République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Echahid Cheikh Larbi Tébessi, Tébessa
Faculté des sciences exactes et sciences de la nature et de la vie

Département des sciences de la matière



Thèse

Présentée en vue de l'obtention du diplôme de

Doctorat LMD

Domaine : Sciences de la matière

Filière : Physique

Option :Physique des matériaux

Thème

Étude par la théorie de perturbation à N-corps des propriétés physiques de modèles en interaction à haute température

Par : Bendjeroudib Chafia

Soutenue publiquement, le **09/07/2025**, devant le jury composé de :

Dr.	**Hafdhallah Abdelkader**	à l'université de tebessa	Président
Dr.	**Tag Mohamed Amine**	à l'université de tebessa	Directeur de thèse
Pr.	**Boudiar Abid**	à l'université de tebessa	Examinateur
Pr.	**Farh Hichem**	à l'université de Oum El Bouaghi	Examinateur
Pr.	**Khenchoul Salah**	à l'université de Oum El Bouaghi	Examinateur

ملخص

في هذه الرسالة، درسنا نموذج هوبارد ثنائي الأبعاد باستخدام نظرية الاضطراب الأجسام المتعددة، وحللنا خصائصه الديناميكية الحرارية بشكل منهجي. أجرينا حسابات رمزية لمخططات هوجنهولتز المعممة باستخدام الفروق المقسمة لتقييم فعال. استنتجنا تمدد الجهد الكلي إلى الدرجة الثامنة في كلٍّ من قوة التفاعل (U) ودرجة الحرارة العكسية (β). عند نصف الملء، عرضنا نتائج القابلية المغناطيسية والسعة الحرارية، كاشفين عن السلوك الديناميكي الحراري الرئيسي في هذا النظام.

الكلمات المفتاحية:نظرية اضطراب الأجسام المتعددة، الفروق المقسمة، مخططات فراغ فاينمان، درجة الحرارة المحدودة

Abstract

In this thesis, we studied the two-dimensional Hubbard model using many-body perturbation theory and systematically analyzed its thermodynamic properties. Symbolic computations of generalized Hugenholtz diagrams were performed using divided differences for efficient evaluation. We derived the grand potential expansion up to the eighth order in both interaction strength (U) and inverse temperature (β). At half-filling, we present results for the magnetic susceptibility and heat capacity, revealing key thermodynamic behavior in this regime.

Keywords: Many-body perturbation theory, Divided differences, Feynman vacuum diagrams, Finite temperature

Résumé

Dans cette thèse, nous avons étudié le modèle de Hubbard 2D à l'aide de la théorie des perturbations à N corps, en analysant systématiquement ses propriétés thermodynamiques. Le calcul symbolique des diagrammes de Hugenholtz généralisés a été réalisé à l'aide des différences divisées, afin d'obtenir une évaluation efficace. Nous avons dérivé le développement du grand potentiel jusqu'au huitième ordre, à la fois en fonction de la force d'interaction (U) et de l'inverse de la température (β). À demi-remplissage, nous présentons des résultats pour la susceptibilité magnétique et la capacité thermique, révélant le comportement thermodynamique clé dans ce régime.

Mots Clés : Théorie de Perturbation à plusieurs corps, différences divisées, Diagrammes de Vide de Feynman, Température Finie

Dédicace

Je voudrais ici exprimer ma profonde gratitude à mes chers parents pour leur soutien tout au long de ma vie. Cela restera un privilège inestimable et inoubliable. Que Dieu les protège pour nous, inch'Allah. Je dédie cette thèse à :

- Ma chère sœur Wafa, ainsi qu'à sa fille Amal ;
- Mes chers frères Imed et Amer, qui m'ont donné le courage de rester vigilant et de persévérer jusqu'à l'achèvement de cette œuvre ;
- Toute ma famille ;
- Tous mes amis ;
- Tous mes proches, qu'ils soient proches ou lointains.

Remerciements

Avant tout, louange et gratitude à ALLAH le tout puissant pour la volonté, la santé, la force et la patience qu'il nous a données pour l'accomplissement de ce travail et l'atteinte de cet objectif. Mes remerciements les plus sincères vont à ma chère mère et à mon cher père, qui m'ont soutenu tout au long de ma vie et m'ont donné la force et la détermination pour accomplir cela par moi-même. Je tiens à remercier mon directeur de thèse, monsieur Tag Mohamed Amine, professeur à l'université de Tebessa, d'avoir eu la gentillesse de diriger ce travail de recherche et de m'avoir bien guidé par ses nombreux conseils. Je remercie monsieur le professeur Hafdhallah Abdelkader qui m'a fait l'honneur de présider le jury de cette thèse. J'exprime mes profonds remerciements à monsieur le professeur Boudiar Abid de l'université de Tébessa pour avoir accepté de juger ce travail. J'exprime également toute ma gratitude au professeur monsieur Khenchoul Salah à l'université d'Oum El Bouaghi, d'avoir accepté d'examiner cette thèse et de participer à ce jury. J'adresse mes très sincères remerciements à monsieur le professeur Farh Hichem, à l'université d'Oum El Bouaghi, d'avoir accepté d'examiner cette thèse et de participer à ce jury.

Je tiens également à remercier toutes les personnes du laboratoire LPAT ou d'ailleurs qui, de près ou de loin, ont contribué à l'aboutissement de cette thèse. Enfin, je présente mes vifs remerciements à toute ma famille pour ses encouragements et son soutien.

Table des matières

Table des figures i

Liste des tableaux iv

Liste des Algorithmes v

Introduction Générale 1

1 Généralités sur la théorie des perturbations à N corps 3

1.1 Introduction . . . 3
1.2 Hamiltonien d'un système de particules identiques . . . 4
1.2.1 Formulation de l'Hamiltonien pour des particules sans interaction . 4
1.3 Théorie des perturbations à plusieurs corps . . . 5
1.4 La fonction de partition . . . 5
1.5 Série de perturbation et diagrammes de Feynman . . . 6
1.6 Théorème de Wick . . . 6
1.6.1 Concepts de base . . . 6
1.7 Hamiltonien en seconde quantification avec la théorie des perturbations multi-corps . . . 7
1.7.1 Partie non perturbée (H_0) . . . 7
1.7.2 Terme d'interaction (V) . . . 7
1.7.3 Formulation perturbative . . . 8
1.8 Fonction de partition dans le cadre perturbatif multi-corps . . . 8
1.8.1 Développement perturbatif de Z . . . 8
1.8.2 Série de perturbation et diagrammes . . . 8
1.8.3 Théorème de Wick et contractions . . . 9
1.8.4 Représentation de Hugenholtz . . . 9
1.8.5 Hamiltonien en seconde quantification . . . 9
1.8.6 Avantages des diagrammes de Hugenholtz . . . 10

1.9 Conclusion 10

2 Methodes d'integrations **11**
2.1 Introduction 11
2.2 Contribution du diagramme irréductible du second ordre 14
2.2.1 Méthode directe 15
2.2.2 Méthode graphique 17
2.3 Définitions 19
2.4 Énumérer tous les arbres couvrants 20
2.4.1 Procédure d'initialisation 20
2.4.2 Procédure de contraction-suppression 21
2.4.3 L'algorithme d'arbre couvrant compressé et décompressé (CDST) . 22
2.5 Un algorithme pour extraire le dénominateur et le numérateur à partir d'un arbre couvrant 26
2.6 Coefficients des arêtes 28
2.7 En termes de fonctions 30
2.8 Méthodologie de calcul du potentiel grandissant pour les diagrammes réductibles et irréductibles 31
2.9 Conclusion 33

3 Théorie de la perturbation à plusieurs corps à température finie : outils diagrammatiques et stratégies de simplification **34**
3.1 Introduction 34
3.2 Le modèle 35
3.3 Évaluation graphique des sommes de Matsubara 40
3.4 Formulation de la contribution du diagramme de Hugenholtz comme différences divisées 42
3.5 Procédure algorithmique de la DD-MBPT 46
3.6 Développement en série à haute température du modèle de spin 1/2 Heisenberg XXZ 49
3.7 Conclusion 52

4 Modèle de Hubbard à deux dimensions **53**
4.1 Introduction 53
4.2 Développements en série à haute température 60
4.3 Séries haute température exactes pour le modèle de Hubbard 2D : applications aux observables thermodynamiques 62
4.4 Comparaison avec d'autres méthodes 65

4.5 Conclusion 69

Conclusion Générale **71**

Bibliographie **72**

A Le potentiel grand canonique aux deuxième et troisième ordres **A**

B Différences divisées et contributions du second ordre de Ω **H**

Table des figures

2.1 Le diagramme du vide de Hugenholtz du second ordre 14
2.2 Tous les arbres possibles du diagramme de Hugenholtz d'ordre deux 17
2.3 Exemple de graphe connexe : Les lignes épaisses représentent un exemple d'arbre couvrant T, tandis que les lignes fines représentent le cotree T^* associé à T. Les ensembles de coupes fondamentales sont représentés par des lignes en pointillés. $\{v_1, v_3, v_4\}$, $\{E_2, E_3, E_8\}$ sont respectivement les sommets et les branches terminales de l'arbre couvrant T. 20
2.4 (a) $G1$: Un exemple d'ordre 4 des diagrammes de Hugenholtz, (b) $G2$: Le diagramme initialisé obtenu après l'application de la procédure d'initialisation sur le graphe $G1$. 21
2.5 Procédure de contraction-suppression au niveau k. 22
2.6 Le flux de calcul du graphe $G2$. 23
2.7 Diagramme d'arbre (arbre compressé) du graphe $G2$. 24
2.8 Les étapes de calcul pour le dénominateur et le numérateur, les flèches épaisses (minces) représentent les branches (cordes) de l'arbre couvrant (cotree). 28
2.9 Diagrammes de type Hugenholtz en échelle. 32

3.1 Exemple de diagrammes de vide connectés G_n^i avec leurs facteurs de symétrie d'ordre 1, 2, 3 et 4. 38
3.2 Un graphe connecté $G(5, 10)$ avec un exemple d'arbre couvrant T (lignes épaisses) et le co-arbre associé T^* (lignes minces). Les lignes en pointillés représentent les coupes fondamentales. 42
3.3 Susceptibilité magnétique de la chaîne Heisenberg XXZ pour $\Delta = 0.1$, $\Delta = 0.2$, $\Delta = 0.3$ et $\Delta = 1.0$ à $h = 0$ 52

4.1 Exemple de déroulement pour un diagramme de Hugenholtz dans le vide. (a) Le graphe G correspond à un diagramme de Hugenholtz dans le vide comportant 6 sommets et 12 arêtes, noté $G(6, 12)$. Chaque arête i de G est caractérisée par deux paramètres fondamentaux : l'énergie E_i et le coefficient d'arête η_i. (b) L'ensemble des arbres couvrants du graphe $G(6, 10)$ (lignes bleues, appelées branches) avec leurs co-arbres associés (lignes rouges, appelées cordes), où n_s est le nombre d'arbres couvrants générés. (c) Les coupures fondamentales de l'arbre couvrant T_1 sont représentées par des cercles en pointillés. (D_1, D_2, D_3, D_4, and D_8) 58

4.2 La différence entre deux ordres successifs pour l'approximation de Padé de l'énergie à demi-remplissage et $t = 1$. (a), (b) et (c) La différence entre l'ordre huit de la théorie à plusieurs corps $O(\beta^8, U^8)$ et l'ordre sept $O(\beta^8, U^7)$ pour différentes valeurs de U. (d) La différence entre l'ordre quatre de la théorie à plusieurs corps $O(\beta^8, U^4)$ et l'ordre deux $O(\beta^8, U^2)$ (courbe orange) de la série de l'équation(4.21), alo(d) La différence entre l'ordre quatre de la théorie à plusieurs corps $O(\beta^8, U^4)$ et l'ordre deux $O(\beta^8, U^2)$ (courbe orange) de la série de l'équation, ainsi qu'une comparaison avec la différence entre les ordres $O(\beta^{13}, U^4)$ et $O(\beta^{13}, U^2)$ (courbe bleue) de la série. (B.3) pour $U = 1$ 64

4.3 L'énergie E à demi-remplissage et $t = 1$ en fonction de la température pour $U = 2$, $U = 4$, et $U = 8$. Les lignes pleines représentent l'approximation de Padé de la série dans l'équation (B.6) 65

4.4 L'énergie E à demi-remplissage en fonction de la température pour $t = 1$ et $U = 2$. La ligne pleine représente l'approximation de Padé de la série dans (B.3), tandis que les cercles pleins indiquent les données de Monte Carlo. . 66

4.5 La capacité calorifique C_v à demi-remplissage en fonction de la température pour $t = 1$ et $U = 2$. La ligne pleine représente l'approximation de Padé de la série dans l'équation (B.6) 67

4.6 La capacité calorifique C_v à demi-remplissage en fonction de la température pour $t = 1$ et $U = 4$. La ligne bleue pleine représente l'approximation de Padé de la série dans l'équation (4.21), tandis que la ligne verte montre l'approximation de Padé de la série améliorée dans (B.3). Les étoiles rouges indiquent les données FTLM 68

4.7 La susceptibilité magnétique χ à demi-remplissage et $t = 1$ en fonction de la température pour $U = 2$ et $U = 4$. Les lignes pleines représentent l'approximation de Padé de la série dans l'équation (B.6) 69

A.1 Diagramme de Hugenholtz de deuxième l'ordre . . . . . B
A.2 Tous les arbres couvrants du diagramme G_2 C
A.3 Les diagrammes de Hugenholtz du troisième ordre . . . . . D
A.4 Tous les arbres couvrants du diagramme G_3^1 . . . . . F

Liste des tableaux

3.1 Nombre total N de diagrammes distincts de type Hugenholtz de vide à l'ordre n sans sous-diagrammes de Hartree-Fock. 38

Liste des Algorithmes

B.1 Algorithme d'Intégration Multinomiale L

Introduction générale

La mécanique quantique constitue le cadre théorique fondamental pour comprendre les phénomènes physiques à l'échelle microscopique, notamment ceux régissant les systèmes atomiques et subatomiques [1]. Lorsqu'il s'agit de décrire des systèmes contenant un grand nombre de particules identiques en interaction, comme dans les solides, les gaz quantiques ou les systèmes nucléaires, la formulation en deuxième quantification devient indispensable [2]. Elle permet de représenter les particules comme des excitations de champs quantiques et de manipuler leurs états au moyen d'opérateurs de création et d'annihilation [3].

Dans ce contexte, la théorie de la perturbation à plusieurs corps (TPMC) s'est imposée comme une méthode puissante pour approcher analytiquement les propriétés de tels systèmes, notamment lorsque les solutions exactes sont inaccessibles [4]. À température finie, la TPMC-TF étend ce formalisme, mais elle entraîne une croissance combinatoire rapide du nombre de diagrammes à évaluer, ce qui pose un défi computationnel majeur [5]. Pour y remédier, diverses techniques de réduction diagrammatique ont été développées, notamment celles s'appuyant sur la suppression des diagrammes déconnectés et l'identification des diagrammes topologiquement équivalents [6].

La complexité de ces approches a stimulé le développement d'algorithmes rapides, basés principalement sur la théorie des graphes et la manipulation symbolique, pour générer et évaluer efficacement les diagrammes essentiels [7]. Par ailleurs, la méthode Monte Carlo diagrammatique (DiagMC) a permis une percée dans le traitement non perturbatif des séries de Feynman, en particulier pour les systèmes fortement corrélés [8]. L'utilisation des diagrammes de Hugenholtz, combinant contributions directes et d'échange, constitue une amélioration notable dans cette approche, car elle permet une réduction significative du nombre de configurations à échantillonner [9].

En parallèle, des méthodes plus classiques, telles que les expansions à haute température et les développements en séries finies, ont démontré leur utilité dans l'analyse thermodynamique des modèles quantiques [10]. Toutefois, ces méthodes souffrent également de limitations en termes de convergence et de coût computationnel [11].

Face à ces défis, le présent travail propose une nouvelle approche algorithmique et

symbolique permettant d'évaluer automatiquement le grand potentiel associé aux diagrammes essentiels dans le cadre de la TPMC-TF. Cette méthode est appliquée au modèle de Hubbard bidimensionnel, qui constitue un paradigme pour l'étude des phénomènes collectifs tels que le magnétisme et la supraconductivité [12]. Contrairement aux méthodes stochastiques traditionnelles, notre approche repose sur une manipulation formelle des contributions diagrammatiques, facilitée par l'usage de différences divisées, ce qui permet un calcul rapide, précis et extensible [13].

Chapitre 1

Généralités sur la théorie des perturbations à N corps

1.1 Introduction

Les systèmes de fermions fortement corrélés posent un défi majeur en physique de la matière condensée, car aucune solution exacte ne permet de décrire pleinement leur comportement [14]. Une des approches les plus répandues pour les étudier est la théorie des perturbations à plusieurs corps (TPMC), basée sur les diagrammes de Feynman qui structurent les calculs de manière systématique [3]. Toutefois, cette méthode est confrontée à une explosion combinatoire du nombre de diagrammes à chaque ordre d'expansion [4] .

Pour réduire cette complexité, deux stratégies sont souvent employées : l'utilisation des diagrammes de Hugenholtz, qui combinent contributions directes et d'échange [9], et la sélection de diagrammes topologiquement distincts, éliminant les redondances structurelles .

Les contributions diagrammatiques génèrent des intégrales multidimensionnelles complexes, qui nécessitent des méthodes numériques précises. Une approche récente consiste à utiliser le potentiel grand-canonique exprimé par différences divisées, ce qui facilite l'étude des basses températures grâce à l'approximation de Padé appliquée à des séries de haute température [10].

Dans ce contexte, ce travail adopte l'algorithme AFHTS pour obtenir analytiquement les coefficients de haute température jusqu'à l'ordre β^{10} du potentiel grand-canonique, appliqué au modèle de Hubbard unidimensionnel. Le développement est réalisé jusqu'à l'ordre 6 en interaction, et les résultats gardent une validité pour toute valeur des constantes du système [15].

Enfin, si certaines méthodes analytiques conviennent à de petits systèmes, d'autres —

notamment celles basées sur le formalisme de Matsubara permettent l'étude de réseaux étendus, mais restent limitées par leur définition dans l'espace des fréquences imaginaires ou des temps imaginaires, compliquant leur extrapolation au domaine réel [16].

1.2 Hamiltonien d'un système de particules identiques

1.2.1 Formulation de l'Hamiltonien pour des particules sans interaction

Considérons un système composé de N particules identiques et indiscernables, se déplaçant sous l'influence d'un potentiel externe $V(\mathbf{x})$. L'Hamiltonien total du système s'exprime comme la somme des contributions de chaque particule :

$$H = \sum_{i=1}^{N} h_i \tag{1.1}$$

où h_i est l'Hamiltonien à une particule pour la i-ème particule, donné par :

$$h(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x}) \tag{1.2}$$

L'équation aux valeurs propres $h\phi_\alpha(\mathbf{x}) = \epsilon_\alpha\phi_\alpha(\mathbf{x})$ est résolue pour déterminer les états propres $\phi_\alpha(\mathbf{x})$ et les énergies ϵ_α [17]. Représentation par les Opérateurs de Champ Quantique En deuxième quantification, l'état quantique est décrit à l'aide des opérateurs de champ $\Psi(\mathbf{x})$ et $\Psi^\dagger(\mathbf{x})$, où :

$$\Psi(\mathbf{x}) = \sum_\alpha \phi_\alpha(\mathbf{x})c_\alpha \quad , \quad \Psi^\dagger(\mathbf{x}) = \sum_\alpha \phi^*_\alpha(\mathbf{x})c^\dagger_\alpha \tag{1.3}$$

Ici, c_α et $c^\dagger_\alpha$ sont les opérateurs d'annihilation et de création pour l'état α, soumis aux relations de commutation (ou d'anticommutation) :

$$c_\alpha c^\dagger_\beta - \epsilon c^\dagger_\beta c_\alpha = \delta_{\alpha\beta}c_\alpha c_\beta - \epsilon c_\beta c_\alpha = c^\dagger_\alpha c^\dagger_\beta - \epsilon c^\dagger_\beta c^\dagger_\alpha = 0 \tag{1.4}$$

avec $\epsilon = +1$ pour les bosons et $\epsilon = -1$ pour les fermions [3].

-Espace de Fock et Représentation des Nombres de Particules L'espace de Fock est construit à partir des états $|n_\alpha, n_\beta, \ldots\rangle$, où n_α désigne le nombre de particules dans l'état α. Les opérateurs de création et d'annihilation agissent comme suit :

$$c_\alpha|n_\alpha, n_\beta, \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha}|n_\alpha - 1, n_\beta, \ldots\rangle \tag{1.5}$$

$$c_\alpha^\dagger |n_\alpha, n_\beta, \ldots\rangle = \sqrt{n_\alpha + 1}|n_\alpha + 1, n_\beta, \ldots\rangle \tag{1.6}$$

Pour les fermions : $n_\alpha \in \{0, 1\}$ (principe d'exclusion de Pauli). Pour les bosons : $n_\alpha \in \mathbb{N}$.

Hamiltonien avec Interactions entre Particules Lorsqu'on introduit des interactions à deux corps $V(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, l'Hamiltonien devient :

$$H = \int \Psi^\dagger(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}) d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \iint \Psi^\dagger(\mathbf{x}') \Psi^\dagger(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \Psi(\mathbf{x}) \Psi(\mathbf{x}') d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \tag{1.7}$$

En substituant $\Psi(\mathbf{x})$ depuis (1.3), on obtient :

$$H = H_0 + H_I = \sum_\alpha \epsilon_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma \tag{1.8}$$

où :

$$\epsilon_\alpha = \int \phi_\alpha^*(\mathbf{x}) h(\mathbf{x}) \phi_\alpha(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \tag{1.9}$$

$$\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle = \iint \phi_\alpha^*(\mathbf{x}') \phi_\beta^*(\mathbf{x}) V(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \phi_\gamma(\mathbf{x}) \phi_\delta(\mathbf{x}') d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \tag{1.10}$$

1.3 Théorie des perturbations à plusieurs corps

La **théorie des perturbations à plusieurs corps** est une méthode centrale en physique quantique pour étudier des systèmes de particules en interaction (électrons dans un solide, gaz de fermions, etc.). Elle permet de traiter les interactions comme des perturbations autour d'un système non interactif soluble. Cette approche s'appuie sur la **fonction de partition** Z, un outil clé en mécanique statistique [18].

1.4 La fonction de partition

La fonction de partition est définie par :

$$Z = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta H}\right], \tag{1.11}$$

où $\beta = \frac{1}{k_B T}$, H est l'hamiltonien total, et la trace (Tr) couvre tous les états quantiques. Pour les systèmes interactifs, on décompose H en :

$$H = H_0 + V, \tag{1.12}$$

où H_0 est un hamiltonien non interactif soluble, et V représente les interactions.

1.5 Série de perturbation et diagrammes de Feynman

Le développement perturbatif donne :

$$Z = Z_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta \langle \mathcal{T}\left[V(\tau_1) \cdots V(\tau_n)\right] \rangle_0 \, d\tau_1 \cdots d\tau_n. \tag{1.13}$$

Chaque terme est représenté par des **diagrammes de Feynman** :

— **Lignes** : Propagateurs (G_0) associés à H_0,

— **Vertices** : Interactions V.

1.6 Théorème de Wick

Le théorème de Wick est un outil fondamental en physique théorique et en mathématiques appliquées, particulièrement pour analyser les produits complexes d'opérateurs quantiques via leur décomposition en "contractions". Il simplifie le calcul des valeurs moyennes de produits chronologiques (ordonnés dans le temps), omniprésents en théorie des perturbations et en mécanique statistique quantique [19].

1.6.1 Concepts de base

1. **Ordre chronologique** ($\mathcal{T}$) : Réorganise les opérateurs selon leur temps, du plus récent au plus ancien. Par exemple :

$$\mathcal{T}\left[a(\tau_1)a^\dagger(\tau_2)\right] = \begin{cases} a(\tau_1)a^\dagger(\tau_2) & \text{si } \tau_1 > \tau_2, \\ a^\dagger(\tau_2)a(\tau_1) & \text{si } \tau_2 > \tau_1. \end{cases} \tag{1.14}$$

2. **Ordre normal**($:\cdots:$) : Place les opérateurs d'annihilation (a) à droite et les opérateurs de création ($a^\dagger$) à gauche.

3. **Contractions** ($\langle \mathcal{T}[ab] \rangle_0$) : Valeur moyenne du produit chronologique de deux opérateurs dans l'état vide (non perturbé). Par exemple :

$$\langle \mathcal{T}\left[a(\tau_1)a^\dagger(\tau_2)\right] \rangle_0 = G_0(\tau_1 - \tau_2), \tag{1.15}$$

où G_0 est la "fonction de Green libre", décrivant la propagation d'une particule entre τ_2 et τ_1.

Le théorème stipule que tout "produit chronologique" d'opérateurs peut être décomposé en une somme de "termes en ordre normal" combinés à toutes les contractions

possibles. Mathématiquement :

$$\mathcal{T}\left[A_1 A_2 \cdots A_n\right] =: A_1 A_2 \cdots A_n : + \sum_{\text{Contractions}} (\text{toutes les contractions}) \tag{1.16}$$

1.7 Hamiltonien en seconde quantification avec la théorie des perturbations multi-corps

L'hamiltonien d'un système à N corps en seconde quantification s'écrit comme la somme d'une partie non perturbée (H_0) et d'une interaction (V) :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \tag{1.17}$$

1.7.1 Partie non perturbée (H_0)

H_0 décrit les particules libres (sans interactions) :

$$\hat{H}_0 = \sum_{\alpha} \epsilon_\alpha \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\alpha + \sum_{\beta} \int \frac{d^3\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \epsilon_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}, \tag{1.18}$$

où :

- ϵ_α ou $\epsilon_{\mathbf{k}}$: énergie à un corps (ex : $\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$),
- $\hat{a}_\alpha^\dagger, \hat{a}_\alpha$: opérateurs de création/annihilation pour des états discrets (ex : électrons dans un atome),
- $\hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger, \hat{b}_{\mathbf{k}}$: opérateurs pour des états continus (ex : gaz d'électrons).

1.7.2 Terme d'interaction (V)

V capture les interactions à deux corps (ex : Coulomb) :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle \, \hat{a}_\alpha^\dagger \hat{a}_\beta^\dagger \hat{a}_\delta \hat{a}_\gamma, \tag{1.19}$$

ou en notation continue :

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \, \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_1) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}_2) \hat{\psi}(\mathbf{r}_1), \tag{1.20}$$

où :

- $\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle$: élément de matrice d'interaction,
- $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r})$: opérateurs de création/annihilation en position,

— $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$: potentiel d'interaction (ex : $V(r) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$).

1.7.3 Formulation perturbative

Dans le cadre de la théorie des perturbations, on développe les observables (énergie libre, fonctions de Green) en puissances de V. Par exemple, l'énergie de ground state s'écrit :

$$E = E_0 + \langle\Phi_0|\hat{V}|\Phi_0\rangle + \sum_{n\neq 0} \frac{|\langle\Phi_n|\hat{V}|\Phi_0\rangle|^2}{E_0 - E_n} + \cdots , \tag{1.21}$$

où $|\Phi_0\rangle$ est l'état fondamental de H_0, et $|\Phi_n\rangle$ sont des états excités.

1.8 Fonction de partition dans le cadre perturbatif multi-corps

La fonction de partition Z est l'outil central pour étudier les propriétés thermodynamiques d'un système quantique à l'équilibre. Dans le formalisme de la seconde quantification, elle s'exprime comme :

$$Z = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta\hat{H}}\right] = \mathrm{Tr}\left[e^{-\beta(\hat{H}_0+\hat{V})}\right], \tag{1.22}$$

où $\hat{H}_0$ est l'hamiltonien non perturbé et $\hat{V}$ le terme d'interaction.

1.8.1 Développement perturbatif de Z

En utilisant la **représentation d'interaction** (temps imaginaire τ), on réécrit Z comme :

$$Z = Z_0 \left\langle \mathcal{T}_\tau \left[e^{-\int_0^\beta \hat{V}(\tau)\, d\tau}\right]\right\rangle_0 , \tag{1.23}$$

où :
— $Z_0 = \mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}]$ est la fonction de partition non perturbée,
— $\mathcal{T}_\tau$ est l'opérateur de mise en ordre chronologique en τ,
— $\langle\cdots\rangle_0 = \frac{1}{Z_0}\mathrm{Tr}[e^{-\beta\hat{H}_0}(\cdots)]$ désigne la moyenne thermique.

1.8.2 Série de perturbation et diagrammes

En développant l'exponentielle en série, on obtient :

$$\frac{Z}{Z_0} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta \cdots \int_0^\beta \left\langle \mathcal{T}_\tau \left[\hat{V}(\tau_1) \cdots \hat{V}(\tau_n) \right] \right\rangle_0 d\tau_1 \cdots d\tau_n. \tag{1.24}$$

Chaque terme d'ordre n correspond à des **diagrammes de Feynman** :

— **Lignes** : Fonctions de Green $G_0(\tau_i - \tau_j) = -\langle \mathcal{T}_\tau \hat{a}(\tau_i) \hat{a}^\dagger(\tau_j) \rangle_0$,

— **Vertices** : Intégrales des interactions $\langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle$.

1.8.3 Théorème de Wick et contractions

Le théorème de Wick permet de décomposer les produits d'opérateurs en paires contractées. Par exemple, pour $n = 2$:

$$\begin{aligned} \left\langle \mathcal{T}_\tau \hat{V}(\tau_1) \hat{V}(\tau_2) \right\rangle_0 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma\delta \\ \mu\nu\rho\sigma}} & \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle \langle \mu\nu | V | \rho\sigma \rangle \\ & \times \left\langle \mathcal{T}_\tau \hat{a}^\dagger_\alpha(\tau_1) \hat{a}^\dagger_\beta(\tau_1) \hat{a}_\delta(\tau_1) \hat{a}_\gamma(\tau_1) \hat{a}^\dagger_\mu(\tau_2) \cdots \right\rangle_0 . \end{aligned} \tag{1.25}$$

Les contractions génèrent des termes comme $G_0(\tau_1 - \tau_2)$, représentés par des lignes reliant les vertices.

1.8.4 Représentation de Hugenholtz

Cette représentation s'inscrit dans le cadre de la "théorie des perturbations à plusieurs corps", utilisée pour étudier les systèmes quantiques complexes comme les gaz d'électrons, la matière nucléaire ou les fermions en interaction. Contrairement aux diagrammes de Feynman (qui distinguent les interactions directes et d'échange) ou aux diagrammes de Goldstone (basés sur le vide non interactif), les diagrammes de Hugenholtz intègrent une antisymétrisation automatique des sommets d'interaction. Cela réduit drastiquement le nombre de diagrammes à considérer.

1.8.5 Hamiltonien en seconde quantification

L'Hamiltonien d'un système à plusieurs corps s'écrit :

$$H = \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \langle ij | v | kl \rangle_{\text{antisym}} \, a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k, \tag{1.26}$$

où $\langle ij | v | kl \rangle_{\text{antisym}} = \langle ij | v | kl \rangle - \langle ij | v | lk \rangle$ est l'élément de matrice antisymétrisé, incluant à la fois les contributions directes et d'échange.

Théorème de Wick et Développement Perturbatif : Les termes de la série perturbative

sont organisés à l'aide du théorème de Wick. Les diagrammes de Hugenholtz représentent ces termes en "fusionnant les processus physiquement équivalents", contrairement aux autres formalismes [5].

1.8.6 Avantages des diagrammes de Hugenholtz

- Réduction des Diagrammes : Un seul diagramme remplace plusieurs diagrammes de Feynman/Goldstone, grâce à l'antisymétrisation des sommets.
- Efficacité Numérique : Idéal pour les calculs de haute précision (ex : énergie de corrélation dans les gaz d'électrons).
-Intégration du Principe d'Exclusion de Pauli : L'antisymétrie des fermions est naturellement incluse [20].

1.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons établi les fondements théoriques indispensables à l'étude des systèmes quantiques de particules identiques. Nous avons introduit la seconde quantification, les interactions à deux corps, ainsi que les outils essentiels de la théorie des perturbations, notamment les diagrammes de Feynman et le théorème de Wick. Ces éléments conceptuels constituent une base solide pour les développements analytiques qui seront abordés dans les chapitres suivants, en particulier dans le cadre du modèle de Hubbard à haute température.

