnage, traitements statistiques, chaînes de Markov: Kalos [15], Mailhot [18], Brémaud [4].
9. *Supraconductivité conventionnelle*. Bourbonnais [3].

Matériel plus avancé

1. *Théorie à N -corps*. Fonctions de corrélations, théorie des fonctions de Green à température finie, fonctions de Green de Matsubara: Bourbonnais [3], Tremblay [34], Mahan [17].
2. *Diagrammes de Feynman*. Intégrales de chemin, diagrammes de Feynman en physique du solide: Sénéchal [27], Mattuck [19].
3. *Phénomènes critiques et transition de phase*. Modèle d'Ising, comportements critiques à l'approche d'une transition de phase, exposants universels: Bourbonnais [3].
4. *Théorie statistique des champs*. Fonctions de Green, liquides de Fermi, supraconductivité: Tremblay [34].

Bibliographie

- [1] A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw Hill, 1971.
- [2] P.W. Anderson, *Science* **235**, 51196, 1987.
- [3] C. Bourbonnais, *Physique statistique*, notes de cours PHY 741, Département de physique, Université de Sherbrooke, 1997.
- [4] P. Brémaud, *Markov Chains: Gibbs Fields, Monte Carlo Simulations, and Queues*, Springer Verlag, 1999.
- [5] R. Bryan, Solving oversampled data problems by maximum entropy, in P. Fougères (editeur), *Maximum Entropy and Bayesian Methods*, Kluwer, 1989.
- [6] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique quantique*, Hermann, 1986. QC 174 .12 .C63
- [7] P. Ciarlet, *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*, Masson, 1983.
- [8] L. Chen et al., *Phys. Rev. B* **49**, 4338, 1994.
- [9] S. Moukouri et al., Many-body theory vs simulation for the pseudogap in the Hubbard model, 1999. [cond-mat/9908053](#)
- [10] G.H. Golub, C.F. van Loan, *Matrix Computations*, John Hopkins Univ. Press, 1989. QA 188 .G65
- [11] N.J. Highams, *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*, SIAM Press, 1996. QA 297 .H53
- [12] J. Hirsch, Two-dimensional Hubbard model: numerical simulation study, *Phys. Rev. B* **31**, 4403-4419, 1985.
- [13] J.W. Negele, H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems*, Addison-Wesley, 1988.
- [14] F. Jackson, *Propriétés magnétiques du modèle de Hubbard et applications au composé supraconducteur $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$* , M.Sc., Département de physique, Université de Sherbrooke, 1996.

-
- [15] M.H. Kalos, P.A. Whitlock, *Monte Carlo Methods, Volume 1: Basics*, John Wiley, 1986. QA 298.K35 1986 vol.1
- [16] M. Jarrell, J.E. Gubernatis, Bayesian inference and analytical continuation of imaginary-time Monte Carlo data, *Phys. Reports* **269**, 133-195, 1996.
- [17] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, 1990. QC 176.M24
- [18] A. Mailhot, Introduction aux méthodes Mont Carlo classiques, in L. Lewis, J. Lopez, G. Slater, A.-M. Tremblay (éditeurs), *Simulations numériques en physique*, vol.2, 391-438, 1993.
- [19] R.D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, Dover, 1967.
- [20] H.-G. Matuttis, Ph.D. Thesis, Department of Physics, University of Regensburg, 1995.
- [21] N.N. Bogolubov, N.N. Bogolubov, *Introduction to Quantum Statistical Mechanics*, World Scientific, 1982. QC 174.8.B613
- [22] P.R. Bevington, D.K. Robinson, *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*, McGraw Hill, 1992.
- [23] R. Blankenbecler, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, *Phys. Rev. D* **24**, 2278, 1981.
- [24] F. Reif, *Statistical and Thermal Physics*, Addison-Wesley, 1990.
- [25] R.M. Fye, J.E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **38**, 433, 1988.
- [26] R.P. Scalettar, R.M. Noack, R.P. Singh, Ergodicity at large coupling with the determinant Monte Carlo algorithm, *Phys. Rev. B* **44**, 10502, 1991.
- [27] D. Sénéchal, *Mécanique quantique*, notes de cours PHY 731, Département de physique, Université de Sherbrooke, 1995.
- [28] C. Shannon, *The Mathematical Theory of Communication*, Univ. Illinois Press, Urbana, 1963.
- [29] G. Strang, *Introduction to Linear Algebra*, Wellesley-Cambridge Press, 1993.
- [30] S.V. Meshkov, D.V. Berkov, Fast maximum entropy algorithm for ill-posed problems, *Int. J. Mod. Phys. C* **5**, 987-995, 1994.
- [31] T.M. Cover, J.A. Thomas, *Elements of Information Theory*, John Wiley, 1991.
- [32] H. Touchette, *Algorithme Monte Carlo quantique: version Fortran 90*, rapport technique du CRPS, Département de physique, Université de Sherbooke, 1997. Disponible sur la page web de Monte Carlo quantique du CRPS.

- [33] A.-M. Tremblay, Méthode Monte Carlo quantique pour les électrons sur réseau, in L. Lewis, J. Lopez, G. Slater, A.-M. Tremblay (éditeurs), *Simulations numériques en physique*, vol.2, 529-582, 1993.
- [34] A.-M. Tremblay, Y. Vilk, Non-perturbative many-body approach to the Hubbard model and single particle pseudogap, *J. Phys. I. (France)* **7**, 1309, 1997.
- [35] A.-M. Tremblay, *Problème à N-corps*, notes de cours, Département de physique, Université de Sherbrooke, 1997.
- [36] H. Trotter, *Proc. Amer. Math. Soc.* **10**, 545, 1959.
- [37] A. Veilleux, *Monte Carlo quantique pour le modèle de Hubbard avec sauts vers seconds voisins*, M.Sc., Département de physique, Université de Sherbrooke, 1994.
- [38] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge Univ. Press, 1989.