

Thèse de Doctorat en Sciences de l'Université Louis Pasteur de Strasbourg

Spécialité : Physique Théorique

Groupe de Renormalisation et Théorie de la Fonctionnelle de Densité

Abdelouahab Kenoufi

Laboratoire de Physique Théorique
Université Louis Pasteur Strasbourg

15 novembre 2004

Président : F. Gautier (Université Louis Pasteur, Strasbourg)

Rapporteur interne : D. Weinmann (CNRS Strasbourg)

Rapporteur externe : S. Goedecker (Université de Bâle)

Rapporteur externe : M. Goze (Université de Haute-Alsace, Mulhouse)

Examineur : P. Surjan (Université Eötvös de Budapest)

Directeur de thèse : J. Polonyi (Université Louis Pasteur, Strasbourg)

Les membres du Jury ont accepté la soutenance de cette thèse achevant ainsi un projet particulièrement important de ma vie. Je remercie très sincèrement François Gautier, le Président du jury, Dietmar Weinmann, Rapporteur Interne, les Rapporteurs Externes Stefan Goedecker et Michel Goze, ainsi que Peter Surjan qui m'a fait l'honneur d'être mon Examineur. La préparation de cette thèse a été pour moi un moment d'apprentissage et de formation unique et très intéressant. C'est la première fois dans mes études, que j'ai pu prendre le temps de lire ce que je voulais, de m'égarer de temps à autre sur un sujet qui me captivait, et de prendre le temps de comprendre profondément une théorie scientifique.

Je dois beaucoup à Janos Polonyi, mon directeur de thèse. Il a le grand mérite d'être, selon moi, un honnête homme au sens humaniste du terme. Très gentil de nature, sa culture et son niveau scientifiques sont tels que l'écouter parler ou m'expliquer quelque chose que je ne comprenais pas, m'a toujours donné l'impression de faire des bonds intellectuels énormes. Je lui dois tout, depuis les cours de mécanique quantique de licence et de maîtrise, depuis mon mémoire de magistère, jusqu'à cette thèse qui je l'espère, lui fera honneur. Il m'a transmis cette espèce de réflexe qui consiste à se plonger très vite dans un ouvrage ou dans un article et à en retirer au mieux la substance et l'information pertinente. J'ai beaucoup appris avec lui, et ce, sans heurts, sans être forcé et en laissant le temps faire son oeuvre.

Il n'est pas de mot assez fort pour décrire l'engagement quotidien et infaillible de mes parents, frères et soeurs ainsi que de ma compagne Lynda, qui au delà de partager ma vie, a aussi su m'aider et me soutenir tout au long de mes études à Strasbourg et à Paris.

Je ne peux oublier mes grands amis Jean Alexandre et Philippe Grandemange qui m'ont prouvé que la science et la bonne chaire ne sont pas incompatibles.

Le bon esprit de camaraderie prévalant entre mes collègues Franck Stauffer, Adrian Tanasa et moi-même, ainsi que la bonne humeur du bureau 360 ont permis de rendre les années passées dans ce laboratoire moins tristes qu'à l'accoutumée. J'ai toujours pu compter sur l'amitié et la loyauté de mes "compagnons d'armes" dans les moments difficiles et je les en remercie beaucoup.

Je tiens à exprimer mon affection à René Voltz, qui a été mon maître depuis la licence et avec qui j'ai beaucoup appris. Ces conseils ont été excellents et m'ont donné un recul sur la compréhension que j'avais des Sciences et de la Nature. Grand Erudit, Humaniste, il m'a aussi transmis son amour et son respect des livres. Je me dois aussi de remercier Jacques Harthong, mon "Grand Gourou", pour le temps qu'il a pris à m'expliquer certaines théories mathématiques ou physiques, pour l'éclairage qu'il m'a apporté dans différents domaines autres que les sciences et pour sa franche et sincère hospitalité.

Mon respect et ma gratitude vont à Jean-Pierre Munch, directeur de l'UFR de Sciences Physiques et scientifique avant tout. Il m'a beaucoup aidé et soutenu. Homme de courage et de vision, il reste un modèle et je conseille à beaucoup d'étudiants et plus généralement de jeunes, de l'écouter car il a beaucoup de choses à dire et à apporter.