Chapitre 2

Methodes d'integrations

2.1 Introduction

La compréhension théorique des systèmes quantiques composés d'un grand nombre de particules identiques en interaction constitue l'un des défis fondamentaux de la physique de la matière condensée. Lorsqu'une solution exacte est hors de portée, ce qui est le cas dans la majorité des situations réalistes, la théorie de perturbation à plusieurs corps (TPMC) devient l'un des outils les plus puissants et les plus utilisés. Cette approche repose sur une formulation diagrammatique, introduite par Feynman [21] et étendue aux systèmes à plusieurs corps par Brueckner [22], Hugenholtz [23] et Goldstone [24]. À température finie, la théorie a été développée par Luttinger, Bloch et Gaudin [25–27].

Bien que des descriptions détaillées de la TPMC à température finie (TPMC-TF) soient disponibles dans plusieurs ouvrages classiques [28–30], la complexité combinatoire inhérente à cette méthode rend son application directe difficile. En effet, l'utilisation naïve du théorème de Wick [31] pour générer les diagrammes à un ordre donné entraîne une croissance exponentielle du nombre de configurations possibles.

Pour faire face à cette explosion combinatoire, deux techniques de réduction s'avèrent essentielles. La première consiste à supprimer tous les diagrammes déconnectés, en considérant directement le grand potentiel plutôt que la fonction de partition. La seconde repose sur l'élimination des diagrammes topologiquement équivalents, ne conservant qu'un ensemble minimal et distinct. Les premières tentatives dans cette direction [32–37] se fondaient sur des techniques de comparaison, mais ces approches deviennent inefficaces à mesure que l'ordre augmente, en raison de leur coût élevé en temps de calcul et en mémoire.

Dans ce travail, nous adoptons une méthode alternative, introduite dans [38], qui permet d'identifier directement les diagrammes essentiels, sans nécessité de comparaison

avec les configurations précédentes. Cette méthode, fondée sur des concepts issus de la théorie des graphes, offre une approche algorithmique plus efficace et plus systématique.

L'objectif principal de ce chapitre est l'évaluation automatique du grand potentiel à partir des diagrammes obtenus via notre méthode de réduction de la TPMC. L'ensemble des algorithmes développés repose sur des outils combinatoires avancés, dont certains sont proposés ici sous une forme améliorée ou généralisée.

$$H = H_0 + H_I = \sum_k (\varepsilon_k - \mu)\, a_k^+ a_k + \frac{1}{4} \sum_{rsml} V_{ml}^{rs} a_r^+ a_s^+ a_l a_m \tag{2.1}$$

Où a_k^+ et a_k sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation. Les éléments de matrice du potentiel d'interaction V_{ml}^{rs} contiennent la combinaison du potentiel direct $\langle rs|V|ml\rangle$ et du potentiel d'échange $\langle rs|V|lm\rangle$.

$$V_{ml}^{rs} = \langle rs\,|V|\,ml\rangle + \epsilon\,\langle rs\,|V|\,lm\rangle \tag{2.2}$$

Ici, $\epsilon = 1$ pour les bosons et $\epsilon = -1$ pour les fermions, et ε_k représente l'énergie des quasi-particules du système, et μ le potentiel chimique.

La théorie de perturbation à température finie à plusieurs corps (TPMC-TF) repose sur le développement en série de la fonction de partition canonique grand-canonique $Z = \mathrm{Tr} e^{-\beta H}$, où $\beta = \frac{1}{T}$ (T décrit la température). Le développement en perturbation de Z s'écrit comme suit [39]

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! 4^n} \int_0^\beta d\tau_1 ... \int_0^\beta d\tau_n \left\langle T \prod_{i=1}^{n} \{r_i s_i\,|V|\,m_i n_i\}\, a_{r_i}^+(\tau_i) a_{s_i}^+(\tau_i) a_{n_i}(\tau_i) a_{m_i}(\tau_i) \right\rangle_0 \tag{2.3}$$

La notation $\langle A\rangle_0 = \frac{1}{Z_0}\mathrm{Tr}\left(Ae^{-\beta H_0}\right)$ indique la moyenne thermique en mécanique statistique, et $a_i^+(\tau) = a_i^+ e^{\tau E_i}$, $a_i(\tau) = a_i e^{-\tau E_i}$. Ici, l'énergie est représentée comme

$$E_k = \varepsilon_k - \mu \tag{2.4}$$

La fonction de partition Z_0 est définie pour un système non interactif $Z_0 = \mathrm{Tr} e^{-\beta H_0}$.

En utilisant le théorème de Wick [31], la série de puissances de chaque ordre de la série (1.3) est calculée en énumérant tous les ensembles complets de contractions entre les opérateurs de création et d'annihilation contribuant à la moyenne thermique. La moyenne thermique de chaque contraction est donnée par

$$\left\langle a_p(\tau)\, a_q^+(\tau')\right\rangle_0 = \epsilon \left\langle a_q^+(\tau')\, a_p(\tau)\right\rangle_0 = \delta_{pq} g_p(\tau - \tau') \tag{2.5}$$

où le propagateur $g_p(\tau)$ est défini par

$$g_p(\tau - \tau') = e^{-(\tau-\tau')E_p}\left[f_p^+\theta(\tau - \tau' - \eta) + f_p^-\theta(\tau' - \tau + \eta)\right] \tag{2.6}$$

où l'infinitésimal $\eta \longrightarrow 0^+$ est inclus dans la fonction de Heaviside $\theta(x)$ pour indiquer que le deuxième terme doit être utilisé aux temps égaux. Les facteurs statistiques $f_p^{\pm}$ sont définis comme

$$\begin{aligned} f_p^- &= \epsilon\left(e^{\beta E_p} - \epsilon\right)^{-1} \\ f_p^+ &= 1 + f_p^- \end{aligned} \tag{2.7}$$

Pour simplifier, il est pratique de représenter le développement en série d'ordre n de (2.3) en termes de diagrammes en dessinant n sommets (étiquetés $\tau_1, \ldots, \tau_n$) avec deux lignes d'entrée et deux lignes de sortie, puis en connectant toutes les lignes d'entrée avec les lignes de sortie de toutes les façons possibles. Chaque ligne connectée p entre deux sommets τ_i et τ_j correspond au propagateur $g_p(\tau_i - \tau_j)$.

Le nombre de diagrammes N_D déduit de la relation (2.3) est $N_D = \frac{(2n)!}{2^n}$. Ce nombre contient des diagrammes connectés et déconnectés. Ainsi, en appliquant la fonction logarithme à (2.3), N_D peut être réduit aux seuls diagrammes connectés. Comme toutes les propriétés thermodynamiques peuvent également être dérivées du grand potentiel $\Omega = -\frac{1}{\beta}\log(Z)$, il est pratique d'étudier Ω plutôt que Z. Le développement en série du grand potentiel en termes de diagrammes est défini comme

$$\Omega = \Omega_0 + \sum(\text{Tous les diagrammes connectés}) \tag{2.8}$$

Où $\Omega_0 = \frac{\epsilon}{\beta}\sum_k \log\left(1 - \epsilon e^{-\beta E_k}\right)$ est le grand potentiel du système non interactif. Le nombre de diagrammes est réduit à $N_D = \frac{(2n)!}{2^n} -$ (Diagrammes déconnectés), mais ce nombre reste très grand. Comme de nombreux diagrammes connectés ont la même contribution numérique, il vaut la peine de choisir seulement un de ces diagrammes. Comme tous les intervalles d'intégration sur les temps imaginaires $\tau_1, \ldots, \tau_n$ ont les mêmes valeurs $[0, \beta]$ dans (2.3), alors toute permutation de sommets laisse la valeur d'un diagramme inchangée. En fait, toute permutation laissant le diagramme inchangé topologiquement (non déformé) ne peut pas être comptée, le nombre de ces diagrammes est appelé le facteur de symétrie S. Ainsi, il y a $\frac{n!}{S}$ diagrammes distincts qui ont les mêmes valeurs parmi les N_D diagrammes. Par conséquent, le nombre de diagrammes est réduit à moins de $\frac{\frac{(2n)!}{2^n} - (\text{Diagrammes déconnectés})}{n!}$, l'ensemble de ces diagrammes est appelé diagrammes non étiquetés dans [28]. Dans cette thèse, nous suggérons la nomenclature EDDs (Diagrammes Essentiellement Distincts)

proposée dans [32]. Ainsi, le grand potentiel (2.8) peut être écrit comme

$$\Omega = \Omega_0 + \sum_i \frac{(EDD)_i}{S_i} \tag{2.9}$$

Le problème qui se pose est comment énumérer tous les EDDs. De nombreux algorithmes [32–37] ont été proposés pour résoudre ce problème avec quelques différences. La technique essentielle utilisée consiste à lister chaque sommet parmi n sommets comme deux entiers successifs, puis à permuter tous ces entiers, où chaque permutation donne un diagramme distinct. Pour déterminer quel diagramme est un EDD, la méthode utilisée consiste également à permuter les paires d'entiers de chaque diagramme distinct et à les comparer avec l'ensemble des EDDs précédents. Mais cette technique nécessite beaucoup plus d'espace et de temps, car nous devons sauvegarder tous les EDDs précédents dans la mémoire vive de l'ordinateur (plus d'espace) et boucler sur tous les EDDs précédents à chaque étape de comparaison (plus de temps). Notre méthode [38] utilise une technique différente qui trouve directement les EDDs sur place et n'a pas besoin de les comparer avec les EDDs précédemment générés (pour une explication plus détaillée, voir [38]). Le sujet de cette thèse est d'évaluer chaque EDD généré par notre programme précédent [38].

2.2 Contribution du diagramme irréductible du second ordre

Commençons par le cas le plus simple du diagramme irréductible du second ordre illustré à la Fig. (2.1). La contribution du grand potentiel du second ordre [28, 38] peut

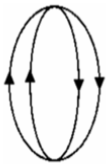


Figure 2.1: Le diagramme du vide de Hugenholtz du second ordre

être écrite comme

$$\Omega_2 = \frac{1}{\beta} V^{p_1 p_2}_{p_3 p_4} V^{p_3 p_4}_{p_1 p_2} \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau_1 d\tau_2 g_{p_1}(\tau_1 - \tau_2)\, g_{p_2}(\tau_1 - \tau_2)\, g_{p_3}(\tau_2 - \tau_1)\, g_{p_4}(\tau_2 - \tau_1) \tag{2.10}$$

Pour comprendre la méthode de calcul utilisée dans cette thèse, nous suggérons deux méthodes de base : la méthode *directe habituelle* et la *méthode graphique*.

2.2.1 Méthode directe

Pour évaluer l'intégrale sur l'intervalle $[0, \beta]$, il est utile de transformer de l'espace imaginaire τ à la fréquence. La transformation du propagateur (2.6) (ou somme de Matsubara [40]) est écrite comme suit

$$g_p(\tau - \tau') = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\zeta_m(\tau-\tau'-n\theta)}}{E_p - \zeta_m} \tag{2.11}$$

Où $\zeta_m = i\frac{\pi}{\beta}(2m)$ pour les bosons et $\zeta_m = i\frac{\pi}{\beta}(2m-1)$ pour les fermions. Et $\theta \longrightarrow 0^+$ et n sont des entiers positifs arbitraires. Ici, nous choisissons $\eta = n\theta$ pour éviter les difficultés dans certaines situations lors du calcul des limites $\eta \longrightarrow 0$. La relation des facteurs statistiques (2.7) dans la représentation de Matsubara [40] peut être écrite comme suit

$$f_p^{\pm} = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{0^{\mp}\zeta_m}}{E_p - \zeta_m} \tag{2.12}$$

En appliquant la somme de Matsubara à (2.10) et en intégrant τ sur l'intervalle $[0, \beta]$, nous obtenons

$$\Omega_2 = V_{p_3p_4}^{p_1p_2} V_{p_1p_2}^{p_3p_4} \frac{1}{\beta^3} \sum_{m_1m_2m_3m_4} \delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}} \prod_{i=1}^{4} \frac{e^{\zeta_{m_i} n_i \theta}}{(E_{p_i} - \zeta_{m_i})} \tag{2.13}$$

Où $\delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}}$ est le delta de Kronecker qui représente la conservation entre les lignes entrantes ζ_{m_1}, ζ_{m_2} et les lignes sortantes ζ_{m_3}, ζ_{m_4}. Il est évidemment nécessaire d'éliminer la conservation $\delta_{\zeta_{m_1}+\zeta_{m_2},\zeta_{m_3}+\zeta_{m_4}}$ pour simplifier le calcul de (2.13). Ainsi, nous multiplions la relation (2.13) par la quantité

$$\frac{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4} + \zeta_{m_1} + \zeta_{m_2} - \zeta_{m_3} - \zeta_{m_4}}{E_{p_1} + E_{p_2} - E_{p_3} - E_{p_4}} \tag{2.14}$$

Et réduisons chaque terme $E_{p_i} - \zeta_{m_i}$ dans le numérateur avec sa valeur correspondante dans le dénominateur, nous obtenons 4 termes élémentaires.

$$\Omega_2 = \Omega_2^1 + \Omega_2^2 + \Omega_2^3 + \Omega_2^4 \tag{2.15}$$

Avec

$$\begin{aligned}
\Omega_2^1 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\beta^3\left(E_{p_1}+E_{p_2}-E_{p_3}-E_{p_4}\right)}\sum_{m_2m_3m_4}\frac{e^{\zeta_{m_2}\theta(n_2-n_1)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_3+n_1)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4+n_1)}}{\left(E_{p_2}-\zeta_{m_2}\right)\left(E_{p_3}-\zeta_{m_3}\right)\left(E_{p_4}-\zeta_{m_4}\right)}\\
\Omega_2^2 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\beta^3\left(E_{p_2}+E_{p_1}-E_{p_3}-E_{p_4}\right)}\sum_{m_1m_3m_4}\frac{e^{\zeta_{m_1}\theta(n_1-n_2)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_3+n_2)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4+n_2)}}{\left(E_{p_1}-\zeta_{m_1}\right)\left(E_{p_3}-\zeta_{m_3}\right)\left(E_{p_4}-\zeta_{m_4}\right)}\\
\Omega_2^3 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\beta^3\left(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}\sum_{m_1m_2m_4}\frac{e^{\zeta_{m_1}\theta(n_1+n_3)}e^{\zeta_{m_2}\theta(n_2+n_3)}e^{\zeta_{m_4}\theta(n_4-n_3)}}{\left(E_{p_1}-\zeta_{m_1}\right)\left(E_{p_2}-\zeta_{m_2}\right)\left(E_{p_4}-\zeta_{m_4}\right)}\\
\Omega_2^4 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\beta^3\left(E_{p_4}+E_{p_3}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}\sum_{m_1m_2m_3}\frac{e^{\zeta_{m_1}\theta(n_1+n_4)}e^{\zeta_{m_2}\theta(n_2+n_4)}e^{\zeta_{m_3}\theta(n_3-n_4)}}{\left(E_{p_1}-\zeta_{m_1}\right)\left(E_{p_2}-\zeta_{m_2}\right)\left(E_{p_3}-\zeta_{m_3}\right)}
\end{aligned} \tag{2.16}$$

Maintenant, nous choisissons les valeurs des nombres $n_i > 0$ de telle manière que la somme $\sum_i n_i$ dans $e^{\zeta_m\theta\left(\sum_i n_i\right)}$ ne soit pas égale à zéro. Par exemple, $n_1 = 2$, $n_2 = 1$, $n_3 = 2$, $n_4 = 1$. Après avoir appliqué la limite $\theta \to 0^+$, nous trouvons chaque facteur statistique correspondant $f_p^{\pm}$ de la relation (2.12). Ainsi, les 4 termes élémentaires sont réécrits sous les formes suivantes :

$$\begin{aligned}
\Omega_2^1 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\left(E_{p_1}+E_{p_2}-E_{p_3}-E_{p_4}\right)}f_{p_2}^-f_{p_3}^-f_{p_4}^-\\
\Omega_2^2 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\left(E_{p_2}+E_{p_1}-E_{p_3}-E_{p_4}\right)}f_{p_1}^+f_{p_3}^-f_{p_4}^-\\
\Omega_2^3 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\left(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}f_{p_1}^-f_{p_2}^-f_{p_4}^+\\
\Omega_2^4 &= \frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}}{\left(E_{p_4}+E_{p_3}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)}f_{p_1}^-f_{p_2}^-f_{p_3}^-
\end{aligned} \tag{2.17}$$

En raison de la symétrie, le potentiel $V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}$ ne change pas sous la transformation suivante $p_4 \to p_3$, $p_3 \to p_4$ dans Ω_2^3 et $p_3 \to p_1$, $p_1 \to p_3$, $p_4 \to p_2$, $p_2 \to p_4$ dans Ω_2^2, et $p_3 \to p_2$, $p_2 \to p_3$, $p_4 \to p_1$, $p_1 \to p_4$ dans Ω_2^1. Nous trouvons alors la version finale de Ω_2.

$$\Omega_2 = 2\frac{V_{p_3p_4}^{p_1p_2}V_{p_1p_2}^{p_3p_4}f_{p_1}^-f_{p_2}^-\left(f_{p_3}^+ + f_{p_3}^-\right)}{\left(E_{p_3}+E_{p_4}-E_{p_1}-E_{p_2}\right)} \tag{2.18}$$

Remarque : Nous pouvons choisir d'autres valeurs pour n_i, par exemple $n_1 = 1$, $n_2 = 2$, $n_3 = 2$, $n_4 = 1$ ou $n_1 = 1$, $n_2 = 4$, $n_3 = 2$, $n_4 = 3$, mais le résultat reste identique à Ω_2 dans (2.18).

2.2.2 Méthode graphique

L'idée principale de la méthode graphique est de décomposer le produit des propagateurs associés aux lignes d'un graphe donné en fractions partielles. Tout d'abord, nous dessinons sur le graphe G_1 de la Fig.(2.1) tous les arbres possibles, c'est-à-dire les graphes associés sans cycles de deux sommets et une ligne choisie parmi les lignes de G_1 (Il y a 4 arbres T_i, $i = 1, \ldots, 4$ sur G_1). La Fig. (2.2) montre tous les arbres possibles dans le graphe G_1, où les lignes épaisses représentent l'arbre T_i, tandis que les lignes minces représentent l'arbre complémentaire associé à l'arbre. Expliquons maintenant la règle de

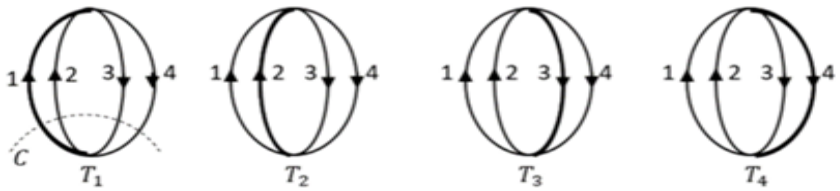


Figure 2.2: Tous les arbres possibles du diagramme de Hugenholtz d'ordre deux

calcul pour un arbre T_1 de la Fig. (2.2). La contribution de l'arbre T_1 peut être définie comme suit : Les lignes de l'arbre T_1 sont associées aux dénominateurs des énergies. Les lignes complémentaires 2, 3 et 4 de G_1 sont associées aux facteurs statistiques f^+ ou f^-.

1. Dénominateur des énergies : Pour déterminer le dénominateur D_1 de T_1, nous coupons le graphe en deux graphes séparés de telle sorte que les ciseaux passent à travers une seule branche de l'arbre, nous désignons cette opération de coupe par le symbole C. Le dénominateur est $D_1 = +E_1 + E_2 - E_3 - E_4$, où le signe + a été placé devant l'énergie E_1 de la seule ligne de l'arbre T_1 qui est coupée par C, et les autres signes suivent la direction relative par rapport à E_1 des lignes qui sont coupées par C.

2. Nombres des facteurs statistiques : Dans cette méthode, chaque ligne complémentaire i du graphe représente le facteur statistique correspondant f_i^+ ou f_i^-. Il reste maintenant à déterminer le $signe_i$ (+ ou −) dans l'exponentielle du facteur $f_i^{signe_i}$. Remarquez que l'ajout mental d'une ligne complémentaire à l'arbre T_i crée un cycle fondamental.

   Définition 2.1. Coefficient de l'arête n_i : est un nombre entier associé à la ligne i, où $n_i > 0$.

   Définition 2.2. Définissons l'*orientation totale* O_i de chaque cycle de la manière suivante : nous parcourons le cycle dans le sens indiqué par la flèche de la ligne i.

Donc :

$$O_i = n_i^+ - n_i^- \tag{2.19}$$

Où n_i^+ représente le nombre total de coefficients de bord rencontrés dans la même direction que la ligne i et n_i^- représente le nombre de coefficients de bord pointant dans la direction opposée à i. Par conséquent, le $signe_i$ peut être déterminé comme

$$signe_i = [O_i] = \frac{O_i}{|O_i|} \tag{2.20}$$

Où les crochets sont utilisés pour indiquer un signe.

L'orientation totale de chaque cycle dans T_1 des lignes complémentaires 2, 3 et 4 est

Pour la ligne 2 : $O_2 = n_2 - n_1$

Pour la ligne 3 : $O_3 = n_3 + n_1$

Pour la ligne 4 : $O_4 = n_4 + n_1$

Enfin, la contribution de l'arbre T_1 est

$$\Omega_2^1 = \frac{f_2^{[n_2-n_1]} f_3^{[n_3+n_1]} f_4^{[n_4+n_1]}}{(E_1 + E_2 - E_3 - E_4)} \tag{2.21}$$

De la même manière, nous pouvons déterminer toutes les autres contributions des arbres T_2, T_3 et T_4

$$\begin{aligned}
\Omega_2^2 &= \frac{f_1^{[n_1-n_2]} f_3^{[n_3+n_2]} f_4^{[n_4+n_2]}}{(E_2 + E_1 - E_3 - E_4)} \\
\Omega_2^3 &= \frac{f_1^{[n_1+n_3]} f_2^{[n_2+n_3]} f_4^{[n_4-n_3]}}{(E_3 + E_4 - E_1 - E_2)} \\
\Omega_2^4 &= \frac{f_1^{[n_1+n_4]} f_2^{[n_2+n_4]} f_3^{[n_3-n_4]}}{(E_4 + E_3 - E_1 - E_2)}
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Enfin, nous choisissons les valeurs de $n_i > 0$ de telle sorte que toutes les orientations totales ne soient pas égales à zéro. En prenant le choix arbitraire $n_1 = 2, n_2 = 1, n_3 = 2, n_4 = 1$, nous obtenons les mêmes résultats que (2.16).

Dans ce chapitre, nous proposons la méthode graphique. Nous devons étudier quelques problèmes connus en théorie des graphes.

2.3 Définitions

Soit $G\,(n, m)$ un graphe connexe avec n sommets et m arêtes.

Définition 2.3. L'*arbre couvrant* T est un sous-graphe de G qui inclut tous les sommets de G mais ne contient aucun cycle [41–43]. Les arêtes de l'arbre couvrant sont appelées branches. Le nombre de branches dans l'arbre couvrant est $n-1$.

Définition 2.4. Le *cotree* T^* (complément d'un arbre) d'un arbre couvrant T dans G est exactement constitué des arêtes de G qui ne sont pas dans T [42,43]. Les arêtes du cotree sont appelées cordes (le cotree peut contenir des cycles). Par conséquent, le nombre de cordes dans le cotree est $m-n+1$.

Définition 2.5. La *coupe fondamentale* est une coupe constituée d'une seule branche de l'arbre couvrant T et d'un certain nombre de cordes du cotree T^*, de sorte que le graphe G soit divisé en deux parties. Cet ensemble de $n-1$ coupes est appelé ensemble de coupes fondamentales. L'orientation des ensembles de coupes fondamentales est choisie pour être en accord avec celle de la branche définissante [43].

Définition 2.6. Le *cycle fondamental* est un cycle produit après l'ajout d'une seule corde du cotree T^* à l'arbre couvrant T [42,44]. Le nombre de cycles fondamentaux générés par cette méthode est de $m-n+1$ cycles.

Voici un exemple de graphe connexe G avec les sommets $v_i, 1 \leq i \leq 5$ et les arêtes $E_j, 1 \leq j \leq 8$: L'exemple de l'arbre couvrant T défini par les branches $\{E_2, E_3, E_7, E_8\}$, et le cotree associé T^* représenté par les cordes $\{E_1, E_4, E_5, E_6\}$. Le dénominateur des énergies D peut être calculé directement à partir des coupes fondamentales $D = C_2C_3C_7C_8$, où l'on voit dans la figure que $C_2 = E_2 - E_1$, $C_3 = E_3 + E_5 - E_1 - E_4$, $C_7 = E_7 + E_4 - E_5 - E_6$ et $C_8 = E_8 + E_4 - E_5 - E_6$. Les facteurs statistiques peuvent également être déterminés à partir des cordes du cotree $f_1^{[O_1]} f_4^{[O_4]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]}$, où les orientations totales O_j peuvent être extraites des cycles fondamentaux qui sont $O_1 = n_1 + n_3 + n_2$, $O_4 = n_4 + n_3 - n_7 - n_8$, $O_5 = n_5 + n_7 + n_8 - n_3$ et $O_6 = n_6 + n_7 + n_8$.

La formule générale F_n^G de la contribution d'un diagramme connexe donné G au grand potentiel est

$$\Omega_n^G = \sum_{Touteslesarbrescouvrants} \frac{\prod_{j=1}^{m-n+1} f_j^{[O_j]}}{\prod_{i=1}^{n-1} C_i} \tag{2.23}$$

Où C_i représentent les coupes fondamentales (Def. 2.5) de l'arbre couvrant T (Def. 2.3), et $[O_j]$ représentent l'orientation totale (Def. 2.2) de chaque cycle fondamental (Def. 2.6) j du cotree T^* (Def. 2.4). Ainsi, la méthode graphique de calcul de Ω_n^G a été réduite à quatre problèmes connus en théorie des graphes :

1. Enumérer tous les arbres couvrants du graphe connexe.
   (1) Trouver les coupes fondamentales de chaque arbre couvrant T.
   (2) Trouver les cycles fondamentaux de chaque cotree correspondant T^*.
2. Enumérer tous les cycles du graphe connexe pour trouver les valeurs des coefficients de branche n_i (Def. 2.1).

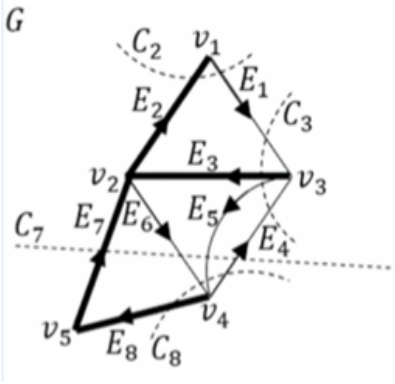


Figure 2.3: Exemple de graphe connexe : Les lignes épaisses représentent un exemple d'arbre couvrant T, tandis que les lignes fines représentent le cotree T^* associé à T. Les ensembles de coupes fondamentales sont représentés par des lignes en pointillés. $\{v_1, v_3, v_4\}$, $\{E_2, E_3, E_8\}$ sont respectivement les sommets et les branches terminales de l'arbre couvrant T.

2.4 Énumérer tous les arbres couvrants

Plusieurs algorithmes ont été développés pour énumérer tous les arbres couvrants [45–51], avec des degrés d'utilité variables. Dans cette thèse, nous proposons un algorithme différent basé sur la méthode de contraction-suppression. Les détails de l'algorithme sont présentés dans les procédures suivantes

2.4.1 Procédure d'initialisation

— Supprimer toutes les boucles Hartree-Fock (HFL), c'est-à-dire une ligne orientée partant et aboutissant sur le même sommet. La contribution de chaque HFL est f_k^-, où k est le numéro de l'arête de cette boucle, et est calculée comme un facteur commun ;
— Utiliser la recherche en profondeur d'abord (DFS) [52] pour trouver un arbre arbitraire du graphe connexe G ;
— Relabelliser les sommets du graphe G selo Les étapes (2) et (3) permettent de s'assurer que chaque sommet v_i doit être connecté au sommet v_{i-1}.n l'ordre des sommets rencontrés lors de la recherche DFS.

La Fig. (2.4). (a) montre un exemple de l'ordre 4 des diagrammes de Hugenholtz avec 4 sommets v_1, v_2, v_3, v_4 et 8 arêtes $E_1, \ldots, E_8$. La Fig. (2.4). (b) représente le diagramme $G1$ après la procédure d'initialisation, on voit ici dans $G2$ que v_4 a une arête avec v_3 (l'arête E_7), v_3 a une arête avec v_2 (l'arête E_3) et v_2 a une arête avec v_1 (l'arête E_1). La contribution des HFL dans l'exemple de la Fig. (2.4). (b) est $f_2^- f_8^-$ et nous ajouterons ce facteur commun à la fin du calcul.

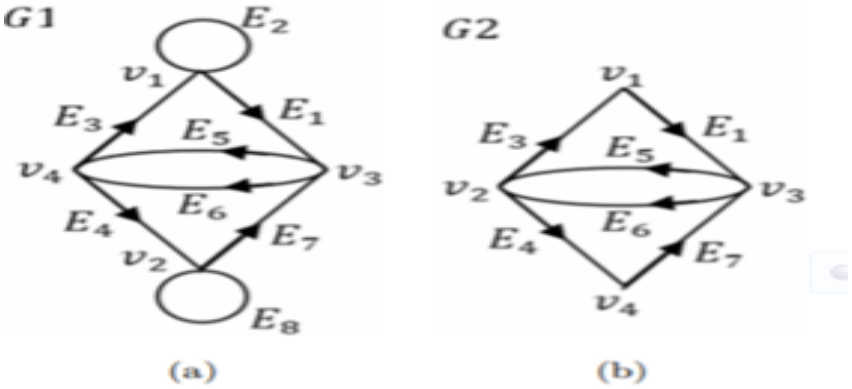


Figure 2.4: (a) $G1$: Un exemple d'ordre 4 des diagrammes de Hugenholtz, (b) $G2$: Le diagramme initialisé obtenu après l'application de la procédure d'initialisation sur le graphe $G1$.

2.4.2 Procédure de contraction-suppression

La méthode de contraction et de suppression consiste à décomposer le graphe initialisé $G(n, m)$ en un niveau de multi-graphe réduit $G^{(k,l_k)}, k = n, \ldots, 1$ et $1 \leq l_k \leq n_k$, où n_k est le nombre d'arêtes incidentes au sommet v_k. Au niveau k, on supprime chaque arête incidente au sommet v_k et on contracte le long de cette arête (en joignant le sommet v_k à son sommet adjacent le long de cette arête) pour traiter le niveau $k-1$, comme illustré à la Fig. (2.5), montrant la procédure de contraction-suppression au niveau k. Pendant cette opération, nous rencontrons des arêtes parallèles résultant des contractions précédentes, ces arêtes sont supprimées et contractées simultanément comme une seule arête. Cette méthode est répétée de manière récursive en commençant par le niveau n jusqu'au niveau 1. La méthode de contraction-suppression nous aide à compresser toutes les arêtes parallèles. La Fig. (2.6) montre les processus de contraction et de suppression du graphe $G2$. L'arbre de flux de calcul correspondant (arbres compressés) est présenté dans la Fig. (2.7), où chaque flèche représente un ensemble d'arêtes parallèles.

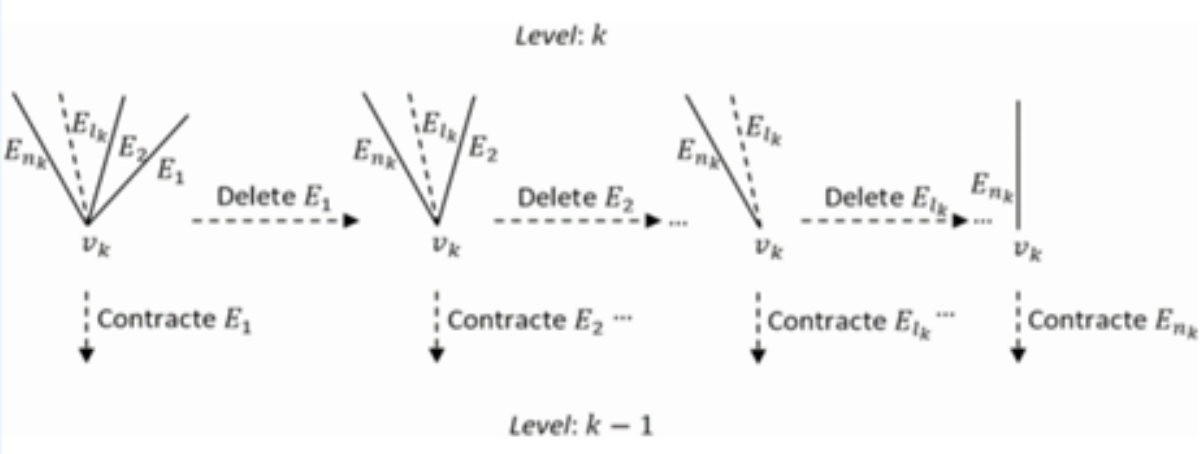


Figure 2.5: Procédure de contraction-suppression au niveau k.

