

Devoir 4 : Simulation Monte Carlo du modèle de Ising

PHQ404

Remise : 14 avril 2022 à 23h59

1 Objectif

L'objectif de ce devoir est d'étudier une transition de phase dans le modèle de Ising en 2 dimensions.

2 Comment présenter et remettre votre TP

Vous devez créer un dépôt Git pour votre devoir. Dans ce dépôt, on doit retrouver le code permettant de réaliser le devoir ainsi qu'un court rapport. Le nom de votre dépôt doit être *devoir4_personne1_personne2*. Pour le code, vous devez utiliser Poetry pour gérer votre environnement virtuel.

De plus, le fichier README de votre projet doit indiquer comment obtenir le rapport. Celui-ci peut-être effectué en \LaTeX ou à l'aide d'un carnet numérique (Jupyter ou autre). Si vous utilisez un carnet, celui-ci ne doit contenir que le code nécessaire pour votre rapport. Les implémentations doivent se trouver dans un module que vous importez. Si vous utilisez \LaTeX , il n'est pas nécessaire de soumettre le rapport compilé. Il est suffisant d'indiquer quel fichier compiler pour obtenir le rapport.

Sauf indication contraire de votre part, la dernière version de votre dépôt avant la remise sera évaluée.

3 Énoncé

3.1 Modèle de Ising

Un fichier python est joint à ce devoir. Celui-ci contient une classe nommée *Ising* qui permet de représenter un système de spins ferromagnétique avec un couplage entre les premiers voisins. La classe est cependant incomplète et vous devez compléter l'implémentation de certaines méthodes. Pour ce faire, vous pouvez ajouter des méthodes intermédiaires, mais vous ne pouvez pas retirer de méthodes.

La classe est compilée avec la bibliothèque *NumBa* pour accélérer les calculs. Cependant, cela impose des contraintes sur les versions de *NumPy*. En effet, il est important de choisir une version de numpy avant 1.22 pour éviter des problèmes de compatibilité.

3.2 Méthode du binning

Une seconde classe nommée *Observable* est également fournie pour évaluer des statistiques sur l'aimantation et l'énergie à l'aide de la méthode du binning. Vous devez également compléter cette classe.

3.3 Simulation Monte Carlo

À l'aide de ces deux classes, vous devez implémenter une simulation Monte Carlo pour un système de 32×32 spins pour des températures entre 1.0 et 4.0 par incrément de 0.1. Pour ce faire, vous devez

1. initialiser le système aléatoirement;
2. effectuer 1 000 000 d'itérations pour réchauffer le système;
3. rendre une mesure de l'énergie et de l'aimantation après chaque interval de 1 000 itérations;
4. terminer la simulation après avoir accumuler 2^{16} mesures;
5. enregistrer les résultats dans un fichier de données.

3.4 Visualisation des résultats

Vous devez fournir des graphiques similaires aux figures suivantes et commenter brièvement les résultats.

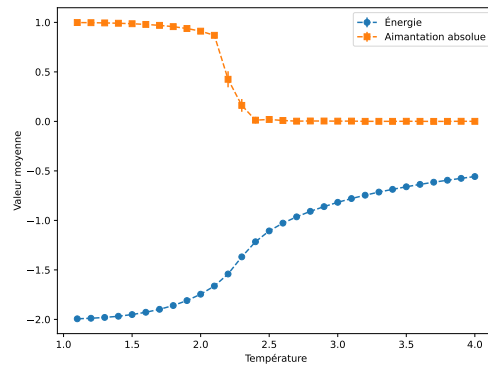


FIG. 1 – Exemple de figure pour les valeurs moyennes et les erreurs d'estimation pour l'énergie et l'aimantation par spin selon la température. Les erreurs d'estimation sont obtenues avec la méthode du binning de 16 niveaux.

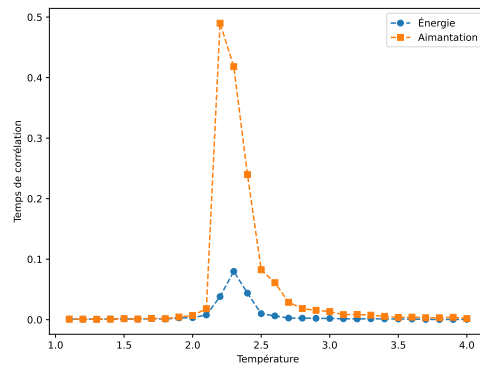


FIG. 2 – Exemple de figure pour les temps de corrélation selon la température.

4 Critères d'évaluation

30 points Pour compléter la classe *Ising*.

30 points Pour compléter la classe *Observable*.

30 points Pour l'implémentation de la simulation Monte Carlo.

10 points Pour la qualité générale du rapport et des graphiques.