Mes remerciements vont aussi vers les très sympathiques Claude Wecker, Johann Bartel, Vincenzo Branchina, Asher Perez, Daniel Cabra, Michel Rausch de Trau-

benberg, vers la seule physicienne du laboratoire Véronique Bernard, tous les autres membres du LPTh, Jean Richert, Jean-Luc Jacquot, Dominique Boose, Jean-Yves Fortin, Raoul Dillenscheider, ainsi que vers les mathématiciens Michel Goze alias le "Platon-de-Rammersmatt", et Marcus Slupinski.

Je ne peux oublier Norbert Schappacher et Bopeng Rao, qui m'ont donné la chance de suivre un cursus en magistère de mathématiques et en maîtrise d'ingénierie mathématique totalement adapté à mes aspirations et à mon projet scientifique. J'y suis arrivé. Merci !

Ma gratitude va aussi vers Hervé de Feraudy, mon ancien directeur de DEA à Paris, ainsi que Colette Jan, son assistante. Ils m'ont toujours soutenu et j'ai pu bénéficier de leurs encouragements et de leurs conseils tout au long de ces années d'études de troisième cycle. Hervé est un scientifique hors pair, un homme généreux et soucieux de l'avenir de ses étudiants.

Je remercie aussi Jan Dusek, et Pierre Comte qui ont su m'expliquer, me corriger et m'aider à avancer dans mon modeste travail sur la turbulence, Dietmar Weinmann et Janos Pipek pour les discussions sur le calcul de conductance, Kornel Sailer et Peter Surjan pour des discussions très poussées sur la DFT, Andreas Patkos pour l'hospitalité et les agréables moments passés à l'Université Eötvös de Budapest, et enfin Xavier Blanc dit "Du Normalien" pour son aide scientifique et les fous rires qu'on a eus.

Je me dois aussi de citer Nicole Stenger, secrétaire du Laboratoire de Physique Théorique, en retraite depuis septembre 2004. Les quelques semaines passées avec sa remplaçante, Patricia Burgard, ont été particulièrement agréables et je l'en remercie aussi.

Un mot de remerciement à tous mes amis extérieurs à la sphère et au microcosme des mathématiques et de la physique : Ahcène, et tout le personnel du "Sahara" dont le couscous a eu un effet dopant sur moi, Toufik, Mourad et tous les autres de "La Méchouiade", Clément, Laurence et leurs familles, Jean-Didier Garaud, Félix, Jean-Marc Ronnecker et Daphnée, Christine Goze et toute sa famille, François et Christine Schnell, Alain Bechmann et Anne Philippe, leurs enfants, en particulier Thomas, la famille Will, Thomas Delzant, sa femme Hélène, leurs enfants David et Julie, Stéphanie Annaheim et ses parents, Patrick Mazoyer, Fabien Nathan et sa mère Josiane, et les autres en m'excusant de ne pouvoir tous les citer.

Strasbourg, le 15 novembre 2004.

On se propose dans cette thèse d'étudier le lien entre deux théories physiques récentes et très prometteuses : la Théorie de la Fonctionnelle de Densité (TFD), ainsi que la Théorie du Groupe de Renormalisation (TGR). La première servira de cadre formel et versatile au développement de modèles à l'échelle quantique. La seconde nous permettra de développer des méthodes analytiques et/ou numériques afin de traiter des problèmes actuels comme la simulation *ab initio* de très grands systèmes matériels et la turbulence hydrodynamique développée. La thèse se compose ainsi de deux grandes thématiques :

- la première étudie les méthodes de calcul *ab initio* rapides de grands systèmes atomiques et moléculaires. On y propose de traiter le cas des systèmes à faible gap par une version améliorée du Groupe de Renormalisation d'Energie.
- la seconde développe dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de Densité de Courant une méthodologie permettant d'obtenir de manière précise l'équation du mouvement d'un fluide selon l'échelle d'observation.

Les méthodes de renormalisation ont vus le jour il y a une quarantaine d'années en électrodynamique quantique, et sont devenues depuis, un outil d'analyse et de prédiction redoutable dans divers domaines de la physique et des mathématiques appliquées comme par exemple : en théorie des champs, pour l'étude des transitions de phases et des phénomènes critiques, l'étude asymptotique des systèmes dynamiques, la turbulence développée, la percolation, la physique des polymères, ou la théorie de la mesure . . .

Elles donnent aussi une approche intéressante et puissante dans l'étude des changements d'échelle en espace et en temps et interagissent naturellement avec diverses techniques de simulation numérique (simulation Monte-Carlo).