2.4.3 L'algorithme d'arbre couvrant compressé et décompressé (CDST)

Dans cette thèse, nous proposons un nouvel algorithme pour mettre en œuvre la méthode de contraction-suppression. L'idée de base de cet algorithme est de classer les positions des arêtes selon la représentation d'un entier sous forme binaire. Soit $G = (V, E)$ un graphe initialisé et connecté (initialisé signifie que le graphe G est obtenu après la procédure d'initialisation (1)), avec $V = \{v_n, v_{n-1}, \ldots, v_1\}$ les sommets et $E = \{E_m, \ldots, E_k, \ldots, E_2, E_1\}$ les arêtes (les arêtes triées par ordre décroissant et représentant les énergies). Soit $Edg\,(j, i)$, $j = 2, 3, \ldots, n$ et $i = 1, 2, \ldots, j-1$, les arêtes dans G joignant j et i arrangées dans l'ordre croissant de i et selon leur position dans E. Les arêtes E_k de l'ensemble E sont présentées sous forme binaire, c'est-à-dire $E_k = 2^{k-1}$. Cette méthode nous aide à présenter les arêtes $Edg\,(j, i)$ sous forme d'entiers. Soit $LE\,(j)$, $j = 2, 3, \ldots, n$ contenant la liste des entiers $Edg\,(j, i)$.

$$LE\,(j) = \{Edg\,(j, i)\,; 1 \leq i < j\}; 2 \leq j \leq n \tag{2.24}$$

Par exemple, dans le graphe G_2 de la Fig. (2.4). (b), nous avons

$$\begin{aligned} LE(4) &= \{\{\}, \{E_4\}, \{E_7\}\} \\ LE(3) &= \{\{E_1\}, \{E_5, E_6\}\} \\ LE(2) &= \{\{E_3\}\} \end{aligned}$$

Dans cet exemple, E_5 et E_6 dans $LE\,(3)$ sont des arêtes parallèles. La présentation

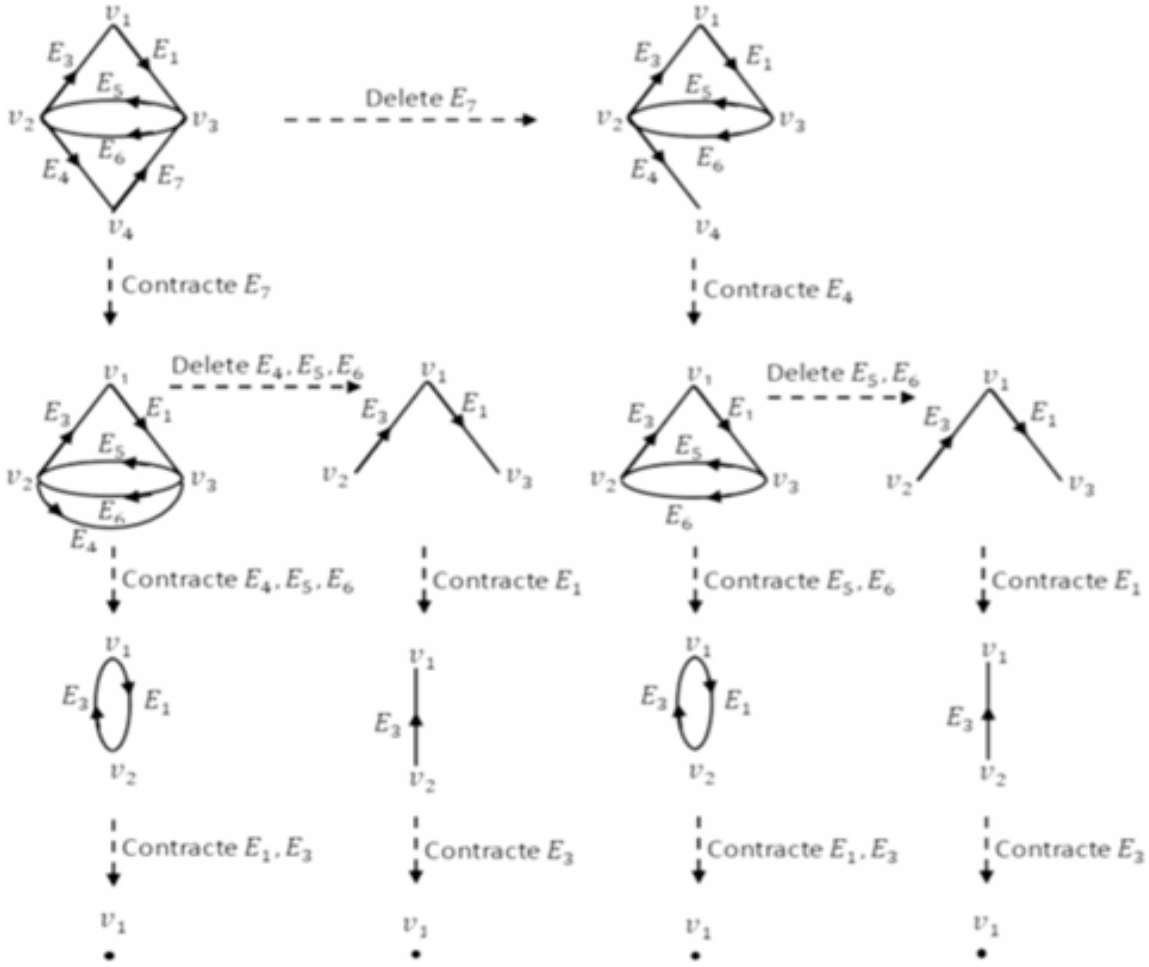


Figure 2.6: Le flux de calcul du graphe $G2$.

sous forme binaire est :

$$\begin{aligned} LE\,(4) &= \{0, 2^3, 2^6\} = \{0, 8, 64\} \\ LE\,(3) &= \{2^0, 2^4 + 2^5\} = \{1, 48\} \\ LE\,(2) &= \{2^2\} = \{4\} \end{aligned} \tag{2.25}$$

Ensuite, nous appliquons l'algorithme récursif suivant qui repose sur deux opérations arithmétiques, l'opération (+) ou (OR) pour la contraction et l'opération (-) ou (XOR) pour la suppression.

$k = n$

Compression(k)

si $k == 1$ **alors**

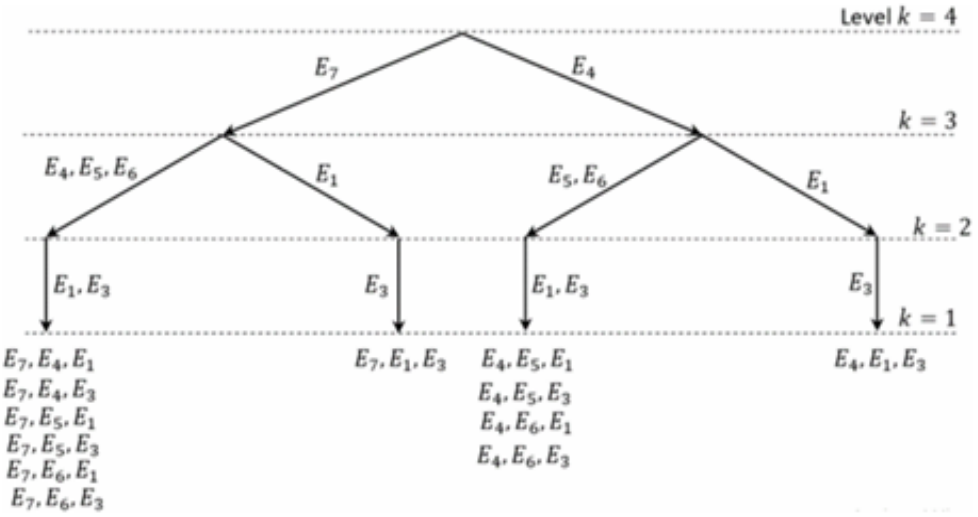


Figure 2.7: Diagramme d'arbre (arbre compressé) du graphe $G2$.

Afficher : CTr
Décompression(n)
sinon
Commentaire : Étape de contraction
faire $i = 1,\ i < k$
si $Edg\,(k, i) == 0$ **alors continuer**
fin si
$CTr\,(k) = Edg\,(k, i)$
SauvegarderBitsGauches($Edg\,(k, i)$, k)
faire $j = 1, j < i$
$Edg\,(i, j) = Edg\,(i, j) + Edg\,(k, j)$
fin faire
Compression(k-1)
Commentaire : Étape de suppression
$CTr\,(k) = 0$
faire $j = 1, j < i$
$Edg\,(i, j) = Edg\,(i, j) - Edg\,(k, j)$
fin faire
fin si
fin Compression

Où $CTr = \{a_0, a_1, \ldots a_k, \ldots, a_{n-2}\}$ est un ensemble d'arbres compressés a_k (la compression indique la somme des arêtes parallèles rencontrées). Pour décompresser a_k, nous devons extraire successivement le bit le plus à droite (ou le plus à gauche) de chaque entier

a_k en utilisant l'opération $a_k\,(AND)\,(NOT)\,(a_k - 1)$, puis enregistrer cet entier dans des listes chaînées $LB\,(k, i)$, c'est le rôle de la fonction SauvegarderBitsGauches. Le nombre d'arêtes (cela signifie le nombre de bits) dans a_k peut être calculé pendant cette opération.

SauvegarderBitsGauches(a_k, k)

nb = 0

La procédure finale consiste à décompresser CTr, ce qui indique la combinaison de chaque bit dans a_i avec chaque bit dans a_j pour tous les $j = 0, \ldots, n-2; j \neq i$. L'algorithme de décompression suivant peut étendre CTr et imprimer les résultats de tous les arbres couvrants Tr

$Tr = 0$

Décompression(k)

Si $k == 1$ **alors**

Afficher : Tr

sinon

faire $i = 0, i < NombreDeBits(k)$

$Tr = Tr + LB(k, i)$

Décompression(k-1)

$Tr = Tr - LB(k, i)$

fin faire

fin si

fin décompression

Par exemple, les arbres compressés obtenus après l'application de l'algorithme de compression sur le graphe G_2 présenté dans la Fig. (2.4). (b), sont :

$$\{64, 56, 5\}$$
$$\{64, 1, 4\}$$
$$\{8, 48, 5\}$$
$$\{8, 1, 4\}$$

Les arbres couvrants obtenus, après l'application de l'algorithme de décompression, sont :

73,76,81,84,97,100 ;69 ;25,28,41,44 ;13

Ces nombres entiers sont présentés respectivement dans l'architecture informatique

sous forme

$$01001001, 01001100, 01010001, 01010100, 01100001, 01100100;$$
$$01000101; 00011001, 00011100, 00101001, 00101100; 00001101.$$

Où le bit de chaque entier représente la position appropriée de l'arête de l'arbre couvrant selon la liste des arêtes du graphe E

$$\begin{aligned} &01001001 \to \{E_7, E_4, E_1\}, 01001100 \to \{E_7, E_4, E_3\}, 01010001 \to \{E_7, E_5, E_1\}, \\ &01010100 \to \{E_7, E_5, E_3\}, 01100001 \to \{E_7, E_6, E_1\}, 01100100 \to \{E_7, E_6, E_3\}; \\ &01000101 \to \{E_7, E_3, E_1\}; 00011001 \to \{E_5, E_4, E_1\}, 00011100 \to \{E_5, E_4, E_3\}, \\ &00101001 \to \{E_6, E_4, E_1\}, 00101100 \to \{E_6, E_4, E_3\}; 00001101 \to \{E_4, E_3, E_1\} \end{aligned} \quad (2.26)$$

The space required to store each tree is O(1) because stored as integer. The time required to generate all spanning trees of an example of graph G(n,m) contain n vertices and m edges using my home computer (Intel I3, RAM 4G, 64Bits) is

- G(19,38) generate 4 980 736 spanning trees in 0.6 second.
- G(20,40) generate 10 485 760 spanning trees in 1 second.
- G(24,48) generate 201 326 592 spanning trees in 10 second.

Ce résultat est meilleur que celui de [48,51] à la fois en termes d'espace et de temps. L'algorithme CDST est codé en langage C/C++, le programme complet CDST peut être trouvé sur ma page d'accueil GitHub https://github.com/tagtog12000/SpanTree/blob/master/st.cpp.

2.5 Un algorithme pour extraire le dénominateur et le numérateur à partir d'un arbre couvrant

Pour calculer le dénominateur et le numérateur, nous suivons le processus suivant

Étapes initiales

Étape du dénominateur : Supposons que les dénominateurs initiaux dans chaque sommet de l'arbre couvrant correspondent à la différence entre les flèches d'énergie entrantes et sortantes. Les premiers dénominateurs sont directement inclus à partir des sommets terminaux.

Étape du numérateur : Les orientations totales initiales sont les coefficients des cordes.

Étapes intermédiaires

Étape du dénominateur : Contractez toutes les branches terminales de l'arbre couvrant en combinant chaque sommet terminal avec son voisinage, ce qui conduit à un arbre

contracté. Chaque dénominateur du sommet terminal de l'arbre contracté est la somme des dénominateurs du sommet terminal et de son voisinage de l'arbre couvrant.

Étape du numérateur : Ajoutez chaque coefficient de la branche contractée à l'orientation totale jointe correspondante, mais tenez compte du signe de ces coefficients, le signe plus (moins) si la flèche de la branche contractée est dans la même direction (direction opposée) que la corde jointe de l'arbre cotree.

Ces étapes sont répétées jusqu'à ce que l'arbre couvrant se réduise à une seule branche.

Étapes finales

Étape du dénominateur : Le signe des arêtes couvrantes dans les dénominateurs produits doit être positif, c'est-à-dire multiplier le dénominateur par -1 (+1) si le signe de son énergie de la branche est négatif (positif).

Étape du numérateur : Continuez à trouver toutes les orientations totales en contractant la dernière branche de l'arbre contracté.

L'exemple de la Fig. (2.8) montre les étapes de calcul du dénominateur et du numérateur pour l'arbre couvrant $\{E_7, E_4, E_3\}$ du graphe G_2 de la Fig. (2.4). (b). Dans les premières étapes, Fig. (2.8). (a), les dénominateurs initiaux de chaque sommet sont

$$\begin{aligned} D_{v_1} &= E_3 - E_1 \\ D_{v_2} &= E_5 + E_6 - E_3 - E_4 \\ D_{v_3} &= E_1 + E_7 - E_5 - E_6 \\ D_{v_4} &= E_4 - E_7 \end{aligned} \tag{2.27}$$

Parce que les sommets v_1 et v_3 sont les sommets terminaux des branches 3 et 7 respectivement, alors les premiers dénominateurs sont $d_1 = D_{v_1} = E_3 - E_1$ et $d_2 = D_{v_3} = E_7 + E_1 - E_5 - E_6$. Les valeurs des orientations totales sont directement incluses à partir des coefficients du cotree $O_1 = n_1$, $O_5 = n_5$ et $O_6 = n_6$.
Dans les étapes intermédiaires, nous appliquons l'opération de contraction le long des branches terminales 3 et 7, les dénominateurs des sommets terminaux v_2 et v_4 sont modifiés en $D'_{v_2} = D_{v_2} + D_{v_1}$ et $D'_{v_4} = D_{v_4} + D_{v_3}$, nous choisissons l'un de ces dénominateurs $d_3 = D'_{v_2} = -D'_{v_4} = E_5 + E_6 - E_1 - E_4$. Pour le numérateur, nous ajoutons les coefficients n_3 et n_7 des branches terminales 3 et 7 aux orientations totales, dans la Fig. (2.8). (a), la branche 3 dans la même direction que la corde 1, la branche 7 dans la direction opposée de la corde 1 et dans la même direction que les cordes 5 et 6, alors les orientations totales sont modifiées en $O_1 = n_1 + n_3 - n_7$, $O_5 = n_5 + n_7$ et $O_6 = n_6 + n_7$ respectivement. Puisque l'arbre contracté contient seulement une branche, nous sortons de cette étape.

Dans les étapes finales, multipliez chaque dénominateur par -1 si son signe d'énergie de la branche est négatif. Les formules finales des dénominateurs sont : $d_1 = E_3 - E_1$; $d_2 = E_7 + E_1 - E_5 - E_6$; $d_3 = E_4 + E_1 - E_5 - E_6$ Pour trouver tous les coefficients du cotree, nous devons contracter la branche finale 4, dans la Fig. (2.8). (b), la branche 4 dans la direction opposée de la corde 1 et dans la même direction que les cordes 5 et 6, ce qui conduit à $O_1 = n_1 + n_3 - n_7 - n_4$, $O_5 = n_5 + n_7 + n_4$ et $O_6 = n_6 + n_7 + n_4$ respectivement.
Maintenant, nous pouvons conclure que l'expression du grand potentiel de l'arbre couvrant $\{E_7, E_4, E_3\}$ est :

$$\frac{f_1^{[O_1]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]}}{d_1 d_2 d_3} \tag{2.28}$$

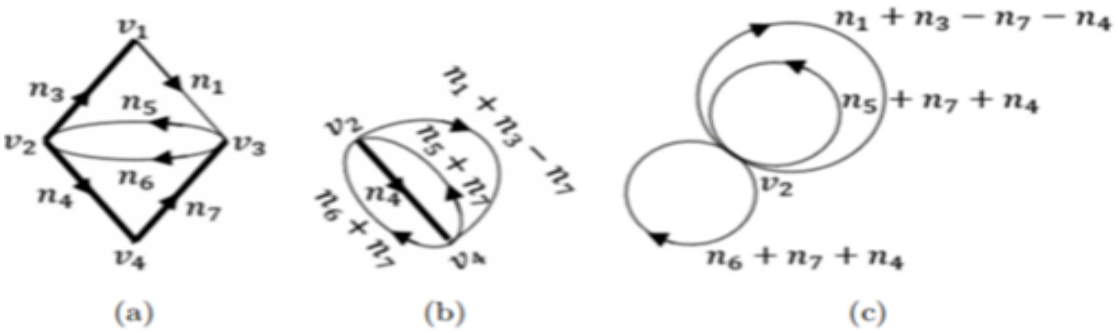


Figure 2.8: Les étapes de calcul pour le dénominateur et le numérateur, les flèches épaisses (minces) représentent les branches (cordes) de l'arbre couvrant (cotree).

2.6 Coefficients des arêtes

Il est nécessaire de calculer les valeurs arbitraires des coefficients des arêtes n_i, où $i = 1, \ldots, m$. Le problème est que nous ne pouvons pas déterminer n_i de chaque arbre couvrant séparément. En d'autres termes, comme les coefficients des arêtes sont associés à la recherche de cycles fondamentaux, cela conduit évidemment à la détermination de tous les cycles du graphe dirigé une fois pour toutes. L'énumération de tous les cycles d'un graphe connexe est un autre sujet fondamental en théorie des graphes. Il existe de nombreux algorithmes [53–58] proposés pour résoudre ce problème avec une vitesse et un espace optimaux. Dans cette thèse, nous choisissons l'algorithme de Gibbs [53] pour la raison que nous pouvons imprimer tous les cycles sous forme binaire. Il y a un problème dans l'algorithme de Gibbs qui prend énormément d'espace, mais nous pouvons modifier cet algorithme pour résoudre ce problème. L'idée principale de cet algorithme

est la suivante :

1. Trouver tous les cycles fondamentaux à partir d'un arbre couvrant arbitraire.
2. Combinaison de tous les cycles fondamentaux obtenus à l'étape 1.
3. Sélectionner uniquement un cycle valide généré à partir de l'étape 2.

Cycles fondamentaux : Les cycles fondamentaux peuvent être déterminés à partir d'un arbre couvrant arbitraire T (Déf. 2.6). L'ensemble des cycles fondamentaux $F_i, i = 1, 2, \ldots, m-n+1$ fournit une base pour générer tous les cycles du graphe connexe. Chaque cycle fondamental F_i peut être présenté sous forme binaire en choisissant chaque arête dans F_i selon sa position dans le graphe $G = \{e_m, \ldots e_k, \ldots, e_2, e_1\}$, où l'arête k est présentée sous forme binaire $e_k = 2^{k-1}$.
Combinaison : Pour générer tous les cycles du graphe non dirigé, nous devons combiner tous les cycles fondamentaux par les opérations XOR.
Cycles valides : Les opérations de combinaison génèrent certains cycles déconnectés, car la combinaison de deux ou plusieurs cycles disjoints par l'opération XOR conduit toujours à deux ou plusieurs cycles disjoints. Par conséquent, chaque cycle généré par l'opération de combinaison doit être validé avant de passer à une autre combinaison.
Cet algorithme nécessite $O\left(2^{m-n+1}\right)$ opérations. Tous les cycles du graphe G sont obtenus sous forme de nombres entiers.
Toutes les orientations totales possibles du graphe G peuvent être trouvées en convertissant tous les cycles selon les directions de leurs arêtes. Les valeurs des coefficients des arêtes sont choisies arbitrairement afin que les orientations totales ne soient pas nulles. Par exemple, dans la Fig. (2.8). (a), les *cycles fondamentaux* de l'arbre couvrant $\{E_7, E_4, E_3\}$ sont :

$$\begin{aligned} F_1 &= \{E_1, E_3, E_4, E_7\} = 1001101 \\ F_2 &= \{E_5, E_7, E_4\} = 1011000 \\ F_3 &= \{E_6, E_7, E_4\} = 1101000 \end{aligned} \tag{2.29}$$

Combinaison de chaque f-cycle de l'ensemble (2.29) avec un autre cycle de cet ensemble donne

$$\begin{aligned} F_4 &= F_1\,(XOR)\,F_2 = 0010101 = \{E_5, E_3, E_1\} \\ F_5 &= F_1\,(XOR)\,F_3 = 0100101 = \{E_6, E_3, E_1\} \\ F_6 &= F_2\,(XOR)\,F_3 = 0110000 = \{E_5, E_6\} \\ F_7 &= F_1\,(XOR)\,F_2\,(XOR)\,F_3 = 1111101 = \{E_7, E_6, E_5, E_4, E_3, E_1\} \end{aligned} \tag{2.30}$$

Cycles valides de l'ensemble (2.30) sont F_4, F_5, F_6, le cycle F_7 n'est pas valide car il contient deux cycles disjoints F_1, F_6. Les orientations totales de l'ensemble de cycles $F_i, i = 1, .., 6$ mènent à

$$\begin{aligned} &O_1 = \pm\left(n_1 + n_3 - n_4 - n_7\right), O_2 = \pm\left(n_5 + n_4 + n_7\right), O_3 = \pm\left(n_6 + n_4 + n_7\right), \\ &O_4 = \pm\left(n_5 + n_3 + n_1\right), O_5 = \pm\left(n_6 + n_3 + n_1\right), O_6 = \pm\left(n_5 - n_6\right) \end{aligned} \tag{2.31}$$

Étant donné que $n_i > 0$,(alors les valeurs de O_2, O_3, O_4 et O_5 sont strictement positives ou négatives. Les valeurs aléatoires $n_1 = 2, n_3 = 1, n_4 = 1, n_5 = 2, n_6 = 1$ et $n_7 = 1$ laissent $O_i \neq 0$, $i = 1, \ldots, 6$. La contribution finale du potentiel grandissant du diagramme de la Fig. (2.4). (a), est

$$\{12|V|32\}\{34|V|56\}\{56|V|17\}\{78|V|48\} f_2^- f_8^- \sum_{i=1}^{8} T_i \tag{2.32}$$

Où

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{f_1^- f_5^- f_6^-}{\left(E_3 - E_1\right)\left(E_7 + E_1 - E_5 - E_6\right)\left(E_4 + E_1 - E_5 - E_6\right)} \\ T_2 &= \frac{f_3^- f_5^- f_6^-}{\left(E_1 - E_3\right)\left(E_3 + E_4 - E_5 - E_6\right)\left(E_3 + E_7 - E_5 - E_6\right)} \\ T_3 &= \frac{f_4^+ f_5^- f_6^-}{\left(E_7 - E_4\right)\left(E_3 + E_4 - E_5 - E_6\right)\left(E_1 + E_4 - E_5 - E_6\right)} \\ T_4 &= \frac{f_7^+ f_5^- f_6^-}{\left(E_4 - E_7\right)\left(E_3 + E_7 - E_5 - E_6\right)\left(E_1 + E_7 - E_5 - E_6\right)} \\ T_5 &= \frac{f_3^- f_7^- \left(f_5^- + f_6^+\right)}{\left(E_4 - E_7\right)\left(E_1 - E_3\right)\left(E_5 + E_6 - E_3 - E_7\right)} \\ T_6 &= \frac{f_1^- f_7^- \left(f_5^- + f_6^+\right)}{\left(E_4 - E_7\right)\left(E_3 - E_1\right)\left(E_5 + E_6 - E_1 - E_7\right)} \\ T_7 &= \frac{f_3^- f_4^- \left(f_5^- + f_6^+\right)}{\left(E_7 - E_4\right)\left(E_1 - E_3\right)\left(E_5 + E_6 - E_3 - E_4\right)} \\ T_8 &= \frac{f_1^- f_4^- \left(f_5^- + f_6^+\right)}{\left(E_7 - E_4\right)\left(E_3 - E_1\right)\left(E_5 + E_6 - E_1 - E_4\right)} \end{aligned} \tag{2.33}$$

2.7 En termes de fonctions

Après avoir généré le diagramme essentiel (EDD) et son facteur de symétrie à l'aide du programme [38], la fonction **initializeLabel** étiquette le diagramme de manière initiale (Fig. 2.4), ensuite la fonction **spanTrees** génère tous les arbres couvrants du diagramme

initialisé. Pendant l'itération de chaque arbre couvrant, les codes suivants s'exécutent

- Choix d'un arbre arbitraire et unique pour générer tous les cycles par la fonction **genCycl**, et ici nous pouvons trouver tous les coefficients des arêtes par la fonction **edgeCoef**.
- La fonction **fraction** extrait le dénominateur et le numérateur de l'arbre couvrant. La fonction **denominator** génère les coupes de chaque arbre couvrant sous forme d'entiers non signés. Chaque dénominateur a la forme $Den = \{d_1, d_2, \ldots, d_{n-1}\}$, où d_i est un entier non signé qui représente les positions des arêtes appropriées du dénominateur, le signe du dénominateur a également la forme $SignDen = \{sd_1, sd_2, \ldots, sd_{n-1}\}$, ici sd_i est un entier non signé représentant les positions des arêtes opposées (nous choisissons uniquement le signe opposé (-) car nous pouvons trouver le signe (+) en appliquant l'opération XOR entre le dénominateur et le signe du dénominateur).
- Enfin, la fonction **numerator** utilise les dénominateurs et les coefficients des arêtes pour générer le numérateur et le signe du numérateur (la position du signe négatif) de chaque arbre couvrant sous forme d'entiers non signés. Chaque numérateur et signe du numérateur a la forme $Num = num_1, num_2, \ldots, num_{n+1}$, $SignNum = sn_1, sn_2, \ldots, sn_{n+1}$ respectivement, où num_i et sn_i sont des entiers non signés représentant les positions des arêtes appropriées dans le numérateur et le signe correspondant (seulement f^- car f^+ peut être trouvé en appliquant l'opération XOR entre le numérateur et le signe du numérateur).

Le programme complet Grand Potential.cpp peut être trouvé sur la page GitHub. https://github.com/tagtog12000/GrandPotential/blob/master/GrandPotential.cpp.

2.8 Méthodologie de calcul du potentiel grandissant pour les diagrammes réductibles et irréductibles

Après l'exécution du programme, l'ordre n du potentiel grandissant est enregistré dans une formule Latex (GrandPotential_n.tex), et également dans des données simples (GrandPotential_n.dat), qui contiennent une liste d'entiers non signés, où chaque diagramme est imprimé comme suit :

$$LR,\ Sym,\ Den_1,\ SignDen_1,\ \{Num_1, \ldots, Num_{k_1}\},\ \{SignNum_1, \ldots, SignNum_{k_1}\},$$
$$\{CoefSignNum_1, \ldots, CoefSignNum_{k_1}\}, \ldots, Den_p,\ SignDen_p,\ \{Num_p, \ldots, Num_{k_p}\},$$
$$\{SignNum_p, \ldots, SignNum_{k_p}\},\ \{CoefSignNum_p, \ldots, CoefSignNum_{k_p}\}$$

Où LR représente les positions des sommets du diagramme, et Sym son facteur de symétrie. Un code simple en Mathematica GrandPotential.nb décompresse les données de GrandPotential_n.dat et les imprime sous forme de formule mathématique $Numerator/Denominator$. Cela permet à quiconque de calculer ce dont il a besoin à partir du potentiel grandissant comme la susceptibilité magnétique ou l'énergie de l'état fondamental. Par exemple, le potentiel grandissant de l'ordre $n = 2$ est donné par

$$\Omega_2 = -\frac{1}{8}V_{3,4}^{1,2}V_{1,2}^{3,4}\frac{f_1^- f_3^- f_4^- - f_1^- f_2^- f_4^+ + f_3^- f_4^- f_2^+ - f_1^- f_2^- f_3^-}{-E_3 - E_4 + E_1 + E_2} + \frac{1}{2}V_{1,4}^{1,2}V_{3,2}^{3,4} f_1^- f_3^- \frac{f_2^- - f_4^-}{-E_2 + E_4} \tag{2.34}$$

Table (3.1) montre les résultats jusqu'à $n = 7$ et le temps total consommé pour trouver toutes ces formules est inférieur à une minute The diagram of Fig .(2.4). (a), is a reducible diagram, using the transform $E_3 = E_1 + h_1$ and $E_7 = E_4 + h_2$, where $h_1 \to 0, h_2 \to 0$, the expression of (2.31) transformed to

$$\{12|V|12\}\{14|V|56\}\{56|V|14\}\{48|V|48\} f_2^- f_8^- \frac{\partial^2}{\partial E_1 \partial E_4}\left(\frac{\left(f_1^- + f_4^+\right) f_5^- f_6^- - \left(f_5^- + f_6^+\right) f_1^- f_4^-}{E_1 + E_4 - E_5 - E_6}\right) \tag{2.35}$$

Le terme entre les crochets de la dérivation dans l'équation (2.32) correspond à la contribution du diagramme irréductible du second ordre.

Astuce 2

De plus, nous pouvons trouver la somme sur tous les ordres de certains types de diagrammes (renormalisation). Par exemple, les diagrammes de type Hugenholtz en échelle (LHTD) (Fig. 2.9) peuvent être évalués à tous les ordres. La somme à tous les ordres des

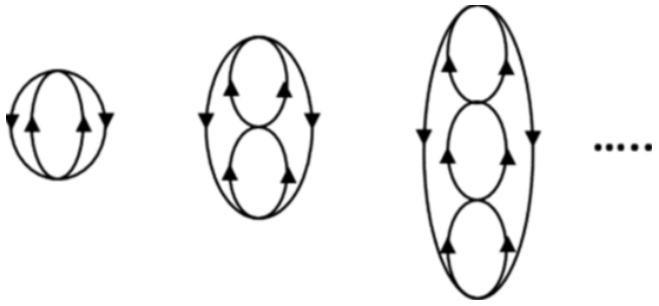


Figure 2.9: Diagrammes de type Hugenholtz en échelle.

LHTD est

$$\Omega^{LHTD} = -\frac{1}{4}V_{3,4}^{1,2}V_{1,2}^{3,4}\frac{f_1^- f_2^- \left(f_3^- + f_3^+\right)}{E_3 + E_4 - E_1 - E_2} + \frac{1}{8}V_{3,4}^{1,2}V_{5,6}^{3,4}V_{1,2}^{5,6}\frac{f_1^- f_2^- \left(f_3^- + f_3^+\right)\left(f_5^- + f_5^+\right)}{\left(E_3 + E_4 - E_1 - E_2\right)\left(E_5 + E_6 - E_1 - E_2\right)} + \ldots \tag{2.36}$$

Ce qui peut être généralisé dans la formule suivante

$$\Omega^{LHTD} = \frac{1}{2}\sum_{n=2}^{\infty} V_{1,2}^{2n-1,2n} f_1^- f_2^- \prod_{j=1}^{n-1} \frac{V_{2j+1,2j+2}^{2j-1,2j} f_{2j+1}^0}{E_1 + E_2 - E_{2j+1} - E_{2j+2}} \tag{2.37}$$

Où $f_k^0 = \left(f_k^- + f_k^+\right)/2$.