Le grand intérêt des méthodes de renormalisation est leur capacité à traiter des problèmes où différentes échelles interagissent, c'est à dire des problèmes où des phénomènes modélisés à une échelle élémentaire et ayant des interactions à courtes portées sont susceptibles de créer des phénomènes perceptibles à grande échelle. C'est le cas par exemple des transitions de phase dans les matériaux magnétiques, des transitions de phase thermodynamiques, de la turbulence développée, de la transition semi-conducteur-isolant, . . .

De plus, les méthodes de renormalisation se sont avérées être un formidable algorithme numérique permettant d'envisager de traiter les systèmes quantiques dans un temps de calcul raisonnable et avec une précision accrue.

La TFD est un formalisme alternatif au formalisme de la première quantification utilisant les fonctions d'ondes. La TFD est particulièrement intéressante et puissante pour le traitement des problèmes à N corps en matière condensée. Elle permet de simplifier ces derniers et de générer des procédures de résolution numérique puissantes. Ses applications calculatoires sont innombrables comme par exemple : structure de bandes en physique du solide, propriétés magnétiques de certains alliages, énergies de liaison moléculaire en chimie, la structure moléculaire en biologie et en minéralogie, supraconducteurs soumis à un laser intense, effets relativistes dans les éléments lourds et dans le noyau.

Simuler *ab initio* un système matériel consiste à résoudre numériquement l'équation de Schrödinger ou les équations de Kohn-Sham qui lui sont associées. Cette approche présente des avantages considérables :

- elle est universelle, en ce sens qu'elle peut être appliquée en principe à un système matériel quelconque et qu'elle permet d'obtenir certaines propriétés (mécaniques, thermochimiques, optiques, magnétiques, ...) de ce système avec une excellente précision.
- elle est autonome, en ce sens qu'il suffit de connaître la composition d'un système pour en déduire toutes ses propriétés : les seuls paramètres intervenant dans le modèle sont en effet des constantes fondamentales de la physique ; aucune donnée expérimentale propre au système étudié n'est requise.

La simulation *ab initio* peut donc être appliquée dans des situations où échouent toutes les méthodes alternatives tant numériques qu'expérimentales, notamment pour la prédiction des propriétés de composés chimiques non encore synthétisés ou encore l'étude de milieux hostiles (conditions extrêmes de température ou de pression, ...). La simulation *ab initio* de grands systèmes atomiques, qui constitue la première partie du sujet de thèse présente deux difficultés majeures : Pour que les calculs *ab initio* soient réellement exploitables dans le contexte d'un changement d'échelle, il faut qu'ils mettent en jeu un assez grand nombre d'atomes (plusieurs milliers). Il est alors indispensable d'avoir recours à des méthodes numériques rapides et très sophistiquées.

Il se trouve que toutes les méthodes numériques rapides développées jusqu'à présent sont mises en échec lorsqu'on cherche à les appliquer à des systèmes métalliques (plus généralement des systèmes à faibles gaps).

L'objet de cette partie de la thèse sera donc de développer de nouvelles techniques numériques rapides, basées sur des méthodes dite de renormalisation, permettant ainsi de simuler efficacement des systèmes métalliques de grande taille. Après l'étude de diverses méthodes *ab initio* de complexité algorithmique linéaire (FOE, DMM, OM, Divide & Conquer, ...) et leur application au traitement de systèmes physiques simples (modèle en tight binding à une dimension), différentes techniques basées sur le groupe de renormalisation seront implémentées dans un code de calcul pour comparaison et analyse numérique.

La turbulence dite développée est un des phénomènes critiques les plus difficiles à traiter actuellement. Les équations du mouvement d'un fluide, en l'occurrence les équations de Navier-Stokes ne sont pas aptes à prédire les lois d'échelle observées lors d'un écoulement turbulent. Typiquement, la méthode du Groupe de Renormalisation est la meilleure candidate pour un tel programme. En effet la turbulence fait intervenir différentes échelles spatio-temporelles, et seule la TGR permet de comprendre comment s'organisent et interagissent ces différentes échelles.

L'objectif de cette partie de thèse est de développer une méthode systématique afin d'obtenir une généralisation des équations de Navier-Stokes et ce depuis l'échelle microscopique dans le cadre d'une Théorie Quantique des Champs et au moyen de la Théorie de la Fonctionnelle de Densité de Courant, qui est une généralisation de la TFD. On envisagera dans de futures publications d'étudier l'évolution des équations

effectives du mouvement en fonction de l'échelle d'observation au moyen de la méthode du Groupe de Renormalisation.

La thèse est organisée en six parties.

La première expose des généralités physiques sur la TGR. Le chapitre (1) donne une perspective intéressante sur le GR en le situant dans un contexte théorique et montre que la TGR est bien plus qu'une théorie, une "méta-théorie". Le chapitre (2) est une démonstration sur un modèle d'école, le modèle d'Ising et permet d'exhiber les premiers concepts et de dérouler l'algorithme d'une méthode de renormalisation dans l'espace réel.

La deuxième partie de la thèse est une présentation plus mathématique de la TGR. Les chapitres (3) et (4) permettent respectivement au travers de l'analyse linéaire de comprendre le lien entre les exposants critiques et les caractéristiques mathématiques de l'opérateur de renormalisation, et au travers de la Théorie des Groupes et Algèbres de Lie d'interpréter le GR comme un groupe de symétrie particulier. Le chapitre (5) donne un point de vue intéressant en interprétant le GR comme une généralisation du Théorème de la Limite Centrale ou Central-Limit.

La troisième partie commence au chapitre (6) par une présentation des méthodes usuelles de calcul *ab initio* pour la mécanique quantique non-relativiste, et permet d'introduire la TFD au chapitre (7). Les extensions de la TFD, comme la TFDS ou la TFDC sont présentées succinctement au chapitre (8).

La quatrième partie montre comment la TGR peut résoudre un problème de complexité algorithmique et de précision numérique pour la simulation de systèmes matériels à faibles gaps en DFT. Le chapitre (9) est une présentation des méthodes dites d'ordre N , ou $\mathcal{O}(N)$. Le chapitre suivant (10) est une présentation d'une méthode de renormalisation dans l'espace d'énergie (ERG) et propose une amélioration de cet algorithme.

Enfin, la dernière partie, sûrement la plus novatrice, concerne l'application combinée de la TGR et de la TFDC au traitement de la turbulence et à la dérivation des équations de Navier-Stokes généralisées. Un tour d'horizon historique sur la turbulence est effectué au chapitre (11). Le chapitre suivant, Chap. (12) fait l'état des lieux des techniques mathématiques utilisées, en particulier l'analyse fonctionnelle, pour le traitement de l'équation de Navier-Stokes. Au chapitre (13), on décrit les propriétés énergétiques et de symétrie de cette équation ainsi que la turbulence au travers de lois et de théories phénoménologiques (K41). On démonte la version du GR utilisée par les hydrodynamiciens en essayant de pointer certaines incohérences au chapitre (14). Finalement, le dernier chapitre, Chap. (15), propose une méthode systématique de généralisation des équations de Navier-Stokes à partir de l'échelle microscopique et prépare le terrain à de futures applications du GR pour retrouver les lois phénoménologiques de la turbulence.

On trouve dans la dernière partie, en annexe, les supports aux notations et aux définitions, ainsi que les détails de certains calculs.

A mes parents,
à mes frères et soeurs,
et à Lynda

Table des matières

I	Aspects physiques des méthodes de renormalisation	23
1	Principe et cadre physique	25
1.1	Historique	25
1.1.1	Origine	25
1.1.2	La renormalisation issue de la théorie quantique des champs	26
1.1.3	Universalité des phénomènes critiques	27
1.1.4	Echelles phénoménologiques	29
1.1.5	Echelles relatives	31
1.1.6	Limite thermodynamique et régime asymptotique	31
1.1.7	Lois d'échelle, exposants critiques et paramètres de contrôle	32
1.2	Méthodes de renormalisation	33
1.2.1	Objectifs	33
1.2.2	Classes d'universalité	35
2	Exemple de système critique	37
2.1	Modèles d'Ising	37
2.1.1	Introduction	37
2.1.2	Forme usuelle de la fonction de partition	38
2.1.3	Approximation de champ moyen	40
2.1.4	Fonction de partition sous forme d'intégrale de chemin	45
2.1.5	Approximation du col	47
2.2	Analyse par renormalisation	48
2.2.1	Singularités critiques de la limite thermodynamique	48
2.2.2	Décimation	48
2.2.3	Equations de renormalisation	49
2.2.4	Analyse et résultats	50
II	Aspects mathématiques des méthodes de renormalisation	53
3	Analyse linéaire	55
3.1	Opérateurs de renormalisation dans l'espace réel	55
3.1.1	Objectifs	55
3.2	Opérateurs de renormalisation dans l'espace conjugué	57