2.9 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons abordé les défis théoriques et computationnels liés à la théorie des perturbations à plusieurs corps (TPMC) pour les systèmes quantiques en interaction. Lorsque les solutions exactes sont inaccessibles, cette approche diagrammatique, initiée par Feynman et développée par Brueckner, Hugenholtz et Goldstone, s'impose comme un outil indispensable pour décrire la physique des systèmes à température finie.

Cependant, la complexité combinatoire de la TPMC-TF, notamment due à la croissance exponentielle du nombre de diagrammes, limite son applicabilité pratique. Pour contourner cette difficulté, nous avons présenté une méthode innovante fondée sur la théorie des graphes, permettant d'identifier et d'évaluer efficacement les diagrammes essentiels (EDDs) sans recourir à des comparaisons exhaustives. Cette approche, introduite dans le travail [38], repose sur des algorithmes optimisés pour la génération d'arbres couvrants et l'élimination des redondances topologiques.

Les résultats obtenus démontrent non seulement la faisabilité d'une automatisation complète du calcul du grand potentiel, mais ouvrent également la voie à des applications étendues, comme l'étude des diagrammes en échelle de Hugenholtz ou la renormalisation à tous les ordres. Les outils développés, combinant rigueur mathématique et efficacité computationnelle, offrent ainsi un cadre robuste pour l'analyse des systèmes quantiques complexes.

Cette méthodologie ouvre des perspectives prometteuses pour l'exploration de phénomènes non perturbatifs et la modélisation de matériaux aux propriétés émergentes, tout en soulignant l'importance des approches algorithmiques en physique théorique moderne.

Chapitre 3

Théorie de la perturbation à plusieurs corps à température finie : outils diagrammatiques et stratégies de simplification

3.1 Introduction

Le troisième chapitre de cette thèse est consacré à l'étude de la théorie de la perturbation à plusieurs corps (TPMB) appliquée aux systèmes de particules fortement corrélées à température finie. Ces systèmes, en raison de l'absence de solutions exactes pour la plupart des cas, nécessitent l'usage de méthodes approximatives basées sur une expansion perturbative en puissances du potentiel d'interaction. Cette approche, représentée diagrammatiquement selon le formalisme de Feynman, présente deux défis majeurs : la croissance rapide du nombre de diagrammes avec l'ordre d'expansion, ainsi que la complexité de l'intégration numérique de leurs contributions.

Pour répondre à ces défis, ce chapitre explore plusieurs stratégies de simplification. Notamment, l'utilisation des diagrammes de Hugenholtz permet de regrouper les contributions directes et d'échange, réduisant ainsi le nombre de configurations distinctes à considérer. Cette réduction améliore l'efficacité des algorithmes d'échantillonnage tels que le Monte Carlo diagrammatique.

Le chapitre introduit également des approches récentes qui transforment l'intégration dans l'espace-temps en une intégration purement spatiale, à l'aide d'outils issus de la théorie des graphes et de techniques analytiques comme le théorème des résidus. Ces méthodes permettent une évaluation plus rapide et plus précise du grand potentiel ou de

l'auto-énergie.

Enfin, une attention particulière est portée aux développements en série à haute température (HTS), basés sur le développement en série de Taylor de la fonction de partition. Bien que limitées en ordre, ces méthodes restent puissantes, et leur efficacité s'est accrue grâce aux avancées informatiques récentes.

Ce chapitre constitue ainsi une base théorique et méthodologique essentielle pour les développements numériques et analytiques présentés dans les chapitres suivants.

3.2 Le modèle

L'expression générale de l'hamiltonien d'interaction en seconde quantification est donnée comme suit :

$$H = H_0 + H_I = \sum_p E_p a_p^+ a_p + \frac{1}{4} \sum_{rsml} V_{m,l}^{r,s} a_r^+ a_s^+ a_l a_m \tag{3.1}$$

où l'énergie E_k est la combinaison de l'énergie de quasi-particule ε_k et du potentiel chimique μ :

$$E_k = \varepsilon_k - \mu \tag{3.2}$$

Le potentiel d'interaction $V_{m,l}^{r,s}$ est représenté comme la somme des potentiels directs $\langle rs|V|ml\rangle$ et d'échange $\langle rs|V|lm\rangle$:

$$V_{m,l}^{r,s} = \langle rs|V|ml\rangle + \epsilon\langle rs|V|lm\rangle \tag{3.3}$$

La constante ϵ dans l'équation (3.3) est égale à -1 pour les fermions et +1 pour les bosons. Dans l'hamiltonien Eq. (3.1), a_p^+ et a_p sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation.

L'expansion en série de la fonction de partition grand canonique $Z = \mathrm{Tr}(e^{-\beta H})$ en puissances du potentiel d'interaction peut être définie comme suit :

$$\frac{Z}{Z_0} = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n! 4^n} \prod_{i=1}^{n} V_{m_i,l_i}^{r_i,s_i} \int_0^\beta d\tau_1 ... \int_0^\beta d\tau_n A_n \tag{3.4}$$

où

$$A_n = \langle \hat{O}_\tau \prod_{i=1}^{n} a_{r_i}^+(\tau_i) a_{s_i}^+(\tau_i) a_{l_i}(\tau_i) a_{m_i}(\tau_i) \rangle_0 \tag{3.5}$$

où $a_p^+(\tau) = e^{\tau E_p} a_p^+$ et $a_p(\tau) = e^{\tau E_p} a_p$ sont respectivement les opérateurs de création et d'annihilation dépendant du temps. Les crochets $\langle \hat{A} \rangle = \frac{1}{Z_0} \mathrm{Tr}(\hat{A} e^{-\beta H_0})$ dans l'équa-

tion (3.5) indiquent la moyenne thermique de l'opérateur $\hat{A}$, et $\hat{O}_\tau$ est l'opérateur de mise en ordre temporel.

La méthode standard utilisée pour analyser la moyenne thermique A_n dans l'équation (3.5) est due au théorème de Wick [31]. Les ensembles complets de contractions résultant de cette approche sont représentés sous forme de diagrammes, où les temps imaginaires $\tau_1, \ldots, \tau_n$ sont les sommets de chaque diagramme, tandis que les contractions entre les opérateurs de création $a_r^+(\tau_i)$, $a_s^+(\tau_i)$ et d'annihilation $a_l(\tau_j)$, $a_m(\tau_j)$ sont ses lignes dirigées. Chaque ligne connectée p (contraction) entre deux sommets τ_i et τ_j est définie par le propagateur $g_p(\tau_i - \tau_j)$, qui peut être écrit dans le formalisme de la somme de Matsubara [59] comme suit :

$$g_p(\tau_i - \tau_j) = \frac{1}{\beta} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\zeta_m(\tau_i - \tau_j - \eta)}}{E_p - \zeta_m} \tag{3.6}$$

Où l'infinitésimal $\eta \to 0^+$ a été utilisé pour éviter la singularité lorsque $\tau_i = \tau_j$. Les variables ζ_m sont les fréquences de Matsubara, où $\zeta_m = \frac{i\pi}{\beta}(2m)$ pour les bosons et $\zeta_m = \frac{i\pi}{\beta}(2m+1)$ pour les fermions.

À l'ordre n, le nombre de diagrammes résultant de l'opération de contraction est $(2n)!$, donc leur évaluation devient plus difficile lorsque n augmente. Pour cette raison, nous devons adopter des approches qui nous permettent de traiter ce grand nombre de diagrammes. Nous les résumons dans les étapes suivantes :

a Nous rappelons que la représentation de Hugenholtz, qui est la combinaison des diagrammes de Feynman directs et d'échange dans l'équation (3.3), nous aide à réduire le nombre de diagrammes à l'ordre n de $(2n)!$ à $\frac{(2n)!}{2^n}$.

b Puisque la permutation entre les temps imaginaires $\tau_1, \ldots, \tau_n$ (sommet) dans la série Eq. (3.4) laisse inchangés les résultats intégrés, en pratique, il existe $n!$ diagrammes qui donnent la même valeur. De plus, certains diagrammes restent inchangés (non déformés) S fois sous l'application de toutes les permutations possibles. Le nombre S est appelé facteur de symétrie. Il est donc utile de choisir un seul diagramme standard parmi ses $\frac{n!}{S}$ diagrammes équivalents. Ce diagramme sélectionné est appelé un diagramme essentiellement distinct (EDD) dans [32] ou un diagramme de Hugenholtz non étiqueté dans [28]. Cette étape est cruciale car elle réduit significativement le nombre de diagrammes de $\frac{(2n)!}{2^n}$ à moins de $\frac{(2n)!}{2^n n!}$.

c Traiter uniquement les diagrammes connectés : Cela vient de l'application de la fonction logarithme à la série dans l'équation (3.4), c'est-à-dire, traiter le grand potentiel $\Omega = -\frac{1}{\beta}\log(Z)$ au lieu de Z, puisque toutes les propriétés thermodynamiques existent également dans Ω.

À partir des étapes a, b et c, nous pouvons conclure que le grand potentiel à l'ordre n

peut être écrit comme une somme de Diagrammes Essentiellement Distincts (EDDs). En général, chaque EDD, G_n^i, a $2^n \frac{n!2^n}{S_i}$ diagrammes équivalents, où 2^n provient de la symétrie ordinaire du potentiel $V_{\gamma,\delta}^{\alpha,\beta} = V_{\delta,\gamma}^{\beta,\alpha}$, 2^n résulte de la combinaison dans l'équation (3.3), et $n!$ est la permutation entre les variables $\tau_1, ..., \tau_n$. Notez que le terme $4^n n!$ annule le facteur $\frac{1}{4^n n!}$ dans la série dans l'équation (3.4).

Une autre simplification significative vient de la sélection uniquement des graphiques qui ne contiennent pas les contributions de Hartree-Fock. Cela implique que la contribution sous Hartree-Fock est déjà présente dans n'importe quelle ligne de diagrammes. De plus, nous remplaçons l'énergie par :

$$E_p = \varepsilon_p - \mu - \Sigma_p^{HF}(\beta) \tag{3.7}$$

où $\Sigma_p^{HF}(\beta)$ est l'énergie de Hartree-Fock, qui dépend de l'inverse de la température β. Nous pouvons trouver l'expression de cette énergie en résolvant l'équation intégrale non linéaire suivante :

$$\Sigma_p^{HF}(\beta) = \int V_{p,q}^{p,q} f^-(E_q) dq \tag{3.8}$$

où f^- représente le facteur statistique :

$$f^-(E_p) = \frac{\epsilon}{e^{\beta E_p} - \epsilon} \tag{3.9}$$

Dans le travail [38], un programme spécial a été développé pour trouver tous les diagrammes de vide essentiellement distincts avec leurs facteurs de symétrie à chaque ordre n de la MBPT.

Ce programme résume les étapes a, b et c et nous aide énormément à ne sélectionner que des diagrammes essentiels et à ignorer rapidement les diagrammes équivalents (le temps nécessaire pour générer tous les Diagrammes Essentiellement Distincts d'ordre 10 est inférieur à une minute en utilisant un ordinateur personnel).

Le programme demande à l'utilisateur d'entrer l'ordre n ; ensuite, le code générera une liste de tous les diagrammes $Diag = \{G_n^1, G_n^2, ..., G_n^N\}$ avec une liste de leurs facteurs de symétrie $Sym = \{S_n^1, S_n^2, ..., S_n^N\}$, où chaque diagramme $G_n^i; 1 \leq i \leq N$ est codé comme une liste d'entiers $G_n^i = \{l_1, r_1, l_2, r_2, ..., l_n, r_n\}$. Nous pouvons dessiner le diagramme G_n^i en définissant un groupe de sommets $j; 1 \leq j \leq n$ et en les reliant par des lignes, où chaque sommet j est connecté par deux lignes entrantes (représentées par les entiers $2j-1$ et $2j$) et deux lignes sortantes (représentées par les entiers $2l_j - 1$ et $2r_j$).

La Fig. (3.1) montre un exemple de diagrammes de vide connectés G_n^i avec leurs facteurs de symétrie d'ordre 1, 2, 3 et 4.

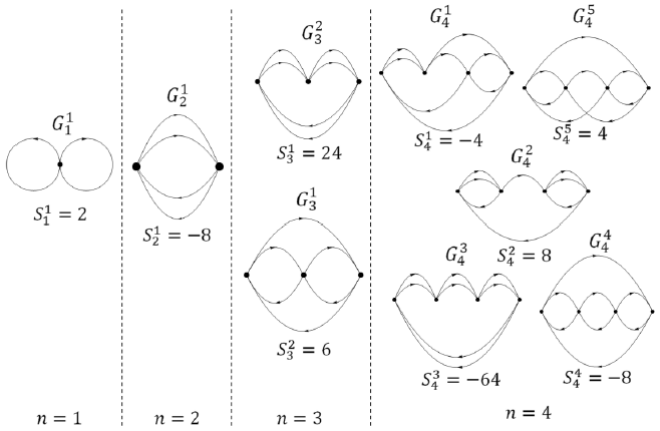


Figure 3.1: Exemple de diagrammes de vide connectés G_n^i avec leurs facteurs de symétrie d'ordre 1, 2, 3 et 4.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N	1	1	2	5	13	59	285	1987	16057	149430

Tableau 3.1: Nombre total N de diagrammes distincts de type Hugenholtz de vide à l'ordre n sans sous-diagrammes de Hartree-Fock.

Le nombre N de diagrammes de Hugenholtz de vide G_n jusqu'à l'ordre 10 est indiqué dans le Tableau(3.1).
Dans ce travail, nous nous concentrons sur la recherche des contributions des diagrammes de Feynman réductibles et irréductibles, en limitant l'étude aux fermions (la constante $\epsilon = -1$ dans l'équation (3.3)). Par conséquent, le grand potentiel peut être décrit comme suit :

$$\Omega = \Omega_0 + \Omega_1 + \sum_{n=2} \Omega_n \tag{3.10}$$

L'ordre zéro Ω_0 est défini par la relation :

$$\Omega_0 = -\frac{1}{\beta} \int \log(1 + \exp(-\beta E_p)) dp \tag{3.11}$$

La contribution générale de Hartree-Fock Ω_1 au grand potentiel peut être déduite de l'équation de Luttinger-Ward du premier ordre [60] comme suit :

$$\Omega_1 = -\mathrm{Tr}(\Sigma_{HF} G) + \Phi_1 \tag{3.12}$$

où Φ_1 est la contribution du diagramme du premier ordre G_1^1 dans la Fig.(3.1) :

$$\Phi_1 = \frac{1}{2}\int\int V_{p,q}^{p,q} f^-(E_p) f^-(E_q) dpdq \tag{3.13}$$

En utilisant les relations (3.8), (3.12) et (3.13), on peut écrire l'expression de Ω_1 comme suit :

$$\Omega_1 = -\frac{1}{2}\int\int V_{p,q}^{p,q} f^-(E_p) f^-(E_q) dpdq \tag{3.14}$$

Notez que $\Omega_n, n \geq 2$, défini dans l'équation (3.10), est le grand potentiel d'ordre n des diagrammes réductibles et irréductibles. Chaque Ω_n contient la contribution de tous les diagrammes essentiellement distincts (EDD) à l'ordre n :

$$\Omega_n = \sum_{i=1}^{N} \Omega_n^i \tag{3.15}$$

Nous pouvons maintenant écrire directement la formule standard de la contribution Ω_n^i du diagramme G_n^i comme suit :

$$\Omega_n^i = \int_{BZ} V_n^i \Omega_n^{G_n^i} Dp \tag{3.16}$$

où V_n^i est la partie potentielle du diagramme G_n^i divisée par son facteur de symétrie S_n^i :

$$V_n^i = \frac{1}{S_n^i} \prod_{j=1}^{n} V_{p_{2j-1},p_{2j}}^{p_{2l_j-1},p_{2r_j}} \tag{3.17}$$

Nous pouvons écrire la contribution $\Omega_n^{G_n^i}$ du diagramme G_n^i sous la forme intégrale suivante :

$$\Omega_n^{G_n^i} = \int_0^\beta d\tau_1 ... \int_0^\beta d\tau_n \prod_{j=1}^{n} g_{p_{2l_j-1}}(\tau_j - \tau_{l_j}) g_{p_{2r_j}}(\tau_j - \tau_{r_j}) \tag{3.18}$$

où le propagateur $g_p(\tau)$ peut être défini sous la forme d'une somme de Matsubara, Eq. (3.6).

L'intégration $\int_{BZ}$ dans l'équation (3.16) porte sur les impulsions $Dp = dp_1 dp_2 ... dp_{2n}$ à l'intérieur de la première zone de Brillouin.

Dans ce travail [61], un algorithme a été développé pour évaluer les sommes de Matsubara basé sur certaines définitions de base en théorie des graphes. Cette méthode permet de formuler la contribution $\Omega_n^{G_n^i}$ de chaque graphe G_n^i en termes de facteurs statistiques f^-, $f^+ = 1 + f^-$, et énergies. Cette méthode s'appelle l'évaluation graphique des sommes de Matsubara.

3.3 Évaluation graphique des sommes de Matsubara

Cette méthode nous aide à calculer la sommation sur les fréquences de Matsubara de tout diagramme de Hugenholtz (ou de Feynman) distinct. Le diagramme de Hugenholtz distinct est un graphe connecté $G(n, 2n)$ avec n sommets et $2n$ arêtes.

Avant de traiter cette méthode, nous mentionnons quelques définitions de base en théorie des graphes :

1 L'arbre couvrant T est un arbre qui inclut tous les sommets de G sans aucun cycle. Les $n-1$ arêtes de cet arbre couvrant sont appelées branches.

2 Le complément d'un arbre couvrant appelé co-arbre T^*. Toutes les $n+1$ arêtes du co-arbre sont appelées cordes.

3 Chaque arête (ligne) du graphe connecté est associée à un coefficient, qui est un nombre entier, $n_i > 0, 1 \leq i \leq 2n$.

Le graphe G contient un grand nombre d'arbres couvrants (dans le pire des cas, le nombre de tous les arbres couvrants dans le diagramme de Hugenholtz $G(n, 2n)$ est 4^{n-1}).

Dans cette méthode, la formule générale de la contribution $\Omega_n^{G_n^i}$ d'un diagramme connecté donné G_n^i au grand potentiel peut être formulée comme suit :

$$\Omega_n^{G_n^i} = \sum_T \frac{N_{T^*}}{D_T} \tag{3.19}$$

La somme $\sum_T$ dans l'équation (3.19) porte sur tous les arbres couvrants. Pour chaque arbre couvrant T, le dénominateur D_T est défini comme suit :

$$D_T = \prod_{i=1}^{n-1} D_i \tag{3.20}$$

où D_i est la contribution de chaque branche i de l'arbre couvrant T :

$$D_i = E_i + \sum E_{c_1} - \sum E_{c_2} \tag{3.21}$$

où E_i est l'énergie de la branche i.

La somme $\sum E_{c_1}(\sum E_{c_2})$ est la somme des énergies des cordes qui sont dans la même direction (direction opposée) que l'énergie de la branche E_i. Ici, $E_i \in T$ et $E_{c_1}, E_{c_2} \in T^*$. En théorie des graphes, l'ensemble des D_i est appelé les coupures fondamentales.

Dans (3.19), le numérateur N_{T^*} représente la contribution du co-arbre T^* et est défini

par la relation suivante :

$$N_{T^*} = \prod_{j=1}^{n+1} f^{[O_j]}(E_j) \tag{3.22}$$

où $f^{[O_j]}(E_j)$ est le facteur statistique de chaque corde j du co-arbre T^* et $E_j \in T^*$, et $[O_j]$ est le signe de l'orientation totale O_j de chaque corde j.

$$[O_j] = -Sign(O_j) = \pm \tag{3.23}$$

où :

$$O_j = n_j + \sum n_{b_1} - \sum n_{b_2} \tag{3.24}$$

La valeur entière positive $n_j > 0$ est le coefficient de la corde j.

La somme $\sum n_{b_1}$ est le nombre total de coefficients des branches rencontrées dans la même direction que n_j, tandis que $\sum n_{b_1}$ est le nombre total de coefficients des branches pointant dans la direction opposée à n_j. Ici, $n_j \in T^*$ et $n_{b_1}, n_{b_2} \in T$.

En théorie des graphes, l'ensemble des O_j est appelé les cycles fondamentaux.

Enfin, les coefficients entiers $n_j > 0$ sont choisis arbitrairement de telle sorte que les orientations totales O_j de tous les cycles du graphe G ne soient pas égales à zéro.

Fig. (3.2) montre un exemple de diagramme de Hugenholtz connecté G avec des sommets $v_i; 1 \leq i \leq 5$ et des arêtes $E_i; 1 \leq i \leq 10$. L'arbre couvrant arbitraire T défini par les branches E_1, E_2, E_3 et E_6 (lignes épaisses) et le co-arbre associé T^* représenté par les cordes E_4, E_5, E_7, E_8, E_9 et E_{10} (lignes minces). La contribution de cet arbre couvrant est la fraction N_{T^*}/D_T, où le dénominateur D_T peut être évalué à partir des coupes fondamentales $D = D_1 D_2 D_3 D_6$ et le numérateur N_{T^*} déterminé à partir des cordes du co-arbre $N_{T^*} = f_4^{[O_4]} f_5^{[O_5]} f_7^{[O_7]} f_8^{[O_8]} f_9^{[O_9]} f_{10}^{[O_{10}]}$. Toutes les coupes sont simplement extraites du graphe : $D_1 = E_1 + E_7 - E_4 - E_{10}$, $D_2 = E_2 + E_4 - E_7 - E_8$, $D_3 = E_3 + E_7 - E_9 - E_{10}$ et $D_6 = E_6 + E_5 - E_7 - E_8$. Les orientations totales O_i peuvent être calculées directement à partir des cycles fondamentaux du graphe qui sont $O_4 = n_4 + n_1 - n_2$, $O_5 = n_5 - n_6$, $O_7 = n_7 + n_6 + n_2 - n_1 - n_3$, $O_8 = n_8 + n_6 + n_2$, $O_9 = n_9 + n_3$ et $O_{10} = n_{10} + n_3 + n_1$.

Les valeurs entières des coefficients des arêtes $n_i > 0$ peuvent être déterminées en trouvant tous les cycles dans le graphe non orienté G.

Pour plus de détails sur l'évaluation graphique des sommes de Matsubara et ses algorithmes, peuvent être vus le travail précédent [61]. Dans (A.1) et (B.1), nous fournissons un exemple détaillé de fonctionnement de cette méthode pour les ordres $n = 2$ et $n = 3$.

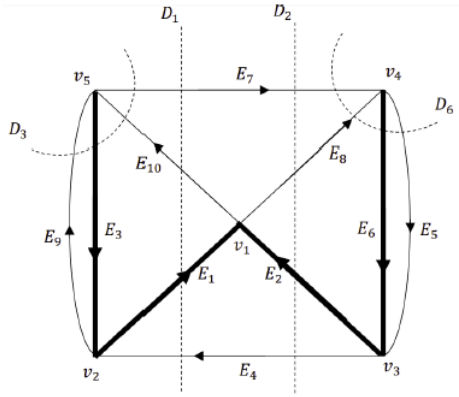


Figure 3.2: Un graphe connecté $G(5, 10)$ avec un exemple d'arbre couvrant T (lignes épaisses) et le co-arbre associé T^* (lignes minces). Les lignes en pointillés représentent les coupes fondamentales.

3.4 Formulation de la contribution du diagramme de Hugenholtz comme différences divisées

Cette section discute de la reformulation de l'expansion dans l'Eq. (3.12) sous forme de différences divisées. Nous montrerons comment cette nouvelle reformulation nous permet de trouver efficacement le développement en série à haute température du potentiel grand canonique.

Avant de passer aux détails de la méthode, reformulons les contributions de deuxième et troisième ordre.

La contribution du diagramme G_2^1 (Fig. (3.1)) au potentiel grand canonique est donnée par la formule (voir A.1) :

$$\Omega_2^{G_2^1} = -\frac{(f^-(x_2)(f^-(x_3)+f^+(x_4))-f^-(x_3)f^-(x_4))f^-(x_1)}{x_1+x_2-x_3-x_4}+\frac{f^+(x_2)f^-(x_3)f^-(x_4)}{x_1+x_2-x_3-x_4} \tag{3.25}$$

où $x_i = E_{p_i}$. En remplaçant le numérateur du deuxième terme dans le CD (Côté Droit) de la relation Eq. (3.17) par l'identité suivante :

$$\frac{f^+(x_2)f^-(x_3)f^-(x_4)}{f^-(-x_2+x_3+x_4)} = f^-(x_2)(f^-(x_3)+f^+(x_4))-f^-(x_3)f^-(x_4) \tag{3.26}$$

Alors la forme de $\Omega_2^{G_2^1}$ peut être réécrite comme suit :

$$\Omega_2^{G_2^1} = -(f^-(x_2)(f^-(x_3)+f^+(x_4))-f^-(x_3)f^-(x_4))f^-[x_1,-x_2+x_3+x_4] \tag{3.27}$$

où la fonction $f^-[x, y]$ est la différence divisée du premier ordre, un outil mathématique

utilisé pour calculer les coefficients dans le polynôme d'interpolation dans la forme de Newton (voir, par exemple, le manuel de [62]). Cette fonction est définie par la fraction suivante :

$$f^{-}[x,y] = \frac{f^{-}(x) - f^{-}(y)}{x - y} \tag{3.28}$$

La relation Eq. (3.19) nous aide à trouver le développement à haute température de Ω_2 car le rapport Eq. (3.20) peut facilement être écrit comme une somme infinie en termes de l'inverse de la température β, c'est-à-dire :

$$f^{-1}[x,y] = -\frac{1}{2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\beta^n}{n!}e_n\sum_{k=0}^{n-1}x^k y^{n-1-k} \tag{3.29}$$

où les coefficients e_n sont les constantes d'Euler :

$$e_n = \frac{\partial^n}{\partial t^n}\left(\frac{2}{1+e^t}\right)_{t=0}; \quad n \geq 1 \tag{3.30}$$

L'expression précédente pour $\Omega_2^{G_2^1}$ dans l'Eq. (3.19) peut être déduite en effectuant la division euclidienne de la fraction $f^{-}(x_1)/(x_1 + x_2 - x_3 - x_4)$ dans la première partie du côté droit de l'Eq. (3.17). Ici, la variable $x_1 == E_{p_1}$ est le diviseur. Dans cette opération de division, seul le quotient est nécessaire, car le reste disparaîtra automatiquement avec la deuxième partie du côté droit de l'Eq. (3.17).

À l'ordre $n = 3$, la contribution $\Omega_3^{G_3^1}$ du diagramme G_3^1 (Fig. (3.1)) est donnée par (voir A.2) :

$$\begin{aligned}\Omega_3^{G_3^1} = &\tfrac{f^{-}(x_5)f^{+}(x_6)(f^{-}(x_2)-f^{-}(x_1))(f^{-}(x_4)-f^{-}(x_3))}{(x_6-x_5-x_2+x_1)(x_6-x_5-x_4+x_3)}\\ &+\tfrac{f^{-}(x_3)f^{+}(x_4)(f^{-}(x_2)-f^{-}(x_1))(f^{-}(x_6)-f^{-}(x_5))}{(x_4-x_3-x_2+x_1)(x_4-x_3-x_6+x_5)}\\ &+\tfrac{f^{-}(x_1)f^{+}(x_2)(f^{-}(x_4)-f^{-}(x_3))(f^{-}(x_6)-f^{-}(x_5))}{(x_2-x_1-x_4+x_3)(x_2-x_1-x_6+x_5)}\end{aligned} \tag{3.31}$$

Pour formuler la contribution dans l'Eq. (3.23) comme une différence divisée, nous sélectionnons l'un de ses arbres couvrants (voir Fig. (3.1)), disons $T_1 = \{E_1, E_3\} == \{x_1, x_3\}$. Nous effectuons maintenant la division euclidienne de la contribution dans l'Eq. (3.23) sur les variables x_1 et ensuite sur x_3 respectivement (ou vice versa). Notez que seul le quotient est nécessaire, car le reste disparaîtra après le processus de division car la contribution dans l'Eq. (3.23) à haute température ne contient aucune fraction.

Le processus de division dans les première et dernière fractions dans l'Eq. (3.23) est simple. Cependant, un défi se pose lorsque nous effectuons la division dans la deuxième fraction car le terme $x_4 - x_3 - x_2 + x_1$ contient la variable x_3 sur laquelle nous effectuerons

le processus de division plus tard. Nous allons donc décomposer cette fraction comme suit :

$$\frac{1}{(x_4-x_3-x_2+x_1)(x_4-x_3-x_6+x_5)} = -\frac{1}{(x_6-x_5-x_2+x_1)(x_6-x_5-x_4+x_3)} - \frac{1}{(x_2-x_1-x_4+x_3)(x_2-x_1-x_6+x_5)} \tag{3.32}$$

Après avoir substitué la décomposition de l'Eq. (3.24) dans l'Eq. (3.23), la contribution $\Omega_3^{G_3^1}$ peut être écrite comme suit :

$$\Omega_3^{G_3^1} = (f^-(x_2)-f^-(x_1))\frac{N_1}{D_1} + (f^-(x_6)-f^-(x_5))\frac{N_2}{D_2} \tag{3.33}$$

où

$$D_1 = (x_1-x_2-x_5+x_6)(x_3-x_4-x_5+x_6) \tag{3.34}$$

$$D_2 = (x_1-x_2-x_3+x_4)(x_1-x_2-x_5+x_6) \tag{3.35}$$

$$N_1 = f^-(x_5)f^+(x_6)(f^-(x_4)-f^-(x_3)) - f^-(x_3)f^+(x_4)(f^-(x_6)-f^-(x_5)) \tag{3.36}$$

$$N_2 = f^-(x_1)(f^+(x_2)(f^-(x_4)-f^-(x_3)) + f^-(x_3)f^+(x_4)) - f^-(x_3)f^+(x_4)f^-(x_2) \tag{3.37}$$

Le dénominateur D_1 dans l'Eq. (3.26) contient les deux variables x_1 et x_3, où x_1 est indépendant de x_3. Ainsi, toute fonction dans le numérateur N_1 qui ne concerne pas ces variables disparaîtra après le processus de division. Par conséquent, la première fraction dans l'Eq. (3.25) peut être transformée en la formule suivante :

$$(f^-(x_2)-f^-(x_1))\frac{N_1}{D_1} \to (f^-(x_5)f^+(x_6)+f^+(x_4)(f^-(x_6)-f^-(x_5))) \times \left(\frac{f^-(x_1)}{x_1-x_2-x_5+x_6}\right)\left(\frac{f^-(x_3)}{x_3-x_4-x_5+x_6}\right) \tag{3.38}$$

Le quotient du numérateur $f^-(x_1)$ par $x_1-x_2-x_5+x_6$ est simplement égal à $\frac{f^-(x_1)-f^-(x_2+x_5-x_6)}{x_1-x_2-x_5+x_6}$, qui est la différence divisée du premier ordre $f^-[x_1, x_2+x_5-x_6]$. De plus, nous avons $\frac{f^-(x_3)}{x_3-x_4-x_5+x_6} = f^-[x_3, x_4+x_5-x_6]$.

Dans le dénominateur D_2 de l'Eq. (3.27), nous voyons que la variable x_1 apparaît deux fois, donc nous devons seulement diviser $f^-(x_1)$ par ses facteurs multipliés dans le numérateur N_2 de l'Eq. (3.27) par D_2 (le deuxième terme de N_2 dans l'Eq. (3.27)

disparaîtra). Par conséquent, le quotient du processus de division sur la fraction $\frac{N_2}{D_2}$ est simplement la différence divisée du deuxième ordre $f^-[x_1, x_2 + x_3 - x_4, x_2 + x_5 - x_6]$ multipliée par le facteur de $f^-(x_1)$ situé dans l'Eq. (3.27).