3.2.1	Objectifs	57
3.3	Transfert de limites	58
3.3.1	Points fixes et variétés critiques	59
3.3.2	Analyse linéaire	60
3.3.3	Renormalisation d'une famille paramétrée	61
4	Groupe de renormalisation et symétries	65
4.1	Groupes de Lie	65
4.1.1	Générateurs infinitésimaux et Groupe de Lie	65
4.1.2	Exemples de renormalisation	66
4.1.3	Groupes de transformations et symétries associées	68
4.1.4	Représentations et groupes de symétrie	70
5	Etude probabiliste des systèmes critiques	73
5.1	Approche probabiliste	73
5.2	Renormalisation en terme probabiliste	73
5.2.1	Transformation d'échelle	74
5.2.2	Liens avec le théorème de la limite centrale	75
5.3	Généralisation du théorème de la limite centrale	76
5.4	Fluctuations et corrélations	77
III Calculs <i>ab initio</i> et Théorie de la Fonctionnelle de Densité (TFD)		79
6	Méthodes <i>ab initio</i> usuelles	81
6.1	Formalisme de la mécanique quantique non-relativiste	81
6.1.1	Equations de Schrödinger	81
6.1.2	Approximation de Born-Oppenheimer	82
6.2	Espace de Sobolev des fonctions d'ondes	84
6.3	Méthode de Hartree-Fock	86
6.3.1	Calcul de l'hamiltonien	86
6.3.2	Equations de Fock	89
6.4	Quelques propriétés de ces équations	91
6.5	Compacité pour Hartree-Fock	93
7	Cadre général de la TFD	97
7.1	Approche usuelle	97
7.2	Des fonctions d'ondes à la fonctionnelle de densité	98
7.2.1	Fonction de Green	98
7.3	La TFD en tant que théorie à N corps	100
7.3.1	Le théorème de Hohenberg-Kohn	100
7.3.2	Modèles de la physique statistique des gaz homogènes d'électrons (1930)	103
7.4	La TFD en tant que théorie effective à un corps	105

7.4.1	Equations de Kohn-Sham	105
7.4.2	Résolution des équations de Kohn-Sham	108
7.5	La TFD en pratique	109
7.5.1	Fonctionnelles locales	109
7.5.2	Fonctionnelles semi-locales	110
8	Extensions de la TFD	113
8.1	Théorie de la Fonctionnelle de Densité de Spin (TFDS)	113
8.1.1	Equations de Kohn-Sham en TFDS	114
8.2	TFDR	114
8.3	TFDC	115
8.4	TFDDT	115
IV	Groupe de Renormalisation et Théorie de la Fonctionnelle de Densité pour le calcul <i>ab initio</i>	117
9	Simulations <i>ab initio</i> rapides	119
9.1	Algorithmes SCF	119
9.1.1	Algorithme de Roothan	120
9.1.2	Algorithme de Level-Shifting	120
9.1.3	Méthode DIIS	121
9.2	Complexité algorithmique et taille des systèmes	121
9.3	Méthodes d'ordre N	122
9.3.1	Formalisme des matrices de densité	122
9.3.2	Classes de méthodes	123
9.3.3	Comparaisons numériques	123
9.3.4	Principe de "myopie"	124
9.3.5	Expansion polynômiale	125
9.3.6	Minimisation d'une fonctionnelle de la matrice de densité	128
9.3.7	Méthode Divide & Conquer	131
9.3.8	Méthode de point fixe	131
9.3.9	Propriétés de convergence des algorithmes $\mathcal{O}(N)$	132
10	Contributions du GR à la simulation <i>ab initio</i>	135
10.1	Traitements <i>ab initio</i> rapide des systèmes à faible gap d'énergie	135
10.2	Groupe de Renormalisation d'Energie	136
10.2.1	Coupure molle	137
10.2.2	Point fixe	137
10.2.3	Coupure dure	138
10.2.4	Blocking dans l'espace d'énergie	139
10.2.5	Tests numériques	140
10.3	Conclusion	143

V	Groupe de Renormalisation et Théorie de la Fonctionnelle de Densité pour la turbulence développée	145
11	Théories sur la turbulence développée	147
11.1	Introduction	147
11.2	Un peu d'histoire	148
11.3	Analyse mathématique de l'équation de Navier-Stokes	149
11.3.1	Description de l'équation de Navier-Stokes	149
11.3.2	Difficulté mathématique de l'équation de Navier-Stokes	149
11.3.3	Les théories étudiant la stabilité	150
11.3.4	Les théories statistiques	150
11.3.5	Analyse des dernières théories de la turbulence	153
12	Analyse fonctionnelle de l'équation de Navier-Stokes	155
12.1	Solution forte de l'équation de Navier-Stokes	155
12.2	Solution forte de l'équation d'Euler	156
12.3	Degrés de liberté	156
12.4	Turbulence bidimensionnelle	157
12.4.1	Résultats d'unicité	157
12.4.2	Passage à la limite turbulente	157
12.5	Turbulence tridimensionnelle	158
12.5.1	Point de vue de Leray (1933-1934)	158
12.5.2	Point de vue d'Onsager (1949)	159
12.5.3	Théorème de Duchon et Robert	159
12.6	Conclusion	160
13	Description physique de la turbulence	161
13.1	Etude des symétries et bilan énergétique	161
13.1.1	Conditions aux bords périodiques	161
13.1.2	Elimination de la pression	162
13.1.3	Symétries de l'équation de Navier-Stokes	163
13.1.4	Lois de conservation	164
13.1.5	Transfert d'énergie	166
13.2	Phénoménologie de la turbulence	167
13.2.1	Nombre de Reynolds	168
13.3	Lois expérimentales	169
13.3.1	Cascades de Richardson	169
13.3.2	Loi de dissipation d'énergie	171
13.3.3	Loi de puissance $\frac{2}{3}$	172
13.4	Loi des $\frac{5}{3}$	172
13.5	Théorie K41	172
13.5.1	Constance du transfert d'énergie	173
13.5.2	Propriétés statistiques	173
13.5.3	Forme universelle de $\langle \delta v(l)^2 \rangle$	174
13.6	Lois de Kolmogorov	174

14 Stratégies des théories récentes	175
14.1 Théories classiques de la turbulence	175
14.1.1 DIA	175
14.1.2 Approximation EDQNM	175
14.2 Le Groupe de Renormalisation vu par les hydrodynamiciens	176
14.2.1 Système dynamique	176
14.2.2 Perturbations	177
14.2.3 Elimination des degrés de liberté	178
14.2.4 Renormalisation des grandeurs	181
14.2.5 Equations différentielles de renormalisation	182
14.2.6 Spectre d'énergie	183
15 Contributions de la TFDC à l'hydrodynamique	185
15.1 Problématique	185
15.2 Modèle	188
15.3 Action effective	192
15.3.1 Particules non-interagissantes	192
15.3.2 Particules interagissantes	194
15.4 Lagrangien effectif	196
15.4.1 Forces dissipatives	196
15.4.2 Fonctions de vertex analytiques	197
15.4.3 Invariance par renversement du temps	199
15.4.4 Lagrangien tronqué	203
15.5 Equations du mouvement	204
15.5.1 Dérivées convectives	205
15.5.2 Equation de continuité	206
15.5.3 Brisure spontanée de l'invariance par renversement du temps .	207
15.5.4 Modes hydrodynamiques	209
15.6 Ordre principal	211
15.7 Conclusion	213
VI Annexes	215
A Notations	217
A.1 Quadri-vecteurs	217
A.2 Intégrales	217
B Dérivées symétrisées	219
B.1 Définition	219
B.2 Propriétés formelles de $\hat{\partial}$	221
C Source et action effective	225
C.1 Modèle	225
C.2 Particules non-interagissantes	227

C.2.1	Développement de σ	227
C.2.2	Action effective	236
D	Lagrangien	247
D.1	Lagrangien	247
D.1.1	$\mathcal{O}(\rho^2)$	247
D.1.2	$\mathcal{O}(\rho^3)$	249
D.1.3	Equation de continuité	255
D.1.4	Invariance par "boost" galiléen	257
D.2	Equation du mouvement	258
D.2.1	Ordre principal	259
D.3	Approximation à une boucle	261
D.3.1	$\tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{b}}$	261
D.3.2	$\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b}}$	265