Le résultat final souhaité pour la contribution $\Omega_3^{G_3^1}$ est alors :

$$\begin{aligned}\Omega_3^{G_3^1} &= G1(x_5, x_6, x_4) f^-[x_1, x_2 + x_5 - x_6] \times f^-[x_3, x_4 + x_5 - x_6] \\ &+ (f^-(x_6) - f^-(x_5)) \times G1(x_3, x_4, x_2) f^-[x_1, x_2 + x_3 - x_4, x_2 + x_5 - x_6]\end{aligned} \tag{3.39}$$

où

$$G1(x, y, z) = f^-(x) f^+(y) + f^+(z)(f^-(y) - f^-(x)) \tag{3.40}$$

Nous pouvons vérifier la validité de l'Eq. (3.29) pour nous assurer qu'elle reproduit la même relation que l'Eq. (3.25) en développant les différences divisées dans l'Eq. (3.29).

De la même manière, nous pouvons réécrire la contribution $\Omega_3^{G_3^2}$ dans l'Eq. (3.13) du diagramme G_3^2 comme suit :

$$\begin{aligned}\Omega_3^{G_3^2} &= G2(x_5, x_6, x_4) f^-[x_1, -x_2 + x_5 + x_6] \times f^-[x_3, -x_4 + x_5 + x_6] \\ &- (f^+(x_6) + f^-(x_5)) \times G2(x_3, x_4, x_2) f^-[x_1, -x_2 + x_3 + x_4, -x_2 + x_5 + x_6]\end{aligned} \tag{3.41}$$

où

$$G2(x, y, z) = f^-(x) f^-(y) - f^-(z)(f^+(y) + f^-(x)) \tag{3.42}$$

En général, nous sélectionnons un arbre couvrant arbitraire $DT = \{E_{s_1}, E_{s_2}, ..., E_{s_{n-1}}\}$ du graphe G_n^i, et nous effectuons la division euclidienne de la contribution Eq. (3.12) par la première corde E_{s_1} de DT. Si le reste n'est toujours pas nul, alors nous continuons le processus de division en divisant ce reste par la deuxième corde E_{s_2} et ainsi de suite jusqu'à ce que le reste soit égal à zéro.

Notez que le processus de division est ordonné par les diviseurs E_{s_1}, puis E_{s_2}, ..., etc. En d'autres termes, il ne doit y avoir aucune discontinuité dans le choix des diviseurs.

Pour donner un sens au processus de division, nous effectuons la décomposition de chaque fraction $\frac{N_T}{D_T}$ de l'Eq. (3.13) en fractions partielles :

$$\frac{N_T}{D_T} = \sum_k \frac{PN_k}{PD_k} \tag{3.43}$$

où chaque dénominateur partiel $PD_k = D_1 D_2 ... D_{n-1}$ doit satisfaire la condition : au moins un D_1 ou plus $D_1, D_2, ..., D_{r_1}$ des dénominateurs $D_j, 1 \leq j \leq n-1$ contient la première branche E_{s_1} de DT, ainsi qu'au moins un D_{r_1+1} ou plus $D_{r_1+1}, D_{r_1+2}, ..., D_{r_1+r_2}$ des dénominateurs restants $n - 1 - r_1$ contient la deuxième branche E_{s_2} de DT, et ainsi

de suite jusqu'à la fin des dénominateurs de PD_k.

En d'autres termes, le dénominateur partiel PD_k doit être écrit comme suit :

$$PD_k = \prod_{l=1}^{r_1} D_l(E_{s_1}) \prod_{l=1}^{r_2} D_l(E_{s_2}) ... \prod_{l=1}^{r_M} D_l(E_{s_M}) \tag{3.44}$$

où $\sum_{j=1}^{M} r_j = n - 1$. L'écriture $D_l(E_{s_m})$ signifie que ce dénominateur contient la branche E_{s_m}.

$$D_l(E_{s_m}) = \pm E_{s_m} + \sum_{j \neq s_1, s_2, ..., s_{m-1}} d_j \tag{3.45}$$

où $\sum_{j \neq s_1, s_2, ..., s_{m-1}} d_j$ est la somme sur les énergies qui ne doivent pas contenir les branches précédentes $E_{s_1}, ...E_{s_{m-1}}$ de DT. Les numérateurs partiels PN_k dans l'Eq. (3.43) sont sélectionnés à partir du numérateur N_T pour confirmer la relation suivante :

$$PN_k = F_k(f^{\pm}) f^{\pm}(E_{s_1}) f^{\pm}(E_{s_2}) ... f^{\pm}(E_{s_M}) \tag{3.46}$$

où $F_k(f^{\pm})$ sont les facteurs de PN_k qui ne dépendent pas de $E_{s_1}, \ldots, E_{s_M}$.

À partir de l'Eq. (3.44) et de l'Eq. (3.46), nous pouvons transformer la fraction $\frac{N_T}{D_T}$ en les formes suivantes :

$$\frac{N_T}{D_T} \rightarrow \sum_k F_k(f^{\pm}) \left(\frac{f^-(E_{s_1})}{\prod_{l=1}^{r_1} D_l(E_{s_1})} \right) ... \left(\frac{f^-(E_{s_M})}{\prod_{l=1}^{r_M} D_l(E_{s_M})} \right) \tag{3.47}$$

Les fractions $\frac{f^-(E_{s_j})}{\prod_{l=1}^{r_j} D_l(E_{s_j})}; 1 \leq j \leq M$ peuvent être écrites sous forme de différences divisées d'ordre r_j. Ensuite, la forme finale de la fraction $\frac{N_T}{D_T}$ est :

$$\frac{N_T}{D_T} = \sum_k F_k(f^{\pm}) \prod_{j=1}^{M} f^-[E_{s_j}, d_1, ..., d_{r_j}] \tag{3.48}$$

où $d_1, ..., d_{r_j}; 1 \leq j \leq M$ sont définis dans l'Eq. (3.48).

Les concepts précédents contribuent à proposer des stratégies algorithmiques de calcul alternatives. Nous appelons cette approche la théorie de la perturbation à plusieurs de corps avec différences divisées (DD-MBPT).

3.5 Procédure algorithmique de la DD-MBPT

En résumé, les étapes algorithmiques pour calculer l'énergie libre à des températures finies et élevées sont illustrées comme suit :

1. Générer tous les diagrammes de type vide de Hugenholtz essentiellement distincts d'ordre n. Dans ce cas, nous utilisons notre algorithme rapide précédent [38]. Ici, le nombre total de sommets N_V et d'arêtes N_E de chaque diagramme généré $G(V, E)$ est respectivement $N_V = n$, et $N_E = 2n$. Les arêtes du diagramme $G(V, E)$ sont étiquetées sous forme d'entiers non signés ;
2. Utiliser la recherche en profondeur d'abord (DFS) pour trouver un arbre couvrant arbitraire $E_{s_1}, E_{s_2}, ..., E_{s_{n-1}}$ du diagramme G, appelé arbre diviseur DT. L'ensemble de DT est arrangé dans l'ordre croissant $s_1 < s_2 < ... < s_{n-1}$;
3. Relabeler les sommets du diagramme G selon l'ordre des sommets rencontrés dans la recherche DFS. Cette étape aide à garantir que chaque sommet v_i du diagramme G est connecté au sommet précédent v_{i-1} ;
4. Représenter chaque arête du diagramme $G(E, V)$ sous forme binaire, c'est-à-dire $E_k = 2^{k-1}$;
5. Sélectionner la première branche s_1 de DT et générer tous les arbres couvrants dont les branches ne contiennent pas s_1, mais avec la condition suivante : si l'arbre couvrant généré contient certaines branches de DT, alors la coupure fondamentale de ces branches doit traverser une ou plusieurs des autres cordes restantes de DT ;
6. Utiliser la décomposition en fractions partielles dans laquelle les ensembles de dénominateurs $D_1, ..., D_{k_1}$ contiennent la branche s_1, et $D_{k_1+1}, ..., D_{k_2}$ contiennent la branche s_2 ou s_1, et ainsi de suite.

Par conséquent, la contribution Ω_n^G du diagramme G peut être écrite comme suit :

$$\Omega_n^G = \sum_r f^{[O_1]}(E_1)...f^{[O_s]}(E_s) \prod_{k=1}^{M} f^{-1}[E_{s_k}, d_1, ..., d_{r_k}] \tag{3.49}$$

Le $\sum_r$ dans l'Eq. (3.48) est la somme sur toutes les fractions résultant du processus des fractions partielles à l'étape (6). Le nombre entier $r_k = n_k - m_k$ est le rang de la branche d'énergie $E_{s_k} \in DT$, où n_k est le nombre de fois où l'énergie E_{s_k} apparaît dans le dénominateur $D = D_1 D_2 ... D_{n-1}$, et m_k est le nombre de fois où E_{s_k} est présente avec l'une des branches précédentes $E_{s_1}, E_{s_2}, ..., E_{s_{k-1}}$ dans le même dénominateur D_i. Tous les rangs r_k satisfont la condition suivante :

$$\sum_{k=1}^{n-1} r_k = n - 1 \tag{3.50}$$

La fonction $f^{-1}[E_{s_k}, d_1, ..., d_{r_k}]$ dans l'Eq. (3.48) est la différence divisée de $f^-(x)$.

La relation récursive de la différence divisée est définie par :

$$f^{-}[e_s] = f^{[O_i]}(e_s) \tag{3.51}$$

$$\begin{aligned} f^{-}[e_s, d_1] &= \frac{f^{-}(e_s) - f^{-}(d_1)}{e_s - d_1} \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\tanh(\frac{\beta}{2}e_s) - \tanh(\frac{\beta}{2}d_1)}{e_s - d_1}\right) \end{aligned} \tag{3.52}$$

Et pour $r \geq 2$:

$$f^{-}[e_s, ..., d_r] = \frac{f^{-}[e_s, d_1, ..., d_{r-1}] - f^{-}[d_1, d_2, ..., d_r]}{e_s - d_r} \tag{3.53}$$

Maintenant, nous pouvons trouver le développement en série à haute température de la différence divisée Eq. (3.42) sous forme d'une somme infinie de l'ordre β directement

$$f^{-}[e_s, ..., d_r] = -\frac{1}{2}\sum_{n=r}^{\infty}\frac{\beta^n}{n!}e_n \sum_{k_0 k_1 ... k_r} e_s^{k_0} d_1^{k_1} ... d_r^{k_r} \tag{3.54}$$

Ici, d_j est le dénominateur D_j sans e_s, c'est-à-dire $d_j = e_s \mp D_j$, où le signe - $(+)$ indique si e_s est dans la même direction (direction opposée) de la branche e_s.

Les coefficients e_n sont les nombres d'Euler définis par la relation Eq. (3.30).

Enfin, les entiers $k_i \geq 0$ sont sélectionnés selon la relation suivante :

$$\sum_{i=0}^{r} k_i = n - r \tag{3.55}$$

Comme nous pouvons le voir, l'application directe de la relation Eq.(3.54) peut évaluer la contribution Eq.(3.49) à haute température très efficacement.

À température finie, la reformulation de la contribution Ω_n^G sous la forme de l'Eq.(3.49) aide à éviter le problème des pôles dans les fractions lors du calcul d'intégrales numériques sur le moment Dp. Dans certains cas, la relation de différence divisée Eq.(3.53) peut être utilisée pour intégrer numériquement et interpoler la contribution Eq.(3.49) de manière récursive.

En appliquant l'algorithme suggéré, nous pouvons formuler n'importe quel ordre souhaité de Ω sous forme de termes de différence divisée. À cette fin, nous fournissons la série de Ω jusqu'à l'ordre 5 dans le matériel supplémentaire.

Un des plus grands avantages de cette méthode est lorsque nous pouvons formuler certains types de diagrammes dans une relation récursive. Pour cette raison, nous avons

constaté que la contribution des diagrammes de type échelle de Hugenholtz $\Omega^{(L)}$ (comme les graphes G_2^1, G_3^1 et G_4^3 dans Fig.(3.1)) et la contribution des diagrammes de type boucle de Hugenholtz (comme les graphes G_3^2 et G_4^4 dans Fig.(3.1)) peuvent être écrites comme suit :

$$\Omega^{LO} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n} \int_P V_n^+ \Omega_n^+ dP_n + \sum_{n=3}^{\infty} \frac{1}{n} \int_P V_n^- \Omega_n^- dP_n \tag{3.56}$$

où la formule générale des potentiels d'échelle V_n^+ et de boucle V_n^- est définie comme

$$V_n^+ = \tfrac{1}{4^n} V_{p_1,p_2}^{p_{2n-1},p_{2n}} \textstyle\prod_{i=1}^{n-1} V_{p_{2i+1},p_{2i+2}}^{p_{2i-1},p_{2i}} \tag{3.57}$$

$$V_n^- = \tfrac{1}{2^{n+1}} V_{p_1,p_{2n}}^{p_{2n-1},p_2} \textstyle\prod_{i=1}^{n-1} V_{p_{2i+1},p_{2i}}^{p_{2i-1},p_{2i+2}} \tag{3.58}$$

La contribution de l'échelle Ω_n^+ et de la boucle Ω_n^- au grand potentiel est généralisée comme suit

$$\Omega_n^{\pm} = \prod_{i=1}^{n} \left(\tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{p_{2i-1}}\right) \pm \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_{p_{2i}}\right) \right) B[x_1^{\pm}, x_2^{\pm}, ..., x_n^{\pm}] \tag{3.59}$$

où la variable $x_i^{\pm}, 1 \leq i \leq n$, est définie sous la forme suivante

$$x_i^{\pm} = E_{p_{2i}} \pm E_{p_{2i-1}} \tag{3.60}$$

La fonction $B[x_1^{\pm}, x_2^{\pm}, ..., x_n^{\pm}]$ dans l'Eq. (3.59) est la différence divisée de la distribution de Bose-Einstein :

$$B(x) = \frac{1}{e^{\beta x} - 1} \tag{3.61}$$

L'intégration dans l'Eq. (3.56) est sur toutes les variables de moment $dP_n = dp_1 dp_2 ... dp_{2n}$.

3.6 Développement en série à haute température du modèle de spin 1/2 Heisenberg XXZ

Le Hamiltonien le plus simple du modèle interactif est la chaîne de spin Heisenberg 1/2. Dans le cas général, le modèle XXZ unidimensionnel en présence d'un champ magnétique externe h peut être écrit comme suit :

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{k=1}^{N} (S_k^+ S_{k+1}^- + S_k^- S_{k+1}^+) - J\Delta \sum_{k=1}^{N} S_k^z S_{k+1}^z - 2h \sum_{k=1}^{N} S_k^z \tag{3.62}$$

où $S_k^{\pm} = S_k^x \pm iS_k^y$. En utilisant la transformation de Jordan-Wigner [63], le Hamiltonien Eq.(3.62) peut être écrit en termes des opérateurs fermioniques c_k et c_k^+. En appliquant la transformée de Fourier à ces opérateurs $c_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{i\frac{2\pi}{N}pka} c_p$ et $c_k^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p e^{-i\frac{2\pi}{N}pka} c_p^+$, le Hamiltonien Eq.(3.62) peut être exprimé sous la même forme que les systèmes à deux corps interactifs Eq. (3.1). Où l'énergie des quasi-particules ε_p et le potentiel $V_{m,l}^{r,s}$ sont écrits comme suit :

$$\varepsilon_p = J\Delta - 2h - J\cos(p) \tag{3.63}$$

$$V_{m,l}^{r,s} = -4J\Delta \sin\left(\frac{s-r}{2}\right) \sin\left(\frac{l-m}{2}\right) \delta_{r+s,m+l} \tag{3.64}$$

où $\delta_{r+s,m+l}$ représente le delta de Kronecker et $p, r, s, m, l \in [-\pi, \pi]$.

En appliquant le potentiel Eq.(3.64) dans l'équation de Hartree-Fock Eq.(3.8), l'énergie Eq. (3.7) peut être formulée comme suit :

$$E_p(\beta) = A(\beta) + B(\beta)\cos(p) \tag{3.65}$$

où :

$$A(\beta) = -2h + \frac{J\Delta}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_q(\beta)\right) dq \tag{3.66}$$

$$B(\beta) = -J - \frac{J\Delta}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \tanh\left(\frac{\beta}{2} E_q(\beta)\right) \cos(q) dq \tag{3.67}$$

Dans le développement en série à haute température, nous supposons que $A(\beta) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i \beta^i$ et $B(\beta) = \sum_{i=0}^{\infty} b_i \beta^i$ et les substituons dans les équations Eq.(3.66) et Eq.(3.67). Ensuite, nous pouvons obtenir les équations qui déterminent les séries $A(\beta)$ et $B(\beta)$ de manière récursive en comparant le même ordre de β dans le côté gauche et droit. Par exemple, nous avons $a_0 = -2h$, $b_0 = -J$, $a_1 = -Jh\Delta$, $b_1 = \frac{\Delta J^2}{4}$,... De cette manière, nous pouvons calculer n'importe quel ordre de l'énergie de Hartree-Fock Eq.(3.65) avec un code simple en Mathematica.

Le développement en série à haute température de l'énergie libre peut être calculé directement à l'aide de l'algorithme décrit dans la section (3.5). Chaque contribution $\Omega_n^{G_i}$ des diagrammes de Hugenholtz G à l'ordre n est un polynôme multivarié des énergies de Hartree-Fock $E_{p_1}, E_{p_2}, ..., E_{p_{2n}}$ et du potentiel $\prod_{i=1}^{n} V_{m_i,l_i}^{r_i,s_i}$. En fait, les variables restantes dans $\Omega_n^{G_i}$ sont $n+1$ parmi $2n$. Cette réduction résulte de l'application du delta de Kronecker $\delta_{r_i+s_i,m_i+l_i}$, mais les méthodes d'intégration traditionnelles ont des difficultés lors de son utilisation pour intégrer l'ensemble des $n+1$ variables dans les domaines $[-\pi, \pi]$. Dans ce cas, nous utilisons la méthode suivante pour simplifier l'intégration.

Nous pouvons écrire l'expression de l'énergie de Hartree-Fock Eq.(3.65) et du potentiel

Eq.(3.64) sous les formes suivantes :

$$E_p = A(\beta) + \frac{B(\beta)}{2}(z_p + z_p^{-1}) \tag{3.68}$$

$$V_{m,l}^{r,s} = J\Delta(z_r - z_s)(z_m - z_l)(z_r z_s z_m z_l)^{-1/2}\delta_{r+s,m+l} \tag{3.69}$$

où $z_k = e^{ik}$.

Après avoir remplacé la relation de Eq.(3.56) et Eq.(3.57) dans l'expression de $\Omega_n^{G_i}$, cette dernière sera un polynôme multivarié en termes de variables $z_{p_1}, z_{p_1}, ..., z_{n+1}$. Lors de l'intégration de $\Omega_n^{G_i}$ sur une variable, disons p_1, il suffit de trouver le coefficient constant a_0 du polynôme $P(z_{p_1}) = \sum_{i=0} a_i z_{p_1}^i$. Bien sûr, ce coefficient contient les autres variables. En d'autres termes :

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} \Omega_n^{G_i}(z_{p_1}, z_{p_2}, ..., z_{p_{n+1}})dp_1 = a_0(z_{p_2}, ..., z_{p_{n+1}}) \tag{3.70}$$

De la même manière, nous répétons la procédure d'intégration Eq.(3.70) sur les autres variables $p_2, \ldots, p_{n+1}$. Cette méthode est plus rapide que l'intégration ordinaire car nous n'avons pas besoin d'expanser l'expression de $\Omega_n^{G_i}$, ce qui prend beaucoup de temps et d'espace.

Enfin, nous avons trouvé le sixième ordre de l'énergie libre à haute température en implémentant l'algorithme ci-dessus et la procédure d'intégration Eq.(3.70) en Mathematica.

$$\begin{aligned}\Omega = &-\frac{\log(2)}{\beta} + \frac{J\Delta}{4} + \beta\left(-\frac{h^2}{2} - \frac{J^2}{32}\left(\Delta^2+2\right)\right) + \frac{J\Delta\beta^2}{2!}\left(\frac{J^2}{32} - \frac{h^2}{2}\right) + \\ &\frac{\beta^3}{3!}\left(\frac{h^4}{2} - \frac{3}{8}\left(\Delta^2-1\right)h^2J^2 + \frac{J^4}{512}\left(\Delta^4+8\Delta^2+6\right)\right) + \\ &\frac{J\Delta\beta^4}{4!}\left(4h^4 - \frac{h^2J^2}{4}\left(\Delta^2-3\right) - \frac{3J^4}{128}\left(\Delta^2+2\right)\right) + \\ &\frac{\beta^5}{3(5!)}\left(-8h^6 + \frac{15h^4J^2}{4}\left(13\Delta^2-4\right) - \frac{15h^2J^4}{32}\left(\Delta^4-2\Delta^2+6\right) - \frac{J^6}{1024}\left(2\Delta^6+36\Delta^4-15\Delta^2+40\right)\right) + \\ &\frac{J\Delta\beta^6}{6!}\left(-68h^6 + \frac{5h^4J^2}{4}\left(40\Delta^2-39\right) - \frac{3h^2J^4}{32}\left(\Delta^4+5\Delta^2+15\right) + \frac{J^6}{1024}\left(34\Delta^4+194\Delta^2+165\right)\right)\end{aligned} \tag{3.71}$$

Le résultat de Eq.(3.70) pour $\Delta = 1$ (chaîne Heisenberg XXX) coïncide entièrement avec les travaux de [64]. Nous remarquons également que les coefficients jusqu'à l'ordre β^3 concordent avec ceux donnés dans [65].

Nous montrons dans la Fig.(3.3) la série simple (PS) de la susceptibilité magnétique

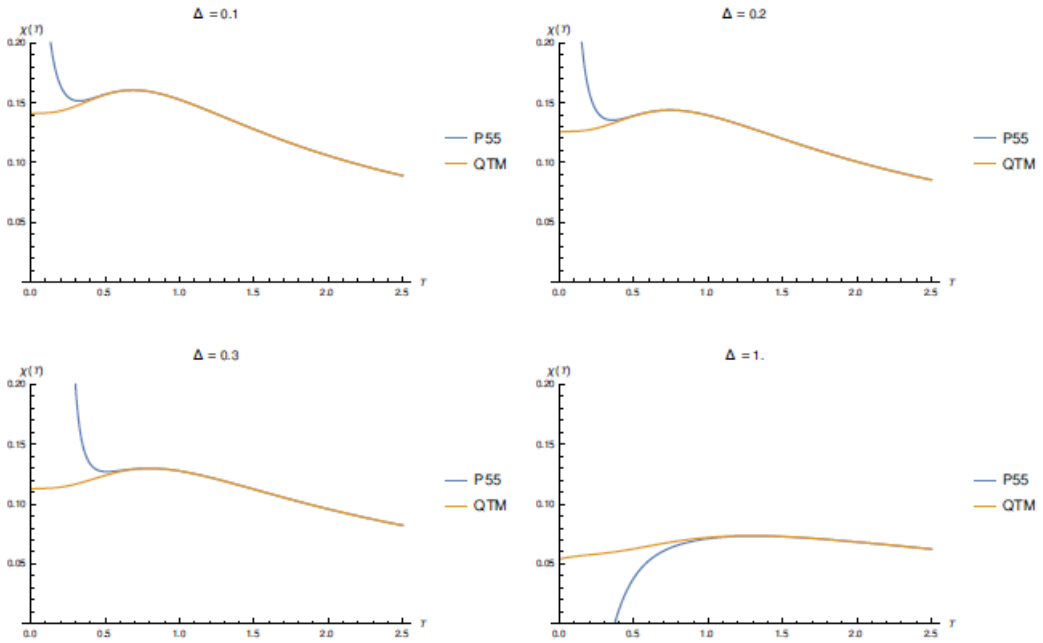


Figure 3.3: Susceptibilité magnétique de la chaîne Heisenberg XXZ pour $\Delta = 0.1$, $\Delta = 0.2$, $\Delta = 0.3$ et $\Delta = 1.0$ à $h = 0$

$\chi = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial h^2}$ à champ magnétique nul jusqu'à l'ordre 10 avec l'application de l'approximation de Padé standard [5,5] (PD55) pour notre PS. Nous comparons la solution numérique de χ obtenue à partir de la méthode exacte QTM (Quantum Transfer Matrix) [66]. De la Fig.(3.3), nous constatons que l'approximation de Padé montre une bonne coïncidence avec les données de QTM. Nous notons également que l'erreur relative entre QTM et PD55 augmente avec l'augmentation des valeurs de Δ, mais PD55 suit la même courbe que QTM .

3.7 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons posé les bases analytiques de la théorie de la perturbation à plusieurs corps à température finie, en mettant en évidence les défis liés au traitement numérique des séries diagrammatiques. L'introduction des représentations de Hugenholtz, des outils issus de la théorie des graphes, et des développements à haute température permet de simplifier significativement les calculs. Ces méthodes seront déterminantes pour l'étude des modèles fortement corrélés dans les chapitres suivants.

Chapitre 4

Modèle de Hubbard à deux dimensions

4.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'application concrète de la théorie de perturbation à plusieurs corps au modèle de Hubbard bidimensionnel à température finie. Après avoir établi les fondements théoriques et méthodologiques dans les chapitres précédents, nous abordons ici une stratégie de calcul systématique des propriétés thermodynamiques, basée sur une manipulation symbolique des diagrammes de Hugenholtz. Cette méthode permet une reformulation efficace des contributions perturbatives à l'aide des différences divisées, réduisant considérablement la complexité numérique. L'objectif principal de ce chapitre est d'extraire, avec précision et rapidité, les coefficients d'expansion du potentiel grand canonique ainsi que d'autres grandeurs physiques pertinentes, telles que la susceptibilité magnétique et la capacité thermique, dans un régime de demi-remplissage. Les résultats obtenus offrent un éclairage nouveau sur les comportements thermodynamiques du système étudié et illustrent la puissance des approches analytiques dans le contexte des systèmes fortement corrélés.

Le hamiltonien grand canonique du modèle de Hubbard en deux dimensions, en présence d'un champ magnétique externe h dirigé selon l'axe z, s'écrit :

$$H = \sum_{p} (\varepsilon_p + h\sigma - \mu) a_p^\dagger a_p + \frac{1}{4} \sum_{p_{1,2,3,4}} V_{p_3,p_4}^{p_1,p_2} a_{p_1}^\dagger a_{p_2}^\dagger a_{p_4} a_{p_3} \tag{4.1}$$

L'énergie des quasi-particules ε_p et le potentiel d'interaction $V_{p_3,p_4}^{p_1,p_2}$ en deux dimensions sont donnés par :

$$\varepsilon_{\boldsymbol{k}\sigma} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) \tag{4.2}$$

$$V_{p_3,p_4}^{p_1,p_2} = U(\delta_{\sigma_1\sigma_3}\delta_{\sigma_2\sigma_4} - \delta_{\sigma_1\sigma_4}\delta_{\sigma_2\sigma_3})\delta_{\boldsymbol{k_1}+\boldsymbol{k_2},\boldsymbol{k_3}+\boldsymbol{k_4}} \tag{4.3}$$

Les indices p_i (pour $i = 1, 2, 3, 4$) représentent l'impulsion $\boldsymbol{k_i}$ et le spin $\sigma_i = \{\uparrow, \downarrow\}$, c'est-à-dire $p_i = (\boldsymbol{k_i}, \sigma_i)$, et en deux dimensions $\boldsymbol{k_i} = (k_{i,x}, k_{i,y})$. Les opérateurs $a_p^\dagger$ et a_p satisfont les relations d'anticommutation $\{a_i^\dagger, a_j\} = \delta_{i,j}$. Ici, μ désigne le potentiel chimique. De plus, le potentiel d'interaction $V_{p_3,p_4}^{p_1,p_2}$ dans l'équation (4.3) comprend des contributions provenant à la fois des termes directs et d'échange.

Les propriétés thermodynamiques de ce système à température finie peuvent être déterminées en évaluant le potentiel grand canonique Ω, lequel est formulé comme une somme de contributions provenant des diagrammes de Hugenholtz du vide [61, 67] :

$$\Omega = \Omega_{HF} + \sum_{n=2}^{\infty} \Omega_n \tag{4.4}$$

où la contribution de Hartree-Fock Ω_{HF} est la somme des diagrammes en têtard. La contribution d'ordre n, notée Ω_n, est la somme des contributions de l'ensemble des N diagrammes du vide réductibles générés à l'ordre n.

$$\Omega_n = \sum_{i=1}^{N} \Omega_n^i \tag{4.5}$$

Ici, Ω_n^i représente la contribution du i-ième diagramme de Hugenholtz à l'ordre n.

Déterminer le nombre de diagrammes N à l'ordre n est une tâche difficile en raison de la croissance factorielle du nombre de diagrammes avec l'augmentation de n. Cependant, plusieurs algorithmes ont été développés pour relever ce défi. Parmi eux, l'algorithme EDHD [38] se distingue particulièrement par sa rapidité, car il permet de générer les diagrammes irréductibles ainsi que leurs facteurs de symétrie S en moins de deux minutes à l'ordre 10, sur un ordinateur domestique standard. Cet algorithme élimine efficacement les diagrammes déconnectés, ignore les diagrammes en têtard, et ne génère que des diagrammes distincts (c'est-à-dire sans équivalents).

Il est important de souligner que ces diagrammes sont produits dans la représentation de Hugenholtz, laquelle peut être développée en 2^n diagrammes de Feynman à l'ordre n.

Une fois tous les diagrammes distincts générés, l'étape suivante consiste à calculer les intégrales sur les temps imaginaires. Par souci de simplicité, le processus commence par la contribution la plus directe, le terme de Hartree-Fock Ω_{HF}. Celui-ci s'exprime comme la somme du terme d'ordre zéro Ω_0 et du terme d'ordre un Ω_1 dans le développement en série du potentiel grand canonique :

$$\begin{aligned}\Omega_{HF} = &-\frac{1}{\beta}\sum_{\sigma}\int \log[1+\exp(-\beta E_{\boldsymbol{k}\sigma})]\, d\boldsymbol{k} \\ &-\frac{1}{2}\sum_{\sigma_1,\sigma_2}\iint V^{p_1,p_2}_{p_1,p_2} f^-(E_{\boldsymbol{k_1}\sigma_1}) f^-(E_{\boldsymbol{k_2}\sigma_2}) d\boldsymbol{k_1} d\boldsymbol{k_2}\end{aligned} \tag{4.6}$$

où $p_i = (\boldsymbol{k_i}\sigma_i)$, et $\beta = \frac{1}{k_B T}$ désigne l'inverse de la température, avec k_B la constante de Boltzmann et T la température absolue.

Le facteur statistique $f^-(E)$ représente la distribution de Fermi-Dirac $f_{FD}(E) = \frac{1}{1+\exp(\beta E)}$ multipliée par un signe négatif, c'est-à-dire $f^-(E) = -f_{FD}(E)$. Cette fonction décrit la densité de probabilité qu'un état d'énergie E soit occupé par une particule. En revanche, $f^+(E) = f^-(E) + 1$ représente la densité de probabilité que ce même état d'énergie E soit occupé par un trou :

$$f^{\mp}(E_p) = \frac{\mp 1}{1+\exp(\pm\beta E_p)} \tag{4.7}$$

L'énergie de Hartree-Fock $E_{\boldsymbol{k}\sigma}$ est la somme de toutes les contributions provenant des diagrammes de self-énergie en boucle de type "têtard" (tadpole), et peut être simplifiée sous la forme de l'équation intégrale non linéaire suivante :

$$E_{\boldsymbol{k}\sigma} = \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + h\sigma - \mu + \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow}\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\boldsymbol{k'}}{(2\pi)^2} \frac{V^{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k'}\sigma'}_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k'}\sigma'}}{1+\exp(\beta E_{\boldsymbol{k'}\sigma'})} \tag{4.8}$$

En substituant $V^{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k'}\sigma'}_{\boldsymbol{k}\sigma,\boldsymbol{k'}\sigma'}$ par sa définition donnée dans l'Équation (4.3) et en sommant sur les spins σ', l'énergie de Hartree-Fock peut s'exprimer comme suit :

$$E_{\boldsymbol{k}\sigma} = \varepsilon_{\boldsymbol{k}} + h\sigma - \mu + U\langle n_{\bar{\sigma}}\rangle \tag{4.9}$$

où $\bar{\downarrow} = \uparrow$ et $\bar{\uparrow} = \downarrow$.

Les diagrammes restants incluent cette énergie dans leurs lignes de propagateur après résolution de l'énergie de Hartree-Fock. L'évaluation des intégrales sur le temps imaginaire

pour les contributions Ω_n^i constitue un défi majeur, nécessitant souvent l'utilisation de techniques d'intégration par contour [68–70]. L'approche introduite dans [61] propose une méthode systématique pour calculer Ω_n^i, en s'appuyant sur des algorithmes élémentaires issus de la théorie des graphes afin de traiter la complexité de la théorie des perturbations à plusieurs corps à température finie.

Cette technique examine les diagrammes G_n^i, qui sont composés de n sommets et de $2n$ arêtes. Ces arêtes sont associées à un ensemble d'énergies $\{E_1, E_2, \ldots, E_{2n}\}$ et à des entiers positifs $\{\eta_1, \eta_2, \ldots, \eta_{2n}\}$, appelés coefficients des arêtes.

Dans de tels diagrammes, il est possible de générer un ensemble d'arbres couvrants. Chaque arbre couvrant, représenté par $T(n, n-1)$, contient tous les n sommets et $n-1$ arêtes de G_n^i, appelées branches. La condition principale pour ces branches est qu'elles ne doivent former aucun cycle.

Une fois qu'un arbre couvrant $T(n, n-1)$ est construit, les $n+1$ arêtes restantes du diagramme G_n^i, appelées cordes, forment une structure complémentaire notée $T^*(n, n+1)$. Cette représentation duale permet de décomposer le diagramme en deux sous-structures interconnectées : l'arbre couvrant et ses cordes complémentaires.

En utilisant cette méthode, la contribution Ω_n^i peut être exprimée de manière systématique en fonction de ces arbres couvrants et de leurs cordes complémentaires. Cette approche simplifie non seulement l'analyse de G_n^i, mais elle fournit également une voie claire pour le calcul des contributions diagrammatiques en exploitant les propriétés topologiques des arbres et des cordes. Un tel cadre est particulièrement avantageux pour réduire la complexité computationnelle et améliorer la compréhension des mécanismes physiques sous-jacents.

La contribution obtenue Ω_n^i peut désormais s'exprimer sous la forme suivante :

$$\Omega_n^i = \frac{U^n}{S_n^i} \sum_T \frac{\prod_{j=1}^{n+1} f^{\mathrm{Sign}\left(\eta_j + \sum_{r_1} \eta_{r_1} - \sum_{r_2} \eta_{r_2}\right)}(E_{b_j})}{\prod_{j=1}^{n-1} \left(E_{s_j} + \sum_{r_1} E_{r_1} - \sum_{r_2} E_{r_2}\right)} \tag{4.10}$$

où S_n^i est le facteur de symétrie du diagramme i, et la sommation $\sum_T$ est effectuée sur tous les arbres couvrants T du diagramme $G_n^i(n, 2n)$.

Dans chaque arbre couvrant T, les énergies E_{s_j} (avec $1 \leq j \leq n-1$) qui apparaissent au dénominateur de l'Équation (4.10) correspondent aux branches de T. En revanche, les énergies E_{b_j} (avec $1 \leq j \leq n+1$) figurant au numérateur de l'Équation (4.10) représentent les cordes de l'arbre complémentaire T^*.

Le terme $\sum_{r_1} E_{r_1} \left(\sum_{r_2} E_{r_2}\right)$ représente l'énergie totale traversant la coupure fondamentale associée à la branche E_{s_j}. Cette énergie peut circuler dans le même sens ou dans

le sens opposé à celui de E_{s_j}.

Par ailleurs, η_j, $\sum_{r_1}\eta_{r_1}$, et $\sum_{r_2}\eta_{r_2}$ désignent les coefficients des arêtes du cycle fondamental. Ici, $\sum_{r_1}\eta_{r_1}$ représente le coefficient total des branches rencontrées dans le même sens que η_j, tandis que $\sum_{r_2}\eta_{r_2}$ correspond au coefficient total des branches orientées dans le sens opposé à η_j.

La quantité $O_j = \eta_j + \sum_{r_1}\eta_{r_1} - \sum_{r_2}\eta_{r_2}$ est appelée l'orientation totale du cycle. Le terme Sign($[O_j]$) dans l'exposant de $f^{\mathrm{Sign}(O_j)}$ indique son signe.

Dans la Fig. (4.1), nous présentons un exemple illustratif du déroulement essentiel de l'algorithme. Les coupures fondamentales définissent le dénominateur dans la contribution de l'arbre couvrant T_1, avec les expressions suivantes : $D_1 = E_1 + E_{11} - E_{10} - E_{12}$,$D_2 = E_2 + E_7 - E_5 - E_{10}$,$D_3 = E_3 + E_6 + E_7 - E_5 - E_9 - E_{11}$,$D_4 = E_4 + E_6 - E_9 - E_{12}$ and $D_8 = E_8 + E_7 - E_9 - E_{11}$. La contribution totale de ces coupures est donnée par : $D_{T_1} = D_1D_2D_3D_4D_8$. En revanche, les cycles fondamentaux associés à T_1 peuvent également être générés et utilisés pour définir les orientations totales. Dans cet exemple, ils sont : $O_5 = \eta_5 + \eta_3 + \eta_2$, $O_6 = \eta_6 - \eta_4 - \eta_3$, $O_7 = \eta_7 - \eta_2 - \eta_3 - \eta_8$, $O_9 = \eta_9 + \eta_8 + \eta_3 + \eta_4$, $O_{10} = \eta_{10} + \eta_1 + \eta_2$, $O_{11} = \eta_{11} + \eta_8 + \eta_3 - \eta_1$ et $O_{12} = \eta_{12} + \eta_1 + \eta_4$. Le numérateur déduit de T_1 est :$N_{T_1} = f_5^{O_5} f_6^{O_6} f_7^{O_7} f_9^{O_9} f_{10}^{O_{10}} f_{11}^{O_{11}} f_{12}^{O_{12}}$. Finalement, la contribution de l'arbre couvrant T_1 est : $\Omega_{T_1} = \frac{N_{T_1}}{D_{T_1}}$ .La même technique est utilisée pour déterminer les contributions des autres arbres couvrants T_2, T_3, ..., T_{n_s}. La contribution du graphe G est la somme de toutes ces contributions d'arbres couvrants : $\Omega_{G_1} = \sum_{i=1}^{n_s}\Omega_{T_i}$. Les valeurs entières $\eta_i > 0$ (qui ne sont pas nécessairement uniques) peuvent être obtenues en énumérant tous les cycles du graphe G, sous la condition que les orientations totales de ces cycles ne soient pas nulles, c'est-à-dire $O_i \neq 0$.

Comme on l'observe dans l'Éq. (4.10), le défi d'intégrer à la fois sur l'espace et le temps a été simplifié en une intégration sur l'espace uniquement. Cependant, le calcul des intégrales correspondant à la contribution décrite dans l'Éq. (4.10) pour chaque arbre couvrant individuellement peut entraîner l'apparition de pôles dans les dénominateurs, ce qui complique davantage le problème.

Par exemple, lorsque le dénominateur dans la contribution d'un arbre couvrant s'annule au cours de l'intégration (c'est-à-dire lorsque $\prod_{j=1}^{n-1}\left(E_{s_j} + \sum_{r_1}E_{r_1} - \sum_{r_2}E_{r_2}\right) = 0$), des instabilités numériques apparaissent dans les résultats. Ces instabilités deviennent de plus en plus sévères aux ordres élevés de la théorie à plusieurs corps.

Pour relever ce défi, nous avons récemment développé un algorithme innovant [67] qui contourne efficacement ces problèmes. L'idée clé consiste à reformuler l'Éq. (4.10) en utilisant les différences divisées, ce qui garantit la stabilité de l'intégration. Considérons la différence divisée d'ordre un : $f[x,y] = \frac{f(x)-f(y)}{x-y}$. Lorsque $x = y$, nous utilisons le

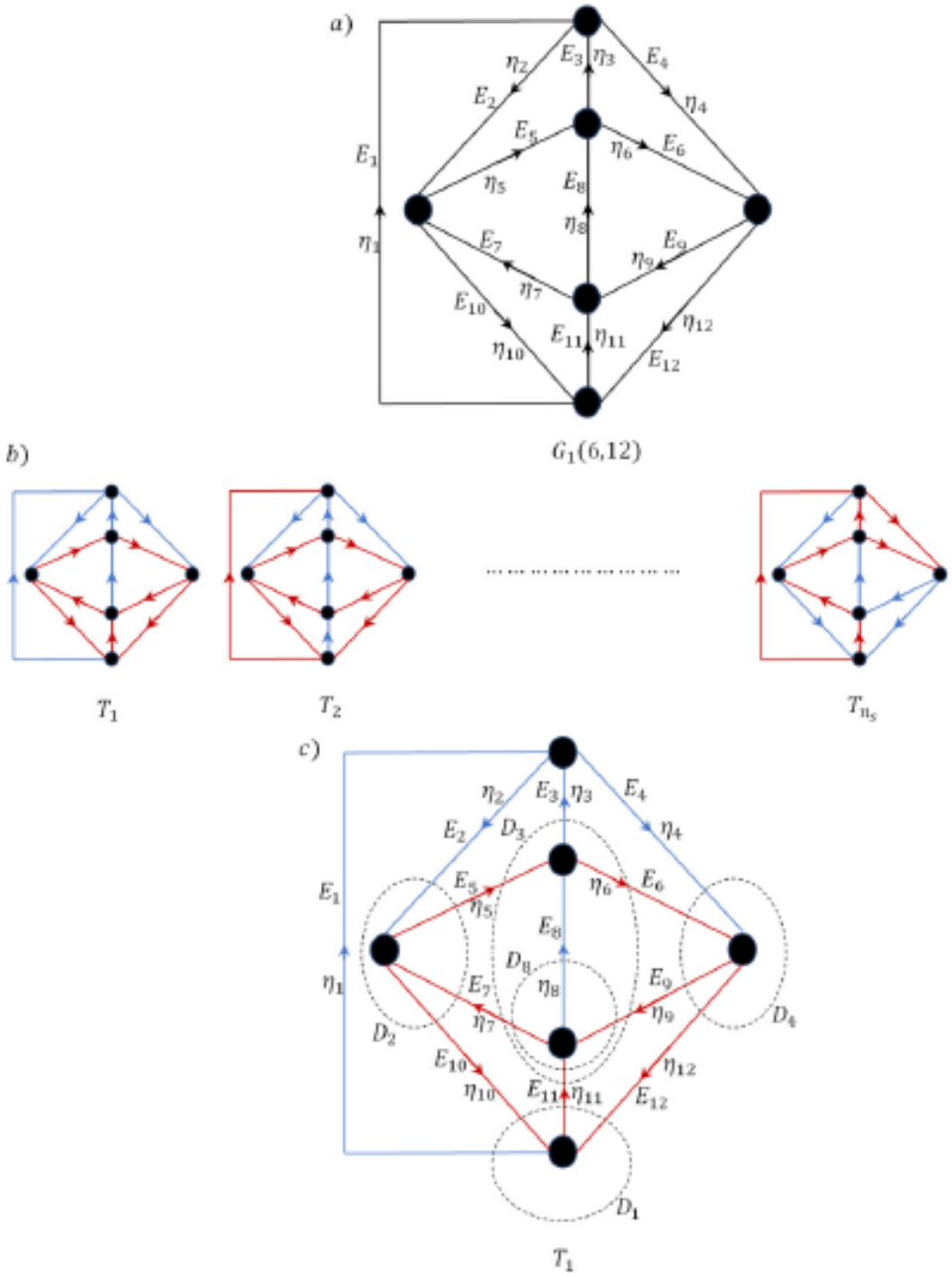


Figure 4.1: Exemple de déroulement pour un diagramme de Hugenholtz dans le vide. (a) Le graphe G correspond à un diagramme de Hugenholtz dans le vide comportant 6 sommets et 12 arêtes, noté $G(6, 12)$. Chaque arête i de G est caractérisée par deux paramètres fondamentaux : l'énergie E_i et le coefficient d'arête η_i. (b) L'ensemble des arbres couvrants du graphe $G(6, 10)$ (lignes bleues, appelées branches) avec leurs co-arbres associés (lignes rouges, appelées cordes), où n_s est le nombre d'arbres couvrants générés. (c) Les coupures fondamentales de l'arbre couvrant T_1 sont représentées par des cercles en pointillés. (D_1, D_2, D_3, D_4, and D_8)

cas limite : $\lim_{x\to y} f[x,y] = \left.\frac{df}{dx}\right|_{x=y}$, ce qui transforme l'expression problématique en une évaluation bien définie de la dérivée.

Cette approche présente trois avantages majeurs :

1. Elle régularise automatiquement les singularités de pôle.
2. Elle génère des intégrandes plus lisses, facilitant ainsi un calcul numérique plus fiable.
3. Elle permet une génération efficace d'expressions analytiques pour les développements en haute température des contributions des diagrammes de vide, comme nous le démontrons dans la section suivante.

La forme générale de cette contribution stabilisée peut s'exprimer comme :

$$\Omega_n^i = \frac{U^n}{S_n^i} \sum_{j=1}^{N_D} D_j \tag{4.11}$$

où N_D désigne le nombre de différences divisées, et chaque D_j est donné par la forme suivante :

$$D_j = \int \prod_{i=1}^{r} f^-[E_{p_{m_i}}, d_{i,1}^j, \ldots, d_{i,m_i}^j] \prod_{i=r+1}^{n+1} f^{\pm}[E_{p_i}] Dp \tag{4.12}$$

Dans cette équation, $f^-[x_1, x_2, \ldots, x_k]$ représente la différence divisée (voir A.1) de la distribution de Fermi-Dirac.

Les énergies $E_{p_{m_i}}$ correspondent aux branches de l'arbre couvrant sélectionné, tandis que $d_{i,r}^j$ (pour $1 \le r \le m_i$) est défini comme :

$$d_{i,r}^j - E_{p_{m_i},} = \sum_{l\in S_{\text{in}}} E_{p_l} - \sum_{l\in S_{\text{out}}} E_{p_l} \tag{4.13}$$

Les indices d'énergie du membre de droite dans l'Éq. (4.13) sont déterminés par la conservation de l'impulsion :

$$\sum_{l\in S_{\text{in}}} k_l = \sum_{l\in S_{\text{out}}} k_l \tag{4.14}$$

Ici, S_{in} et S_{out} représentent respectivement les cordes entrantes et sortantes. La valeur de m_i est choisie selon la condition suivante :

$$\sum_{i=1}^{r} m_i = n-1; \quad 1 \le m_1 \le m_2 \ldots \le m_r \le n-1 \tag{4.15}$$

L'intégrale dans l'Éq. (4.12) inclut à la fois l'intégration sur l'impulsion et la sommation

sur le spin :

$$\int Dp == \sum_{s_1,\ldots,s_{n+1}=\uparrow\downarrow} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\mathbf{k}_1 d\mathbf{k}_2 \ldots d\mathbf{k}_{n+1}}{(2\pi)^{2(n+1)}} \tag{4.16}$$

4.2 Développements en série à haute température

Tout d'abord, en partant de l'énergie de Hartree-Fock de l'Éq. (4.9), cette énergie peut être réécrite sous la forme suivante :

$$E_{\boldsymbol{k}\sigma} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) + A_\sigma \tag{4.17}$$

Où $A_\sigma = h\sigma - \mu + U\langle n_{\bar{\sigma}}\rangle$.

L'amplitude A_σ est une fonction de β, et à haute température, elle peut être exprimée sous la forme d'une série :

$$A_\sigma = \sum_{i=0}^{\infty} a_{i,\sigma}\beta^i \tag{4.18}$$

Les valeurs initiales peuvent être déterminées en substituant $\langle n_{\bar{\sigma}}(\beta = 0)\rangle = \frac{1}{2}$. Donc :

$$a_{0,\sigma} = h\sigma - \mu + \frac{U}{2} \tag{4.19}$$

Nous pouvons maintenant trouver les coefficients $a_{i,\sigma}$ en substituant le polynôme de l'Éq. (4.18) dans l'expression de l'énergie de l'Éq. (4.17), puis en remplaçant cette énergie dans $\langle n_{\bar{\sigma}}\rangle$ et en appliquant le développement en série de Maclaurin de cette fonction. Enfin, nous comparons les coefficients ordre par ordre. De cette manière, nous pouvons déterminer tout ordre souhaité de A_σ. Pour validation, nous fournissons les quatre premiers ordres :

$$A_\sigma = a_{0,\sigma} - \frac{1}{4}\beta U a_{0,\bar{\sigma}} + \frac{1}{16}\beta^2 U^2 a_{0,\sigma} - \frac{1}{192}\beta^3 U a_{0,\bar{\sigma}}\left(-48t^2 + 3U^2 - 4a_{0,\bar{\sigma}}^2\right) + \ldots \tag{4.20}$$

Nous pouvons maintenant calculer la contribution du terme de Hartree-Fock, Ω_{HF}, en substituant $E_{\boldsymbol{k},\sigma}$ dans l'Éq. (4.6).

Le processus de calcul des contributions Ω_n, $n \geq 2$, est facilité par notre code symbolique Mathematica (DD-MBPT) [67]. Ce code est conçu pour générer automatiquement l'expression analytique de la contribution de chaque diagramme de Hugenholtz sous forme de différence divisée, englobant ainsi tous les processus décrits dans la section précédente.

La reformulation de la différence divisée est applicable à tout modèle d'interaction à deux corps, qu'il soit fermionique ou bosonique. Dans cette approche, nous générons d'abord les diagrammes de Hugenholtz du vide $G(n, 2n)$ (avec n sommets et $2n$ arêtes

associées), ainsi que leurs facteurs de symétrie. Cela peut être réalisé dans des temps de calcul raisonnables (par exemple, ne dépassant pas deux minutes pour $n = 10$).

L'étape suivante consiste à générer des arbres couvrants pour chaque diagramme du vide. Cela nous permet d'évaluer directement la contribution de chaque diagramme du vide et d'exprimer les résultats analytiques sous forme fractionnaire. La dernière étape consiste à reformuler ces fractions en différences divisées, ce qui adoucit les contributions avant de réaliser les intégrations spatiales.

Puisque ces étapes sont universelles pour tout modèle de Hamiltonien à deux corps, nous recommandons de les pré-évaluer et de rendre les résultats facilement accessibles aux lecteurs.

La version précédente de DD-MBPT était limitée au sixième ordre ; dans ce travail, nous l'étendons également pour couvrir le septième ordre de MBPT. Chaque contribution générée de l'ordre $n \geq 2$ est enregistrée sous forme de données texte, où les données sont encodées sous forme d'entiers non signés représentant les potentiels et énergies appropriés des différences divisées. Le code est disponible sur notre page GitHub [71]. Des ordres supérieurs au septième dans MBPT sont également disponibles ; cependant, en raison de la grande taille des données (environ 10 Go pour le huitième ordre), nous ne pouvons pas les télécharger sur le dépôt GitHub. Ces données peuvent être fournies sur demande raisonnable. Le programme utilisé pour générer ces données est en développement afin d'améliorer la faisabilité et d'accélérer la génération des données.

Après avoir généré Ω_n, nous calculons les intégrales sur le moment $\boldsymbol{k}_i$ et la somme sur les spins s_i. Ces calculs peuvent être effectués à une température donnée en utilisant des méthodes d'intégration numérique, telles que les algorithmes de Monte Carlo ou des algorithmes de quadrature comme la quadrature de Gauss-Kronrod. Ce dernier est adapté en raison de la régularité des formules de différences divisées. Étant donné le temps de calcul important nécessaire pour évaluer ces intégrales, ce travail se concentre sur l'utilisation de l'expansion à haute température (HTS).

Les formes de différence divisée peuvent être directement développées dans le cadre HTS en utilisant l'identité donnée par l'équation (B.4). Nous fournissons les détails concernant la génération et le calcul des intégrales d'ordre supérieur Ω_2 dans (B.1), cet exemple étant applicable à d'autres contributions jusqu'à l'ordre sept de la MBPT $O(U^8)$.

4.3 Séries haute température exactes pour le modèle de Hubbard 2D : applications aux observables thermodynamiques

Pour automatiser le processus de calcul, nous avons développé un code Mathematica conçu pour générer le HTS pour le modèle de Hubbard bidimensionnel. Ce code, disponible sur notre page GitHub [72], peut produire des résultats analytiques pour le HTS jusqu'à n'importe quel ordre souhaité en termes de β, mais est limité à l'ordre sept en U. En utilisant ce code, l'expression exacte de la série analytique pour le potentiel grand jusqu'à l'ordre huit à la fois en U et β est :

$$\begin{aligned}
\Omega = &-\frac{\log(4)}{\beta}+\frac{c_1}{2}-\frac{U}{4}-\beta\left(\frac{c_1^2+8t^2}{8}+\frac{U^2}{32}\right)+\frac{1}{16}\beta^2c_2U \\
&+\beta^3\left(\frac{c_1^4+24c_1^2t^2+72t^4}{192}+\frac{t^2U^2}{24}+\frac{U^4}{3072}\right)-\beta^4c_2U\left(\frac{c_1^2+24t^2}{192}+\frac{U^2}{768}\right) \\
&-\beta^5\left(\frac{c_1^6+60c_1^4t^2+540c_1^2t^4+800t^6}{2880}+\frac{\left(-15c_2^2+20c_1^2t^2+492t^4\right)U^2}{7680}+\frac{t^2U^4}{640}\right. \\
&\left.+\frac{U^6}{184320}\right)+\beta^6c_2U\left(\frac{2880t^4+300c_1^2t^2+6c_1^4+5c_2^2}{11520}+\frac{\left(360t^2+5c_1^2\right)U^2}{46080}\right. \\
&\left.+\frac{U^4}{30720}\right)+\beta^7\left(\frac{17\left(11200c_1^2t^6+2520c_1^4t^4+112c_1^6t^2+c_1^8+9800t^8\right)}{645120}\right. \\
&+\frac{\left(140\left(c_1^4-30c_2^2\right)t^2-105c_1^2c_2^2+3696c_1^2t^4+32320t^6\right)U^2}{322560} \\
&\left.+\frac{\left(-35c_2^2+28c_1^2t^2+2108t^4\right)U^4}{430080}+\frac{17t^2U^6}{322560}+\frac{17U^8}{165150720}\right) \\
&+\beta^8c_2U\left(\frac{-155680t^6-30660c_1^2t^4-28\left(57c_1^4+40c_2^2\right)t^2-c_1^2\left(17c_1^4-3c_2^2\right)}{322560}\right. \\
&\left.+\frac{\left(-58380t^4-2520c_1^2t^2-7\left(3c_1^4-20c_2^2\right)\right)U^2}{1935360}+\frac{\left(-952t^2-7c_1^2\right)U^4}{2580480}-\frac{17U^6}{20643840}\right)
\end{aligned} \tag{4.21}$$

où c_1^p et c_2^p sont définis comme suit :

$$\begin{aligned}
c_1^p &= a_{0,\uparrow}^p + a_{0,\downarrow}^p \\
c_2^p &= \left(a_{0,\uparrow}a_{0,\downarrow}\right)^p
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Les constantes $a_{0,\sigma}$ sont définies dans l'équation (4.19).

Les coefficients dans l'expansion en U et β de Ω restent exacts pour toutes les valeurs

données des paramètres (t, U, μ, et h).

L'expression de l'équation (B.6) sert de base polyvalente pour la détermination des quantités thermodynamiques à l'équilibre thermique dans le régime de haute température. Sa nature exacte garantit la précision sur une large gamme de paramètres physiques, la rendant adaptée à l'analyse du système dans divers cas limites. Les propriétés de convergence de l'expansion en β sont particulièrement avantageuses pour l'étude des systèmes où les méthodes numériques directes peuvent rencontrer des difficultés en raison de la sensibilité aux paramètres.

Dans ce qui suit, nous nous concentrons sur trois quantités physiques : l'énergie : $E = \frac{\partial}{\partial\beta}(\beta\Omega)$, la capacité calorifique, $C_v = -\beta\frac{\partial}{\partial\beta}\left(\beta^2\frac{\partial\Omega}{\partial\beta}\right)$ et la susceptibilité magnétique $\chi = -\left(\frac{\partial^2\Omega}{\partial h^2}\right)_{h=0}$. Ces quantités fournissent des informations essentielles sur les propriétés thermiques et magnétiques du système, établissant une connexion directe entre les prédictions théoriques et les observables expérimentales.

Nous commençons par examiner la convergence de la série donnée par l'équation (4.2) entre deux termes successifs d'ordre supérieur, $O(U^7)$ et $O(U^8)$. La Fig. (4.2) illustre le comportement de la convergence de l'énergie E à demi-remplissage pour différentes intensités d'interaction U. Comme le montrent les sous-figures Fig. (4.2) (a) et Fig. (4.2) (b), l'erreur maximale de troncature est de l'ordre de 10^{-7} pour $U = 1$ et 10^{-4} pour $U = 2$. Pour des intensités d'interaction plus grandes ($U = 3, 4, 5$), l'erreur augmente, comme le montre la sous-figure Fig. (4.2) (c). Cependant, cette erreur diminue considérablement pour des températures $T > 1$, confirmant ainsi la convergence de la série de l'équation (4.21) jusqu'à $O(U^8)$. De plus, la sous-figure Fig. (4.2) (d) montre que l'expansion supplémentaire en β^{-1} peut encore réduire l'erreur.

Fig. (4.3), montre l'énergie par site en fonction de T pour différentes valeurs de $U = 2, 4, 8$ avec $t = 1$, en utilisant le (HTS) Eq. (B.6) et approximé par la méthode de Padé. Pour valider ces résultats, nous incluons également les données de Monte Carlo quantique (QMC) issues de [73, 74], qui montrent un excellent accord pour $T > 0.6$. Les écarts observés pour $T < 0.6$ sont dus aux limitations de l'expansion en série à basses températures. Pour résoudre ce problème, nous avons étendu la série jusqu'au 13^{me} ordre en température à demi-remplissage (voir B.3) et jusqu'au 4^{me} ordre en U. La Fig. 4.2d présente les résultats améliorés pour $U = 2$, qui montrent un accord nettement meilleur avec les données QMC de [73].

La capacité calorifique et la susceptibilité magnétique par site pour $U = 2$ et $U = 4$ à demi-remplissage et $t = 1$ sont montrées dans les Figs. (4.3, 4.4), et (4.5). Des données de QMC [73, 74] et de la méthode Lanczos à température finie (FTLM) [75] sont fournies pour comparaison. Comme le montre la figure, il y a un excellent accord entre les données

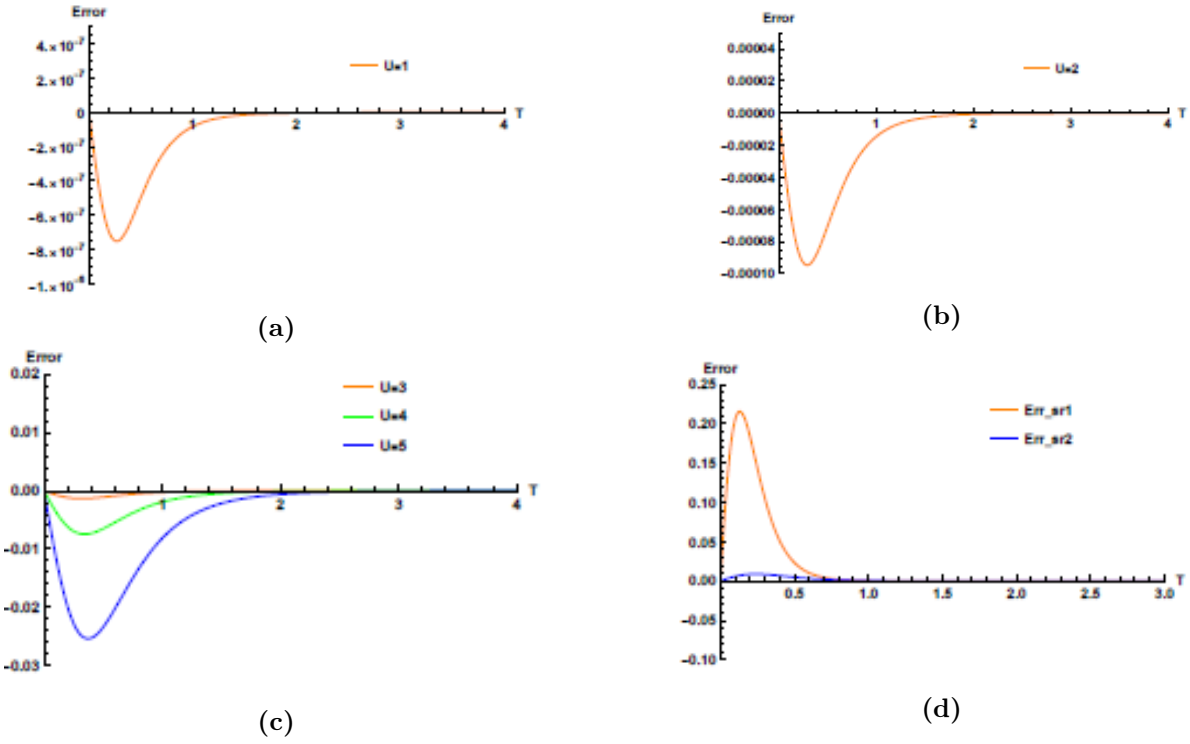


Figure 4.2: La différence entre deux ordres successifs pour l'approximation de Padé de l'énergie à demi-remplissage et $t = 1$. (a), (b) et (c) La différence entre l'ordre huit de la théorie à plusieurs corps $O(\beta^8, U^8)$ et l'ordre sept $O(\beta^8, U^7)$ pour différentes valeurs de U. (d) La différence entre l'ordre quatre de la théorie à plusieurs corps $O(\beta^8, U^4)$ et l'ordre deux $O(\beta^8, U^2)$ (courbe orange) de la série de l'équation(4.21), alo(d) La différence entre l'ordre quatre de la théorie à plusieurs corps $O(\beta^8, U^4)$ et l'ordre deux $O(\beta^8, U^2)$ (courbe orange) de la série de l'équation, ainsi qu'une comparaison avec la différence entre les ordres $O(\beta^{13}, U^4)$ et $O(\beta^{13}, U^2)$ (courbe bleue) de la série. (B.3) pour $U = 1$

HTS et QMC pour $T > 0.75$. Pour obtenir une plus grande précision, la série dans la Fig.(4.4) est étendue aux ordres $O(\beta^{13}, U^4)$ (voir B.3). Cette amélioration garantit que la série conserve sa précision dans les régions où les corrections dépendant de la température deviennent significatives.

Comme observé, l'énergie, la capacité calorifique et la susceptibilité magnétique sont qualitativement en accord avec les données obtenues à partir des simulations QMC ou FTLM. Cela confirme non seulement que nous sommes sur la bonne voie pour optimiser cette méthode, mais montre également que des expansions plus approfondies conduisent à un meilleur accord. De plus, notre méthode ouvre la voie au développement d'algorithmes rapides pour étendre la série en termes de température, permettant ainsi d'obtenir des résultats plus précis qui sont indépendants des simulations QMC ou de taille finie.

Il convient de noter que l'obtention de la série dans l'équation (4.21) prend environ cinq

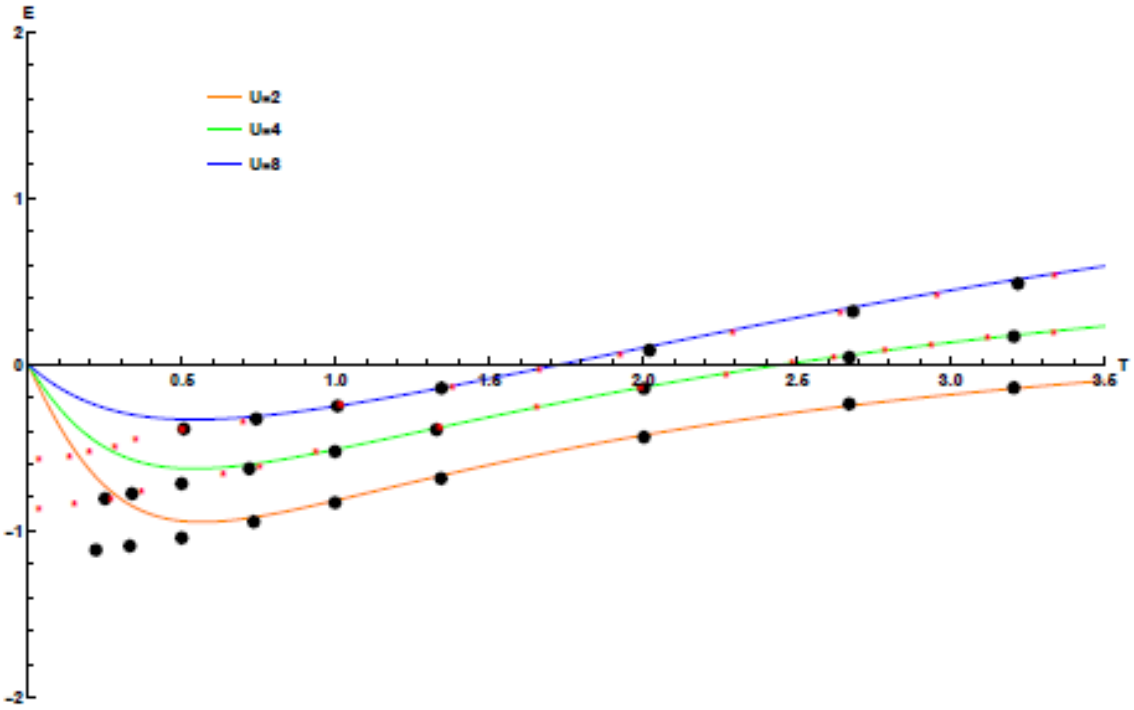


Figure 4.3: L'énergie E à demi-remplissage et $t = 1$ en fonction de la température pour $U = 2$, $U = 4$, et $U = 8$. Les lignes pleines représentent l'approximation de Padé de la série dans l'équation (B.6)
Les cercles pleins et les étoiles rouges indiquent les données de Monte Carlo issues de [73] et [74], respectivement.

minutes, tandis que la génération de la série dans (B.3) à demi-remplissage prend environ trois minutes sur un ordinateur domestique standard (Intel i7 3.4 GHz, 8 Go de RAM) sans optimisation par multiprocesseur. Cela démontre l'efficacité de notre approche, même sur du matériel modeste.

4.4 Comparaison avec d'autres méthodes

Nous comparons notre méthode avec des approches qui calculent directement les grandeurs d'intérêt dans la limite thermodynamique, telles que le Monte Carlo diagrammatique (DiagMC) [76–81]. Entre 1998 et 2017, cette méthode a connu des améliorations limitées. Bien que des efforts aient été faits pour améliorer l'échantillonnage Monte Carlo et réduire le problème de signe fermionique [82], les ordres de perturbation réalisables pour le modèle de Hubbard sont restés contraints à environ 6 ou 7. Une avancée significative a eu lieu en 2017 avec l'introduction de l'algorithme Connected Determinant Diagrammatic Monte Carlo (CDet) [83], qui a ravivé l'intérêt pour les approches diagrammatiques. Notre comparaison se concentre spécifiquement sur cette méthode.

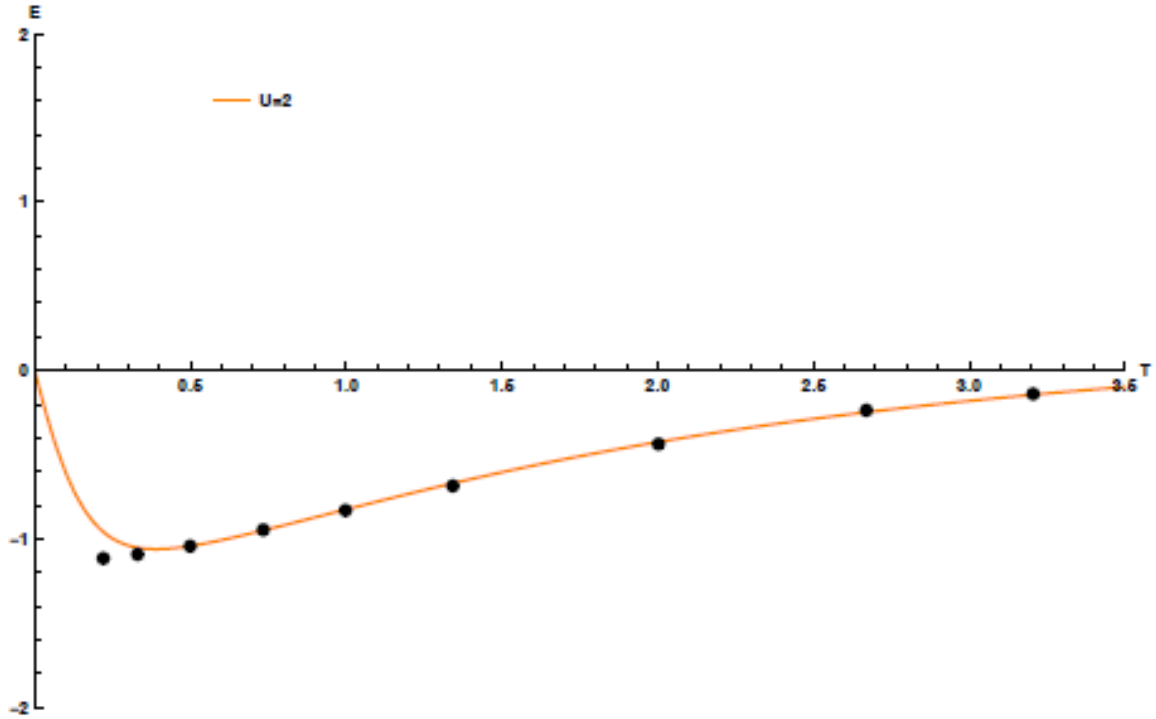


Figure 4.4: L'énergie E à demi-remplissage en fonction de la température pour $t = 1$ et $U = 2$. La ligne pleine représente l'approximation de Padé de la série dans (B.3), tandis que les cercles pleins indiquent les données de Monte Carlo.

La méthode CDet présente plusieurs avantages clés par rapport aux approches conventionnelles de DiagMC. Tout d'abord, sa complexité de calcul totale pour l'évaluation de tous les déterminants évolue selon $O(3^n)$ [84], où n est l'ordre à plusieurs corps (le nombre de sommets). Bien que cela reste exponentiel, cela représente une amélioration substantielle par rapport aux méthodes classiques de DiagMC. De plus, CDet réduit la sévérité du problème de signe fermionique, qui passe d'une échelle factorielle (comme dans le DiagMC naïf) à une échelle exponentielle dans les systèmes fermioniques. En outre, en opérant directement dans la limite thermodynamique, CDet évite les problèmes de mise à l'échelle de la taille finie qui sont inhérents à des techniques apparentées comme le Monte Carlo Diagrammatique Déterminant (DDMC). [85–87].

Cependant, la méthode CDet partage des limitations communes aux méthodes de Monte Carlo quantique (QMC). Plus particulièrement, elle souffre toujours du problème de signe fermionique lorsqu'elle est appliquée à des systèmes avec des interactions répulsives fortes, comme le modèle de Hubbard à grand U/t. Le coût computationnel évolue selon $O(k^3 2^k)$ $(1 \leq k \leq 2n)$ [84] par mise à jour, rendant les expansions de haut ordre prohibitives d'un point de vue computationnel. Même avec des optimisations, la simulation de systèmes à haute dimension ou à bandes multiples reste gourmande en ressources -

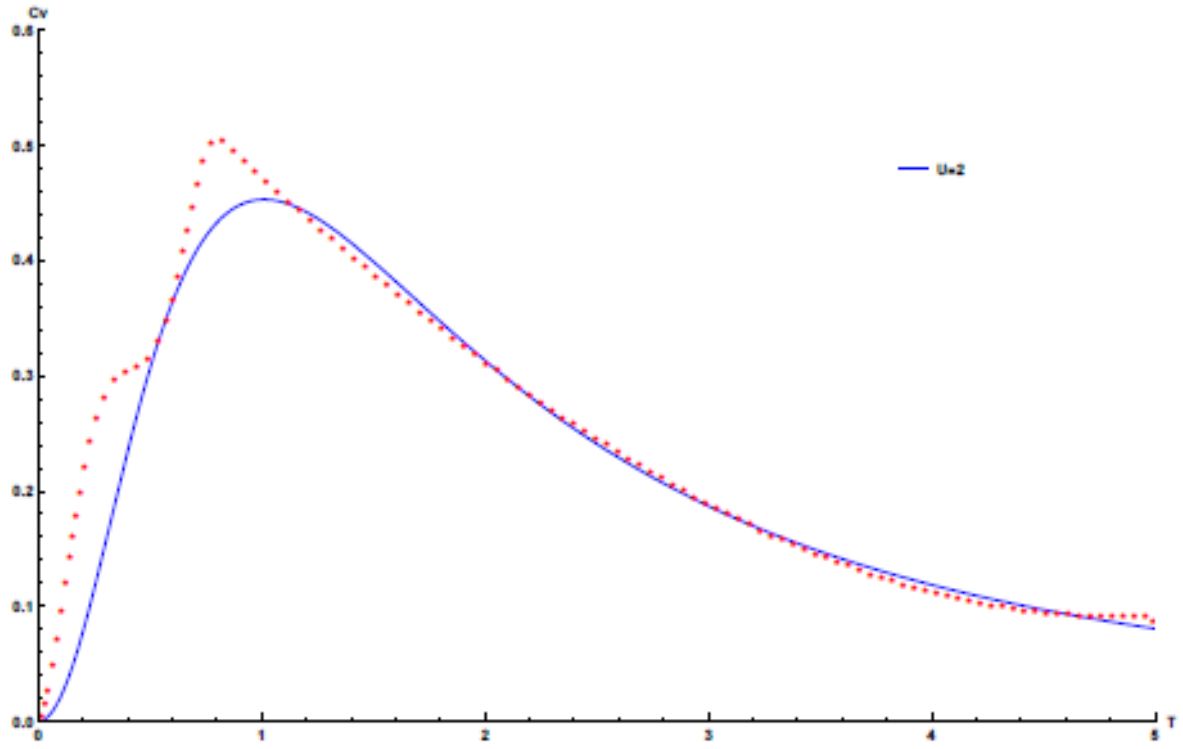


Figure 4.5: La capacité calorifique C_v à demi-remplissage en fonction de la température pour $t = 1$ et $U = 2$. La ligne pleine représente l'approximation de Padé de la série dans l'équation (B.6)

,tandis que les étoiles rouges indiquent les données de Monte Carlo issues de [74].

par exemple, atteindre l'ordre $n = 11$ pour $\beta = 8$ nécessite environ 7000 heures CPU [83]. En tant que méthode stochastique, la précision de CDet est fondamentalement limitée, en particulier à basse température où les incertitudes statistiques deviennent plus significatives.

En revanche, notre approche utilise des méthodes algébriques pour filtrer les diagrammes Hugenholtz connectés distincts (en excluant les configurations équivalentes), ainsi que leurs facteurs de symétrie, tandis que CDet élimine uniquement les diagrammes déconnectés. Nous calculons les contributions en temps imaginaire avec une complexité d'environ $O(3^n)$, puis reformulons ces contributions en différences divisées. Cette reformulation lisse les contributions des diagrammes de vide et permet uniquement une intégration spatiale via un échantillonnage Monte Carlo ou des méthodes déterministes telles que la quadrature de Gauss-Kronrod [88] ou la décomposition en tenseur [89]. De plus, notre algorithme est une méthode basée sur l'algèbre, ce qui en fait une application utile pour générer des expressions analytiques des grandeurs thermodynamiques à haute température, comme nous l'avons vu dans ce travail, et permet également une intégration récursive de certains types de diagrammes [90]. Bien que notre méthode atteigne une

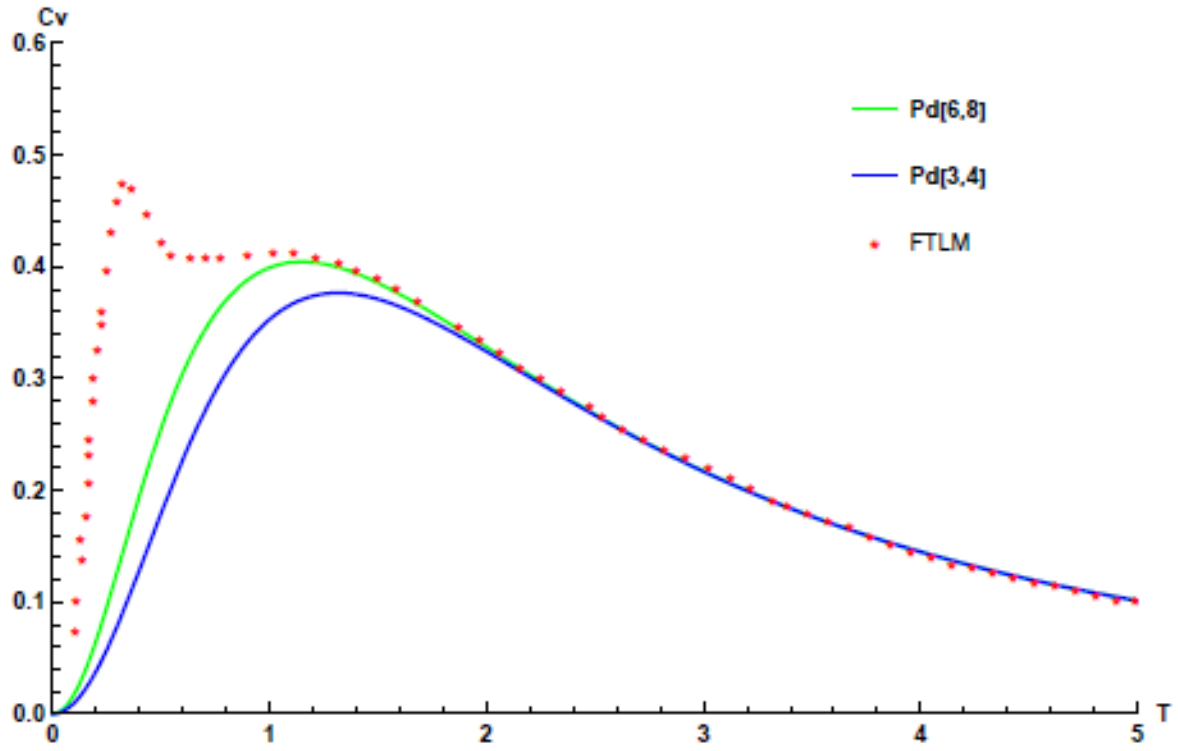


Figure 4.6: La capacité calorifique C_v à demi-remplissage en fonction de la température pour $t = 1$ et $U = 4$. La ligne bleue pleine représente l'approximation de Padé de la série dans l'équation (4.21), tandis que la ligne verte montre l'approximation de Padé de la série améliorée dans (B.3). Les étoiles rouges indiquent les données FTLM .

précision supérieure, elle reste à échelle factorielle par rapport à l'échelle exponentielle de CDet. Cependant, cette approche est encore en développement. Nous prévoyons qu'en combinant l'efficacité de CDet avec la précision de notre méthode, cela conduira à des avancées significatives dans la résolution des problèmes d'électrons fortement corrélés.

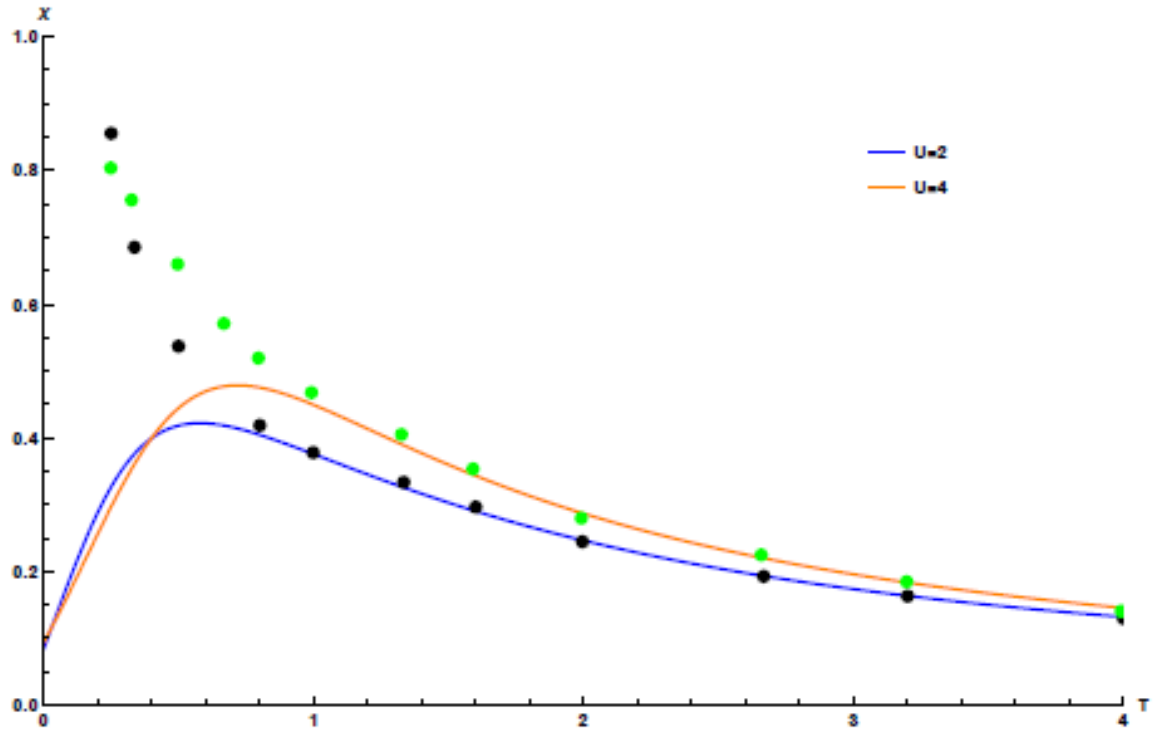


Figure 4.7: La susceptibilité magnétique χ à demi-remplissage et $t = 1$ en fonction de la température pour $U = 2$ et $U = 4$. Les lignes pleines représentent l'approximation de Padé de la série dans l'équation (B.6)

, tandis que les cercles pleins sont les données de Monte Carlo issues de [73]

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons exploré le comportement à haute température du modèle de Hubbard bidimensionnel en utilisant la théorie des perturbations à plusieurs corps basée sur les différences divisées. En dérivant systématiquement les développements en séries pour le potentiel grand en huitième ordre dans U et β, nous avons démontré l'efficacité de notre approche symbolique pour calculer des grandeurs thermodynamiques telles que l'énergie, la capacité calorifique et la susceptibilité magnétique. Nos résultats ont montré un excellent accord avec les données de Monte Carlo quantique (QMC) et de la méthode Lanczos à température finie (FTLM) pour des températures $T > 0.75$, validant la précision et la fiabilité de notre méthode.

L'efficacité computationnelle de notre approche, illustrée par les temps de calcul courts sur un ordinateur standard à domicile, souligne son potentiel pour s'adapter à des ordres plus élevés ou des modèles plus complexes.

En regardant vers l'avenir, ce travail ouvre la voie à la conception d'algorithmes plus rapides pour étendre encore les séries et améliorer la précision. De telles avancées pourraient positionner notre méthode comme une alternative viable aux approches stochas-

tiques telles que le QMC, en particulier pour relever les défis liés aux systèmes à taille finie et d'autres modèles fortement corrélés.

Nos résultats mettent en évidence le potentiel des méthodes symboliques pour faire avancer l'étude théorique des systèmes fortement corrélés. Nous anticipons que ces techniques joueront un rôle important dans le développement de cadres computationnels efficaces pour la physique de la matière condensée.

Conclusion générale

Dans cette thèse, nous avons exploré plusieurs aspects clés de la physique théorique, en particulier à travers le formalisme de la seconde quantification et l'étude des systèmes interactifs en deux dimensions. Nous avons d'abord revisité les principes de la seconde quantification, en nous appuyant sur la formulation hamiltonienne et les opérateurs de création et d'annihilation, ce qui nous a permis de développer un modèle de Hubbard bidimensionnel décrivant les interactions entre particules locales et non locales. Ce modèle, formulé dans le cadre de la seconde quantification, a servi de base pour des analyses approfondies, notamment dans le régime des expansions à haute température.

Ensuite, nous avons exploité la théorie de la turbulence multi-corps à haute température pour déterminer les contributions des diagrammes de Feynman et de Hugenholtz à l'énergie libre. Notre approche a intégré des algorithmes issus de la théorie des graphes, essentiels pour identifier les arbres couvrants, les anneaux fondamentaux et les cycles totaux dans des diagrammes complexes. Ces outils ont systématisé le calcul des corrections perturbatives, particulièrement pertinentes pour les systèmes fortement corrélés.

Enfin, nous avons appliqué ces développements théoriques au modèle de Hubbard en deux dimensions, en calculant l'énergie libre jusqu'au huitième ordre dans le développement à haute température. Pour y parvenir, nous avons utilisé des techniques de différenciation avancées ainsi que la division euclidienne des polynômes. Nos résultats, inédits, mettent en évidence des comportements nouveaux dans la propagation de l'énergie libre, notamment dans le régime de diffusion dominante, offrant ainsi des références utiles pour de futures recherches.

Les méthodes élaborées dans ce travail ouvrent des perspectives prometteuses, comme l'extension de nos résultats à des géométries tridimensionnelles ou à des réseaux désordonnés. L'intégration d'algorithmes d'apprentissage machine pourrait également optimiser les calculs de diagrammes, tandis que nos approches pourraient éclairer la physique des matériaux quantiques, tels que les supraconducteurs à haute température. En conclusion, cette thèse contribue à une meilleure compréhension des systèmes quantiques interactifs et fournit des outils théoriques et numériques solides pour les recherches futures.

Bibliographie

[1] David J Griffiths and Darrell Schroeter. *Instructor's Solutions Manual : Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson education, 2005.

[2] Claude Cohen Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Laloë. *Mécanique quantique*. Hermann, 1973.

[3] Alexander L Fetter and John Dirk Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. Courier Corporation, 2012.

[4] Gerald D Mahan. *Many-particle physics*. Springer Science & Business Media, 2013.

[5] Alekseevich, Lev Petrovich Gorkov, and Igor Ekhielevich Dzyaloshinski. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. Courier Corporation, 2012.

[6] Francesco Scazza, Matteo Zaccanti, Pietro Massignan, Meera M Parish, and Jesper Levinsen. Repulsive fermi and bose polarons in quantum gases. *Atoms*, 10(2) :55, 2022.

[7] AN Rubtsov, MI Katsnelson, and AI Lichtenstein. Dual fermion approach to nonlocal correlations in the hubbard model. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 77(3) :033101, 2008.

[8] Kris Van Houcke, Félix Werner, Evgeny Kozik, Nikolay Prokof'ev, Boris Svistunov, MJH Ku, AT Sommer, LW Cheuk, Andre Schirotzek, and MW Zwierlein. Feynman diagrams versus fermi-gas feynman emulator. *Nature Physics*, 8(5) :366–370, 2012.

[9] NM Hugenholtz. Perturbation theory of large quantum systems. *Physica*, 23(1-5) :481–532, 1957.

[10] Anthony J Guttmann. Asymptotic analysis of power-series expansions. *Phase transitions and critical phenomena*, 13 :3, 1989.

[11] Jaan Oitmaa, Chris Hamer, and Weihong Zheng. *Series expansion methods for strongly interacting lattice models*. Cambridge University Press, 2006.

[12] FF Assaad and HG Evertz. World-line and determinantal quantum monte carlo methods for spins, phonons and electrons. In *Computational Many-Particle Physics*, pages 277–356. Springer, 2008.

[13] Miguel M. Oliveira, Pedro Ribeiro, and Stefan Kirchner. Efficient quantum information probes of nonequilibrium quantum criticality. *npj Quantum Information*, 9(1) :6, 2023.

[14] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Reviews of modern physics*, 68(1) :13, 1996.

[15] Nikolai Zerf, Rufus Boyack, Peter Marquard, John A Gracey, and Joseph Maciejko. Critical properties of the néel–algebraic-spin-liquid transition. *Physical Review B*, 100(23) :235130, 2019.

[16] Naoto Nagaosa. *Quantum field theory in strongly correlated electronic systems*. Springer Science & Business Media, 1999.

[17] Albert Messiah. *Albert Messiah : Mécanique quantique. Tome 2*. Walter de Gruyter GmbH & Co KG, 2020.

[18] J Rogel-Salazar. Statistical mechanics, 3rd edn., by rk pathria and pd beale : Scope : textbook. level : postgraduate or advanced undergraduate, 2011.

[19] Claude Itzykson and Jean-Bernard Zuber. *Quantum field theory*. Courier Corporation, 2006.

[20] David Pines, Phillippe Nozières, and Howard HC Chang. The theory of quantum liquids, vol. 1 : Normal fermi liquids, 1967.

[21] R.P.Feynman. *Phys. Rev. 76*, pages 749–769, 1949.

[22] K.A.Brueckner. *Phys. Rev. 97*, page 1353, 1955.

[23] N.M.Hugenholtz. *Physica 23*, page 481, 1957.

[24] J. Goldstone. *Proc. Roy. Soc. A*, 239 :267, 1957.

[25] J. M. Luttinger and J. C. Ward. *Phys. Rev.*, 118 :1417, 1960.

[26] C.Bloch. *Lectures on the Many-body Problems.*, pages 241– 265, 1961.

[27] M.Gaudin. *Nuclear Physics 20*, pages 513–532, 1960.

[28] W. Negele. *Quantum Many-Particle Systems*, 80 :268, 1988.

[29] Alexander L Fetter and John Dirk Walecka. *Theoretical mechanics of particles and continua*. Courier Corporation, 2003.

[30] Richard D Mattuck. *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem*. Courier Corporation, 1992.

[31] Gian-Carlo Wick. The evaluation of the collision matrix. *Physical review*, 80(2) :268, 1950.

[32] J.Paldus1973. *Comput. Phys. Commun. 6*, 6, 1973.

[33] G Rosensteel, E Ihrig, and LEH Trainor. Group theory and many body diagrams i. classification and structure of diagrams. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 344(1638) :387–401, 1975.

[34] V.Kvasnicka. *Int. J. Quantum Chem*, 21, :1003, 1982.

[35] A.E.Jacobs. *Phys. Rev. D*, 23, :1760, 1981.

[36] Z.Csepes. *J. Comput. Phys.*, 77 :1, 1988.

[37] U.Kaldor. *J. Comput. Phys.*, 20 :432, 1976.

[38] MA Tag and S Khène. Automatic generation of essentially distinct hugenholtz diagrams. *International Journal of Modern Physics C*, 28(09) :1750113, 2017.

[39] Gian-Carlo Wick. The evaluation of the collision matrix. *Nuclear Physics*, (20) :513–532, 1960.

[40] T.Matsubara. *Prog. Theor. Phys.*, 14 :351, 1955.

[41] G.Kirchhoff. *Ann. Phys. Chem*, 72 :497–508, 1847.

[42] F.Harary. Graph theory and theoretical physics. *ACADEMIC PRESS*, 1967.

[43] W.K.Chen. Graph theory and its engineering applications. *World Scientific*, 72 :497–508, 1997.

[44] K.Paton. *Comm. ACM*, 12 :514–518, 1969.

[45] S.L.Hakimi. *J. Franklin Inst.*, 5 :347–359, 1961.

[46] W.MayedaandS.Seshu. *IEEE Trans. Circuit Theory* , 12(2) :181–185, 1965.

[47] J.P.Char. *IEEE Trans. Circuit Theory.*, 15,5(3) :228–238, 1968.

[48] P.Winter. *IEEE Trans. Circuit Theory.*, 26(1) :44–62, 1986.

[49] A.ShiouraA.TamuraandT.Uno. *SIAM J. Comput.*, 26(3) :678–692, 1997.

[50] M.J.SmithMSThesis. *University of Victoria*, 1997.

[51] M.ChakrabortyR.MeheraandR.K.Pal. Advanced computing and systems for security. *Springer, Singapore*, pages 19–36, 2017.

[52] S.Robert. Algorithms in c, part 5 : Graph algorithms. *Addison-Wesley*, 2002.

[53] N.E.Gibbs. Algorithms in c, part 5 : Graph algorithms. *JACM*, 16 :564–568, 1969.

[54] J.T.Welch. Algorithms in c, part 5 : Graph algorithms. *JACM*, 13 :205–210, 1966.

[55] L.M.MaxwellandG.B.Reed. circuits and paths, 8th midwest symp. on circuit theory. *Colorado State U., Fort Collins, Colorado*, pages 13–10, 1965.

[56] P.MatetiandN.Deo. circuits and paths, 8th midwest symp. on circuit theory. *SIAM J. Comput*, 5(1), 1976.

[57] P.A.Honkanen H.T.Hsuand. Computer sci. dept. *University Park*, 1972.

[58] D.B.Johnson. *SIAM J. Comp*, 4 :77–84, 1975.

[59] Takeo Matsubara. A new approach to quantum-statistical mechanics. *Progress of theoretical physics*, 14(4) :351–378, 1955.

[60] Joaquin Mazdak Luttinger and John Clive Ward. Ground-state energy of a many-fermion system. ii. *Physical Review*, 118(5) :1417, 1960.

[61] MA Tag and ME Mansour. Automatic computing of the grand potential in finite temperature many-body perturbation theory. *International Journal of Modern Physics C*, 30(11) :1950100, 2019.

[62] C. de Boor. *Surv. Approx. Theor*, 1 :46–69, 2005.

[63] P. Jordan and E. P. Wigner. *Z. Phys*, 74(631) :14–75, 1928.

[64] M. Shiroishi and M. Takahashi. *Phys. Rev. Lett*, 89 :117201, 2002.

[65] O. Rojas, S. M. De Souza, and M. T. Thomaz. *J. Math. Phys*, 43(3) :1390–1407, 2002.

[66] A. Klumber. Integrability of quantum chains : theory and applications to the spin-1/2 chain. *Quantum magnetism*, pages 349–379, 2004.

[67] M. A. Tag, A. Boudiar, M. E. H. Mansour, A. Hafdallah, C. Bendjeroudib, and B. Zaidi. Finite and high-temperature series expansion via many-body perturbation theory : application to heisenberg spin-1/2 xxz chain. *Physica Scripta*, 99(6) :065993, 2024.

[68] A. Taheridehkordi, S. H. Curnoe, and J. P. F. LeBlanc. Algorithmic matsubara integration for hubbard-like models. *Physical Review B*, 99(3) :035120, 2019.

[69] H. Elazab, B. D. E. McNiven, and J. P. F. LeBlanc. Libami : Implementation of algorithmic matsubara integration. *Computer Physics Communications*, 280 :108469, 2022.

[70] D. Gazizova, L. Zhang, E. Gull, and J. LeBlanc. Feynman diagrammatics based on discrete pole representations : A path to renormalized perturbation theories. *Physical Review B*, 110(7) :075158, 2024.

[71] M. A. Tag. The feynman's vacuum diagrams contribution in a divided differences formalism up to order 7, 2025. Accessed : 2025-01-25.

[72] M. A. Tag. The code can be downloaded from our github page, 2025. Accessed : 2025-01-25.

[73] Jorge E Hirsch. Two-dimensional hubbard model : Numerical simulation study. *Physical Review B*, 31(7) :4403, 1985.

[74] Daniel Duffy and Adriana Moreo. Specific heat of the two-dimensional hubbard model. *Physical Review B*, 55(19) :12918, 1997.

[75] Janez Bonča and Peter Prelovšek. Thermodynamics of the planar hubbard model. *Physical Review B*, 67(8) :085103, 2003.

[76] N. V. Prokof'ev and B. V. Svistunov. Polaron problem by diagrammatic quantum monte carlo. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :2514–2517, 1998.

[77] N. Prokof'ev and B. Svistunov. Fermi-polaron problem : diagrammatic monte carlo method for divergent sign-alternating series. *Phys. Rev. B*, 77 :020408, 2008.

[78] N. Prokof'ev K. Van Houcke, E. Kozik and B. Svistunov. Diagrammatic monte carlo. *Phys. Procedia*, 6 :95–105, 2010. Computer Simulations Studies in Condensed Matter Physics XXI.

[79] E. Kozik et al. Diagrammatic monte carlo for correlated fermions. *EPL*, 90 :10004, 2010.

[80] K. Van Houcke et al. Feynman diagrams versus fermi-gas feynman emulator. *Nat. Phys.*, 8 :366–370, 2012.

[81] N. V. Prokof'ev Y. Deng, E. Kozik and B. V. Svistunov. Emergent bcs regime of the two-dimensional fermionic hubbard model : ground-state phase diagram. *EPL*, 110 :57001, 2015.

[82] G. Pan and Z. Y. Meng. Sign problem in quantum monte carlo simulation. *arXiv preprint*, 2022.

[83] Riccardo Rossi. Determinant diagrammatic monte carlo algorithm in the thermodynamic limit. *Physical review letters*, 119(4) :045701, 2017.

[84] M. Wallerberger J. Li and E. Gull. Diagrammatic monte carlo method for impurity models with general interactions and hybridizations. *Physical Review Research*, 2(3) :033211, 2020.

[85] A. N. Rubtsov. Quantum monte carlo determinantal algorithm without hubbard-stratonovich transformation : a general consideration. *Preprint arXiv*, 2003.

[86] A. N. Rubtsov and A. I. Lichtenstein. Continuous-time quantum monte carlo method for fermions : Beyond auxiliary field framework. *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 80 :61–65, 2004.

[87] Alexander N. Rubtsov, Vladimir V. Savkin, and Alexander I. Lichtenstein. Continuous-time quantum monte carlo method for fermions. *Physical Review B*, 72 :035122, 2005.

[88] Dirk Laurie. Calculation of gauss-kronrod quadrature rules. *Mathematics of Computation*, 66(219) :1133–1145, 1997.

[89] Ivan V. Oseledets. Tensor-train decomposition. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(5) :2295–2317, 2011.

[90] M. A. Tag and A. Hafdallah. One-dimensional hubbard model in high temperatures through many-body perturbation theory. *Acta Physica Polonica A*, 147(2), 2025.

Annexe A

Le potentiel grand canonique aux deuxième et troisième ordres

A.1 Deuxième ordre

La figure(A.1) représente le deuxième diagramme de Hugenholtz de l'ordre G_2^1. Chaque ligne i dans G_2^1 est étiquetée par l'arête E_i et le coefficient de l'arête n_i.
Pour calculer la contribution V_2^1 directement à partir du diagramme de la figure(A.1) (divisé par son facteur de symétrie généré $S_2^1 = -8$), nous utilisons l'expression suivante :

$$V_2^1 = -\frac{1}{8} V_{p_1,p_2}^{p_3,p_4} V_{p_3,p_4}^{p_1,p_2} \tag{A.1}$$

Pour calculer la contribution $\Omega_2^{G_2^1}$ du diagramme G_2^1, nous devons d'abord nous assurer que toutes les orientations totales sont non nulles. Cela nécessite de trouver des valeurs arbitraires pour les coefficients de bord $n_i > 0$. Ainsi, nous devons identifier tous les cycles dans le graphe entier G_2^1.
Tous les cycles de G_2^1 sont composés de l'ensemble suivant CY d'arêtes :

$$CY = \left\{ \begin{array}{l} \{E_1, E_2\}, \{E_1, E_3\}, \{E_1, E_4\}, \\ \{E_2, E_3\}, \{E_2, E_4\}, \{E_3, E_4\} \end{array} \right\} \tag{A.2}$$

En utilisant la définition Eq. (3.24), nous pouvons trouver l'ensemble O de toutes les orientations totales des cycles CY comme suit :

$$O = \left\{ \begin{array}{l} \pm(n_1 - n_2), \pm(n_1 + n_3), \\ \pm(n_1 + n_4), \pm(n_2 + n_3), \\ \pm(n_2 + n_4), \pm(n_3 - n_4) \end{array} \right\} \tag{A.3}$$

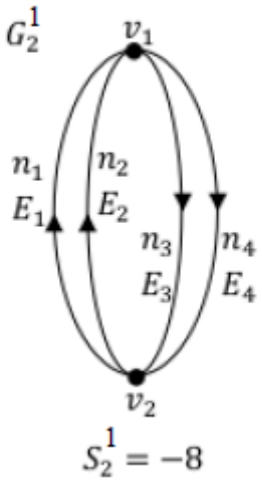


Figure A.1: Diagramme de Hugenholtz de deuxième l'ordre

À partir de Eq. (A.2), nous pouvons conclure que la seule condition pour que tous les éléments de l'ensemble O soient non nuls est :

$$n_1 \neq n_2; n_3 \neq n_4 \tag{A.4}$$

Maintenant, nous pouvons attribuer n'importe quelle valeur au coefficient de bord $n_i > 0$; $1 \leq i \leq 4$, mais sous la condition Eq. (A.4), par exemple :

$$n_1 = 3, n_2 = 1, n_3 = 1, n_4 = 2 \tag{A.5}$$

Dans la deuxième étape, nous dessinons tous les arbres couvrants possibles du diagramme G_2^1, qui sont représentés dans la Fig.(A.2). La ligne épaisse dans chaque graphe G_{T_i} dans la Fig.(A.2) représente la branche de l'arbre couvrant.

La contribution de chaque graphe G_{T_i}, $1 \leq i \leq 4$ au grand potentiel est définie par :

$$\Omega_2^{T_i} = \frac{N^*_{T_i}}{D_{T_i}} \tag{A.6}$$

L'arbre couvrant T_1 contient uniquement une branche E_1. Par conséquent, nous pouvons définir une seule coupe fondamentale, représentée par C_1 dans G_{T_1}. Le dénominateur D_{T_1} peut être extrait de la coupe fondamentale C_1, qui dépend de la direction des flèches entrantes et sortantes de C_1, avec la branche sélectionnée E_1 de T_1 comme direction de projection :

$$D_{T_1} = E_1 + E_2 - E_3 - E_4 \tag{A.7}$$

Nous pouvons déduire le numérateur $N^*_{T_1}$ directement du co-arbre T^*_1 de G_{T_1} dans la Fig.(A.2), qui est composé des cordes $\{E_2, E_3, E_4\}$:

$$N_{T^*_1} = f_2^{[O_2]} f_3^{[O_3]} f_4^{[O_4]} \tag{A.8}$$

où $[O_2]$, $[O_3]$, et $[O_4]$ sont les signes d'orientation totale des cycles fondamentaux $\{E_2, E_1\}$, $\{E_3, E_1\}$, et $\{E_4, E_1\}$ respectivement. En utilisant la définition Eq. (3.23), Eq. (3.24) et les valeurs Eq. (A.3) :

$$\begin{aligned} [O_2] &= -Sign[n_2 - n_1] = -Sign[-2] = + \\ [O_3] &= -Sign[n_3 - n_1] = -Sign[4] = - \\ [O_4] &= -Sign[n_4 - n_1] = -Sign[5] = - \end{aligned} \tag{A.9}$$

À partir de Eq. (A.7), Eq. (A.8), et Eq. (A.9), l'expression finale de la contribution $\Omega_2^{T_1}$ est :

$$\Omega_2^{T_1} = \frac{f_2^+ f_3^- f_4^-}{E_1 + E_2 - E_3 - E_4} \tag{A.10}$$

De même, nous pouvons trouver la contribution des autres arbres couvrants $\Omega_2^{T_2}$, $\Omega_2^{T_3}$ et $\Omega_2^{T_4}$ comme suit :

$$\begin{aligned} \Omega_2^{T_2} &= \frac{f_1^- f_3^- f_4^-}{E_2+E_1-E_3-E_4} \\ \Omega_2^{T_3} &= \frac{f_1^- f_2^- f_4^-}{E_3+E_4-E_1-E_2} \\ \Omega_2^{T_4} &= \frac{f_1^- f_2^- f_3^+}{E_4+E_3-E_1-E_2} \end{aligned} \tag{A.11}$$

Enfin, la contribution totale $\Omega_2^{G_2^1}$ de G_2^1 au grand potentiel est la somme de toutes les

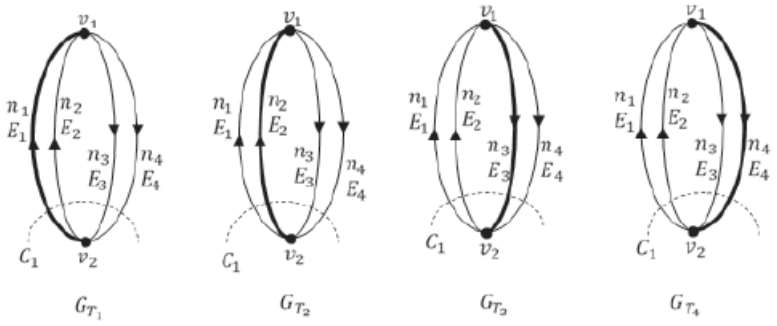


Figure A.2: Tous les arbres couvrants du diagramme G_2

contributions Eq. (A.10) et Eq. (A.11) :

$$\Omega_2^{G_2^1} = \frac{f_3^- f_4^- (f_1^- + f_2^+)}{E_1 + E_2 - E_3 - E_4} + \frac{f_1^- f_2^- (f_3^+ + f_4^-)}{E_3 + E_4 - E_1 - E_2} \tag{A.12}$$

A.2 Troisième ordre

La figure (A.3) représente les deux diagrammes de Hugenholtz du troisième ordre Ω_3, G_3^1 et G_3^2. La partie potentielle V_3^1 peut être déduite directement du diagramme G_3^1 comme suit :

$$V_3^1 = \frac{1}{6} V_{p_1,p_2}^{p_3,p_6} V_{p_3,p_4}^{p_5,p_2} V_{p_5,p_6}^{p_1,p_4} \tag{A.13}$$

Tous les cycles de G_3^1 sont représentés par l'ensemble d'arêtes suivant :

$$\begin{aligned} &\{E_1, E_2\}, \{E_3, E_4\}, \{E_5, E_6\}, \\ &\{E_1, E_3, E_5\}, \{E_1, E_4, E_5\}, \\ &\{E_1, E_4, E_6\}, \{E_2, E_3, E_5\}, \\ &\{E_2, E_3, E_6\}, \{E_2, E_4, E_5\}, \\ &\{E_2, E_4, E_6\} \end{aligned} \tag{A.14}$$

Les ensembles de toutes les orientations totales O de G_3^1 peuvent être déduits facilement en utilisant la définition Eq. (3.24). Ensuite :

$$O = \left\{ \begin{array}{l} \pm(n_1 + n_2), \pm(n_3 + n_4), \\ \pm(n_5 + n_6), \pm(n_1 + n_5 + n_3), \\ \pm(n_1 - n_6 + n_3), \pm(n_1 + n_5 - n_4), \\ \pm(n_1 - n_6 - n_4), \pm(n_2 - n_3 - n_5), \\ \pm(n_2 - n_3 + n_6), \pm(n_2 + n_4 - n_5), \\ \pm(n_2 + n_4 + n_6) \end{array} \right\} \tag{A.15}$$

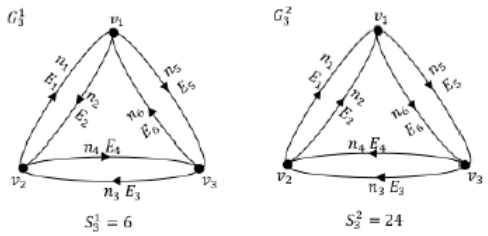


Figure A.3: Les diagrammes de Hugenholtz du troisième ordre

À partir de Eq. (A.15), nous pouvons conclure que toutes les conditions requises pour rendre $O \neq 0$ sont :

$$\begin{aligned} &n_1 - n_6 + n_3 \neq 0, n_1 + n_5 - n_4 \neq 0 \\ &n_1 - n_6 - n_4 \neq 0, n_2 - n_3 - n_5 \neq 0 \\ &n_2 - n_3 + n_6 \neq 0, n_2 + n_4 - n_5 \neq 0 \end{aligned} \tag{A.16}$$

Nous pouvons choisir n'importe quelle valeur pour les coefficients $n_i > 0; 1 < i < 6$ mais sous la condition Eq. (A.16), par exemple :

$$n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = n_5 = n_6 = 1 \tag{A.17}$$

La deuxième étape consiste à trouver tous les arbres couvrants du graphe G_3^1. La Figure (A.4) représente tous les arbres couvrants des diagrammes G_3^1. Les lignes épaisses dans chaque graphe G_{T_i} de la Figure (A.4) représentent les branches de son arbre couvrant. Maintenant, nous nous concentrons sur la détermination de la contribution de chaque arbre couvrant. En commençant par le graphe G_{T_1}, les branches de son arbre couvrant sont $T_1 = \{E_1, E_3\}$, donc il y a deux coupes fondamentales, qui sont représentées par C_1 et C_2 dans G_{T_1}.
Pour C_1, nous voyons que la corde E_6 est dans la même direction que la branche E_1, tandis que les cordes restantes E_2 et E_5 sont dans la direction opposée à la branche E_1, donc le dénominateur est :

$$D_1 = E_1 + E_6 - E_2 - E_5 \tag{A.18}$$

De même, le dénominateur déduit de C_2 est :

$$D_2 = E_3 + E_6 - E_4 - E_5 \tag{A.19}$$

Le dénominateur total résultant de l'arbre couvrant $T_1 = \{E_1, E_3\}$ est alors le produit des dénominateurs partiels Eq. (A.18) et Eq. (A.19) :

$$D_{T_1} = D_1 D_2 = (E_1 + E_6 - E_2 - E_5)(E_3 + E_6 - E_4 - E_5) \tag{A.20}$$

Pour calculer le numérateur $N^*_{T_1}$, nous utilisons la relation Eq. (3.22). L'arbre co-entier T_1^* de G_{T_1} dans la Fig. (A.3) est composé des cordes $\{E_2, E_4, E_5, E_6\}$, donc :

$$N_{T_1^*} = f_2^{[O_2]} f_4^{[O_4]} f_5^{[O_5]} f_6^{[O_6]} \tag{A.21}$$

Pour trouver les orientations totales $O_i; i = 2, 4, 5, 6$, nous devons d'abord trouver tous

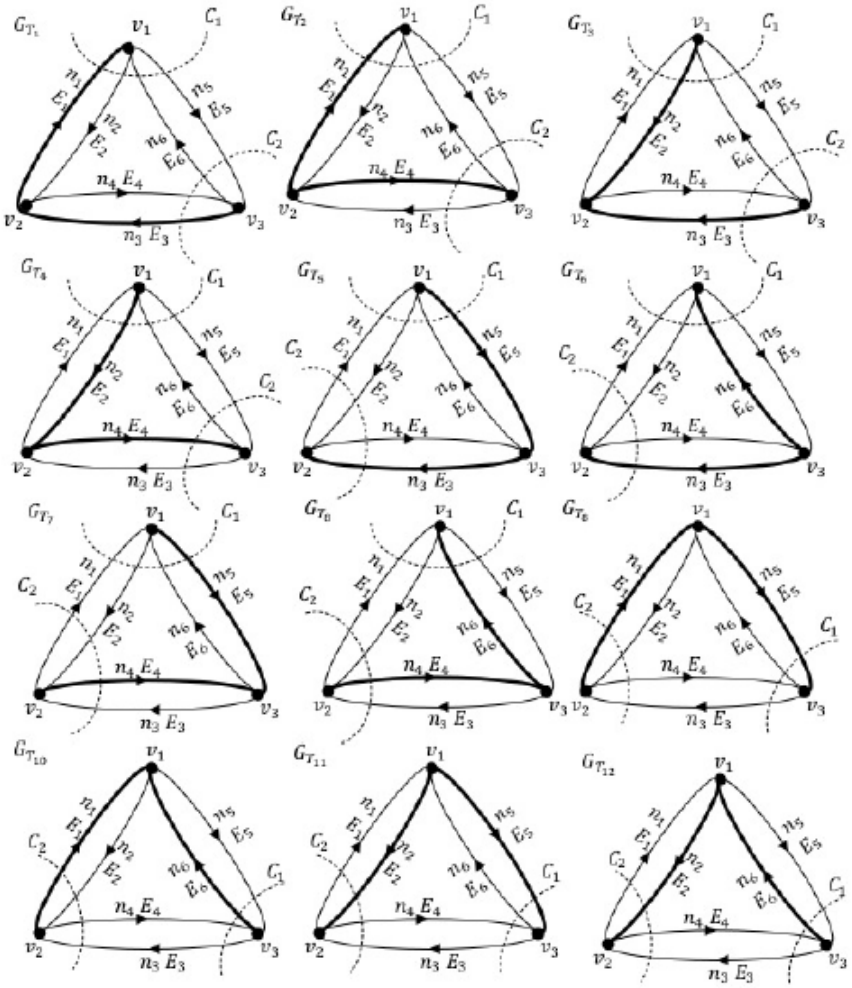


Figure A.4: Tous les arbres couvrants du diagramme G_3^1

les cycles fondamentaux FC de l'arbre couvrant $T1$ dans G_{T_1} (Fig.(A.3)), qui sont :

$$FC = \{\{E_2, E_1\}, \{E_4, E_3\}, \{E_5, E_3, E_1\}, \{E_6, E_1, E_3\}\} \tag{A.22}$$

À partir des définitions Eq. (3.23) et Eq. (3.24), et des valeurs Eq. (A.17), alors les signes des orientations totales sont :

$$\begin{aligned}
[O_2] &= -Sign[n_1 + n_2] = -Sign[2] = - \\
[O_4] &= -Sign[n_4 + n_3] = -Sign[2] = - \\
[O_5] &= -Sign[n_5 + n_3 + n_1] = -Sign[3] = - \\
[O_6] &= -Sign[n_6 - n_1 - n_3] = -Sign[-1] = +
\end{aligned} \tag{A.23}$$

Enfin, la contribution du graphe G_{T_1} dans Fig. (A.3) est :

$$\Omega_3^{G_{T_1}} = \frac{f_2^- f_4^- f_5^- f_6^+}{(E_1 + E_6 - E_2 - E_5)(E_3 + E_6 - E_4 - E_5)} \tag{A.24}$$

De la même manière, nous pouvons calculer les contributions des autres arbres couvrants $T_i; 2 \leq i \leq 12$ dans Fig.(A.4). Par conséquent, la contribution totale $\Omega_3^{G_3^1} = \sum_{i=1}^{12} \Omega_3^{G_{T_i}}$ du diagramme G_3^1 peut être écrite comme suit :

$$\begin{aligned}\Omega_3^{G_3^1} = &\frac{f_5^- f_6^+ (f_2^- - f_1^-)(f_4^- - f_3^-)}{(E_6 - E_5 - E_2 + E_1)(E_6 - E_5 - E_4 + E_3)} + \frac{f_3^- f_4^+ (f_2^- - f_1^-)(f_6^- - f_5^-)}{(E_4 - E_3 - E_2 + E_1)(E_4 - E_3 - E_6 + E_5)} \\ &+ \frac{f_1^- f_2^+ (f_4^- - f_3^-)(f_6^- - f_5^-)}{(E_2 - E_1 - E_4 + E_3)(E_2 - E_1 - E_6 + E_5)}\end{aligned} \tag{A.25}$$

Annexe B

Différences divisées et contributions du second ordre de Ω

B.1 Différence divisée

Les différences divisées sont un concept fondamental en analyse numérique et en interpolation, largement utilisées pour construire des approximations polynomiales de fonctions. Elles sont au cœur de méthodes telles que la formule d'interpolation par différences divisées de Newton.

La différence divisée d'ordre un, notée $f[x_0, x_1]$, représente la pente entre deux points $(x_0, f(x_0))$ et $(x_1, f(x_1))$, et est définie par :

$$f[x_0, x_1] = \frac{f(x_0) - f(x_1)}{x_0 - x_1} \tag{B.1}$$

De manière générale, la différence divisée d'ordre k, impliquant $k + 1$ points, $(x_0, f(x_0))$, $(x_1, f(x_1))$, ..., $(x_k, f(x_k))$ est définie comme suit :

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \frac{f[x_1, x_2, \ldots, x_k] - f[x_0, x_1, \ldots, x_{k-1}]}{x_k - x_0} \tag{B.2}$$

Ici, $f[x_i, x_{i+1}, \ldots, x_j]$ désigne la différence divisée d'ordre $(j-i)$ pour les points $x_i, x_{i+1}, \ldots, x_j$.

Le cas de base pour les différences divisées correspond aux valeurs de la fonction, donné par $f[x_i] = f(x_i)$.

Une définition équivalente de la différence divisée est :

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \sum_{i=0}^{k} \frac{f(x_i)}{\prod_{j \neq i}^{k} (x_i - x_j)} \tag{B.3}$$

L'expansion en série de Taylor des différences divisées peut être obtenue en combinant la définition des différences divisées avec les propriétés de la série de Taylor.

Pour une fonction suffisamment lisse f, la différence divisée d'ordre k pour les points $x_0, x_1, \ldots, x_k$ peut être exprimée en termes des dérivées de f comme suit :

$$f[x_0, x_1, \ldots, x_k] = \sum_{n=k}^{\infty} \frac{f^{(n)}(0)}{n!} x_0^{i_0} x_1^{i_1} \ldots x_k^{i_k} \tag{B.4}$$

où les entiers $i_j \geq 0$, où $0 \leq j \leq k$, sont choisis selon la condition suivante :

$$\sum_{j=0}^{k} i_j = n - k \tag{B.5}$$

B.2 Contribution du second ordre Ω_2

Pour calculer le terme du second ordre, Ω_2,nous appliquons directement le code fourni dans [71]. La forme analytique générée de la contribution à température finie est donnée par :

$$\left(f^-(x_3)\, f^-(x_4) - f^-(x_2)\left(f^-(x_3) + f^+(x_4)\right)\right) f^-[x_1, -x_2 + x_3 + x_4] \tag{B.6}$$

où x_i représente l'énergie E_{k_i,σ_i}.

Ce code génère également le produit des potentiels, *pot*, ainsi que le facteur de symétrie $sym = -8$ du diagramme, sous la forme :

$$pot = -\frac{1}{8} POT[1,2,3,4] POT[3,4,1,2] \tag{B.7}$$

Ou $POT[i,j,k,l] = V_{p_k,p_l}^{p_i,p_j}$.

En substituant les distributions de l'équation (4.7) dans la contribution donnée par l'équation (B.6), on remarque que $f^{\pm}(x)$ peut être exprimée comme $f^{\pm}(x) = \pm\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\tanh\left(\frac{\beta}{2}x\right)$. Par conséquent, la contribution Ω_2 peut être écrite sous la forme suivante :

$$\Omega_2 = \frac{\beta pot}{\prod_{i=1}^{4} 2\cosh\left(\frac{\beta}{2}x_i\right)} \frac{\sinh\left[\frac{\beta}{2}(x_1 + x_2 - x_3 - x_4)\right]}{\frac{\beta}{2}(x_1 + x_2 - x_3 - x_4)} \tag{B.8}$$

En substituant le produit des potentiels de l'équation (B.7) et en remplaçant x_i par son énergie correspondante $E_{k_i,\sigma}$ dans l'équation (B.8), puis en effectuant la sommation sur les spins et en appliquant la conservation de la quantité de mouvement $\boldsymbol{k}_{1,2} = \boldsymbol{q}_0 \pm \boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{k}_{3,4} =$

$\boldsymbol{q}_0 \pm \boldsymbol{q}_2$, on trouve que la contribution complète à calculer est :

$$\Omega_2 = -\frac{\beta U^2}{32} \int D\boldsymbol{q} \frac{\sinh\left[\frac{\beta}{2}(E_{\boldsymbol{q}_0+\boldsymbol{q}_1,\uparrow} + E_{\boldsymbol{q}_0-\boldsymbol{q}_1,\downarrow} - E_{\boldsymbol{q}_0+\boldsymbol{q}_2,\uparrow} - E_{\boldsymbol{q}_0-\boldsymbol{q}_2,\downarrow})\right]}{\frac{\beta}{2}(E_{\boldsymbol{q}_0+\boldsymbol{q}_1,\uparrow} + E_{\boldsymbol{q}_0-\boldsymbol{q}_1,\downarrow} - E_{\boldsymbol{q}_0+\boldsymbol{q}_2,\uparrow} - E_{\boldsymbol{q}_0-\boldsymbol{q}_2,\downarrow})} \times \prod_{i=1,2} \frac{1}{\cosh\left(\frac{\beta}{2}E_{\boldsymbol{q}_0+\boldsymbol{q}_i,\uparrow}\right)} \frac{1}{\cosh\left(\frac{\beta}{2}E_{\boldsymbol{q}_0-\boldsymbol{q}_i,\downarrow}\right)} \tag{B.9}$$

Les intégrales $\int D\boldsymbol{q}$ représentent l'intégration sur toutes les variables d'impulsion $q_i\,(0 \leq i \leq 2)$ à l'intérieur de la zone de Brillouin. Cela peut être exprimé comme $\int_{-\pi}^{\pi} \cdots \int_{-\pi}^{\pi} \prod_{j=0}^{2} \prod_{i=x,y} \frac{dq_{j,i}}{2\pi}$, où $q_{j,i}$ désigne les composantes x et y des vecteurs d'impulsion $\boldsymbol{q}_j$ pour chaque indice j.

Les intégrales décrites dans la contribution de l'équation (B.9) peuvent être calculées numériquement pour toute température T, y compris le cas de température nulle $T = 0$. Malgré la forme relativement simple de Ω_2, le calcul implique six intégrales, ce qui le rend exigeant en termes de ressources numériques.

La complexité augmente de manière significative pour des ordres supérieurs n, car le nombre d'intégrales requises croît jusqu'à $2(n + 1)$. Cette difficulté est encore aggravée par le nombre croissant de diagrammes et leurs contributions respectives. Une telle croissance exponentielle de la dimensionnalité des intégrales engendre des défis computationnels majeurs. Les méthodes d'intégration numérique directe, telles que les techniques basées sur des grilles, deviennent alors impraticables en raison de la malédiction de la dimensionnalité.

Pour faire face à cette complexité, les auteurs emploient des techniques telles que l'intégration de Monte Carlo ou les méthodes quasi-Monte Carlo. Ces méthodes sont adaptées au traitement des intégrales de haute dimension et permettent d'obtenir des approximations des résultats, notamment lorsqu'elles sont combinées à l'échantillonnage par importance afin de se concentrer sur les régions les plus significatives du domaine d'intégration. Ces méthodes restent toutefois approximatives et nécessitent un temps de calcul considérable. Malgré leur efficacité dans la gestion des intégrales de grande dimension, elles exigent souvent des ressources de calcul importantes et sont sujettes à des erreurs en raison de la nature finie de l'échantillonnage propre aux techniques de Monte Carlo. Le temps de calcul devient de plus en plus exigeant à mesure que le nombre d'intégrales et de diagrammes augmente, en particulier pour les ordres élevés n. Cela limite leur faisabilité pratique pour des calculs à grande échelle, rendant essentiel l'exploration d'approches alternatives ou d'optimisations afin de réduire davantage la charge computationnelle.

L'une des méthodes utilisées est le développement en série à haute température. Avant de poursuivre pour expliquer pourquoi cette méthode est utile, commençons par dévelop-

per Ω_2 à haute température :

$$\Omega_n = -\frac{U^2}{16}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n+1}\int\prod_{i=0}^{4}c_{n_i}Y_i^{2n_i}D\boldsymbol{q} \tag{B.10}$$

Avec $c_{n_0} = \frac{1}{(2n_0+1)!}$, $c_{n_i} = \frac{e_{2n_i}}{(2n_i)!}$ and $\sum_{i=0}^{4} n_i = n$.Les énergies $Y_{1,2} = E_{\boldsymbol{q}_0+\boldsymbol{q}_{1,2},\uparrow}$, $Y_{3,4} = E_{\boldsymbol{q}_0-\boldsymbol{q}_{1,2},\downarrow}$ and $Y_0 = (Y_1 - Y_2) + (Y_3 - Y_4)$.

Comme nous le voyons dans l'Équation (B.10), la contribution Ω_2 est écrite pour tous les ordres de température. C'est l'un des avantages de la méthode de la différence divisée MBPT, qui nous permet de réécrire toutes les contributions de n'importe quel diagramme de Hugenholtz (Feynman) pour tous les ordres de β.

Le calcul des intégrales après développement peut être effectué exactement à l'aide de n'importe quel langage symbolique (comme Mathematica) en raison de la forme de l'énergie dans l'Équation (4.17), mais cela nécessite un certain temps de calcul. Dans cette situation, nous pouvons simplifier davantage l'énergie dans l'Équation (4.17) sous la forme suivante :

$$E_{\boldsymbol{k}\sigma} = -t(x + x^{-1} + y + y^{-1}) + A_\sigma \tag{B.11}$$

Ou $x = \exp(ik_x)$, $y = \exp(ik_y)$.

Ainsi, les quantités $Y_{1,2}$ et $Y_{3,4}$ peuvent être réécrites sous la forme suivante :

$$Y_{1,2} = -t\left(x_0x_{1,2} + x_0^{-1}x_{1,2}^{-1} + y_0y_{1,2} + y_0^{-1}y_{1,2}^{-1}\right) + A_\uparrow \tag{B.12}$$

et

$$Y_{3,4} = -t\left(\frac{x_0}{x_{1,2}} + \frac{x_{1,2}}{x_0} + \frac{y_0}{y_{1,2}} + \frac{y_{1,2}}{y_0}\right) + A_\downarrow \tag{B.13}$$

Par conséquent, la contribution Ω_2 peut être exprimée sous la forme d'un multinomial en termes des variables (x_i, y_i), où $0 \leq i \leq 2$. Les intégrales sur $(q_{x,i}, q_{y,i})$, où $0 \leq i \leq 2$, dans les domaines $[0, 2\pi]$, sont réduites au calcul du terme constant (coefficient 0) de ce multinomial.

$$\Omega_2 = -\frac{U^2}{16}\sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{\beta}{2}\right)^{2n+1} CF\left(\prod_{i=0}^{4}c_{n_i}Y_i^{2n_i}, 0\right) \tag{B.14}$$

où $CF(P, 0)$ est une fonction qui calcule le coefficient 0 dans le multinomial P. Ce coefficient peut être déterminé de manière récursive, et le code suivant fournit une implémen-

tation de cette méthode :

Algorithme B.1 : Algorithme d'Intégration Multinomiale

Input : Ω_2

Output : res

$res \leftarrow \Omega_2$;

for $i \leftarrow 0$ ***to*** 2 **do**

  $res \leftarrow \text{Coefficient}(res, x_i, 0)$;

  $res \leftarrow \text{Coefficient}(res, y_i, 0)$;

La fonction Coefficient$(P, X, 0)$ calcule le terme constant (coefficient 0) du multinomial P. L'efficacité de cet algorithme permet l'évaluation des intégrales en $O(n_v)$, où n_v est le nombre de variables. Cependant, la performance réelle dépend de l'implémentation et des caractéristiques computationnelles de la fonction Coefficient.

La méthode utilisée pour calculer les intégrales du second ordre, Ω_2, peut également être étendue à des ordres supérieurs, Ω_n. Cette approche est à la fois efficace et polyvalente, ce qui la rend applicable à des modèles où l'énergie dépend de fonctions trigonométriques telles que cos ou sin.

Enfin, nous notons que le temps nécessaire pour calculer Ω_2 augmente avec l'ordre de l'expansion β^n. Par exemple, il faut environ 1 seconde pour $n = 10$ et 6 secondes pour $n = 12$ en utilisant Mathematica sur un PC personnel. Cette augmentation du temps de calcul est due à la fonction Coefficient de Mathematica, qui développe le multinomial pour déterminer le terme constant a_0.

Le défi restant consiste à développer une méthode optimisée pour calculer le coefficient a_0 sans développer le multinomial, ce qui permettrait de considérablement accélérer les calculs. Cela reste un problème ouvert, offrant une opportunité pour des recherches et des améliorations futures.

B.3 Développement en série à haute température de Ω à demi-remplissage

Le développement en série du potentiel grand canique à demi-remplissage avec $h = 0$, jusqu'aux ordres $O(\beta^{14}, U^6)$, est donné comme suit :

$$\begin{aligned}\Omega = &- \frac{2\log(2)}{\beta} - \beta\left(t^2 + \frac{U^2}{32}\right) + \beta^3\left(\frac{1}{24}\left(9t^4 + t^2U^2\right) + \frac{U^4}{3072}\right) \\ &- \beta^5\left(\frac{5t^6}{18} + \frac{41t^4U^2}{640} + \frac{t^2U^4}{640}\right) + \beta^7\left(\frac{595t^8}{2304} + \frac{101t^6U^2}{1008} + \frac{527t^4U^4}{107520}\right) \\ &- \beta^9\left(\frac{217t^{10}}{800} + \frac{458473t^8U^2}{2903040} + \frac{37151t^6U^4}{2903040}\right) \\ &+ \beta^{11}\left(\frac{53207t^{12}}{172800} + \frac{6658661t^{10}U^2}{26611200} + \frac{760201t^8U^4}{25231360}\right) \\ &- \beta^{13}\left(\frac{780923t^{14}}{2116800} + \frac{6608402323t^{12}U^2}{16605388800} + \frac{2204424263t^{10}U^4}{33210777600}\right)\end{aligned} \tag{B.15}$$