Table des figures

1.1	Système non critique	34
1.2	Système critique agrandi	34
2.1	Modèle d'Ising 1D	38
2.2	Modèle d'Ising 1D avant (a) et après renormalisation (b)	49
6.1	Mise en oeuvre algorithmique de l'approximation de Born-Oppenheimer	83
9.1	Oscillations de Gibbs lors de l'approximation de la distribution de Fermi-Dirac à température nulle par une approximation de type FOE	126
9.2	Erreurs relatives en fonction du degré polynomial de la méthode FOE appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64.	127
9.3	Erreurs relatives en fonction des itérations de la méthode DMM par gradient conjugué appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64. L'optimisation s'achève pour une norme du gradient inférieure à $\epsilon = 10^{-3}$	128
9.4	Erreurs relatives en fonction des itérations de la méthode DMM par quasi-newton (BFGS à mémoire limitée) appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64. L'optimisation s'achève pour une norme du gradient inférieure à $\epsilon = 10^{-3}$.	129
9.5	Erreurs relatives des itérations de la méthode de point fixe appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64.	132
10.1	Représentation spectrale des G_i pour $i = 0, 1, 2$ et des Δ_i pour $i = 1, 2$. Les supports des fonctions Δ_{i+n} avec $n \geq 1$ sont inclus dans ceux des fonctions G_i et se concentrent autour du niveau de Fermi.	139
10.2	Comparaison de la complexité algorithmique de la méthode ERG améliorée.	142
13.1	Cascades de Richardson	170

Première partie

Aspects physiques des méthodes de renormalisation

Chapitre 1

Principe et cadre physique

Les méthodes de renormalisation sont incontournables en physique dès lors que l'on s'intéresse aux propriétés asymptotiques d'un système, c'est à dire des systèmes où des fluctuations spatiales et/ou temporelles existent à toutes les échelles. En se basant sur l'invariance d'échelle, caractéristique inhérente aux phénomènes critiques, et sans avoir à se préoccuper (dans une certaine mesure) de la validité des approximations propres à la modélisation, elles permettent d'obtenir de manière simple et systématique les propriétés intrinsèques, universelles et indépendantes des détails des constituants du système. On renvoie aux ouvrages et aux articles suivants pour plus de détails [1, 2, 3, 4].

1.1 Historique

1.1.1 Origine

Le terme "renormalisation" a tout d'abord été utilisé par les hydrodynamiciens. En effet, dans le cadre de l'étude du mouvement d'un corps solide dans un fluide, ces derniers définirent au dix-neuvième siècle le concept physique de masse renormalisée, c'est à dire la masse apparente ou effective. Cette masse s'identifie à la masse inertielle modifiée par la présence du fluide. Elle intervient donc dans l'expression de l'énergie cinétique et dans l'équation du mouvement. Le mouvement du solide entraîne le fluide, lequel en retour augmente l'inertie du corps, c'est à dire sa masse. En prenant en compte la contribution du fluide déplacé, on peut définir une masse renormalisée m_r telle que

$$\frac{1}{2}m_r\vec{v}^2 = \frac{1}{2}m\vec{v}^2 + E_{\text{cinétique du fluide déplacé}} \quad (1.1)$$

On se retrouve dans une situation où la cause est modifiée par l'effet dont elle est à l'origine. Cette situation simple et classique se retrouve en électrodynamique quantique (EDQ ou QED en anglais) où la charge de l'électron crée un champ qui agit à son tour sur la particule et modifie ainsi sa charge. Celle-ci est donc la contribution

de la charge de la particule "nue" et de la charge due à l'auto-interaction de l'électron avec le champ électrique qu'il a lui-même créé.

1.1.2 La renormalisation issue de la théorie quantique des champs

Catastrophes ultra-violette et infra-rouge

En théorie quantique des champs en général, et historiquement en électrodynamique quantique en particulier, on exhibe rapidement certains problèmes de divergences dans les calculs dues aux limites spatiales d'un comportement d'échelle. C'est ce qu'on dénomme usuellement sous le terme de catastrophe UV (ultra-violet) et IR (infra-rouge).

- Divergences UV : elles qualifient le fait qu'il y a une infinité de processus possibles aux petites échelles, c'est à dire aux grandes fréquences. Afin de faire aboutir les calculs, on introduit une coupure (cut-off en anglais). Le but est de régulariser un modèle où l'échelle devient très petite en un modèle effectif dépendant de la coupure. On retrouve ce problème lorsque l'on essaie de construire une bonne théorie de la charge ponctuelle de l'électron. Les divergences apparaissent dans ce cas lorsqu'on étend la charge ou la fréquence jusqu'à l'infini pour une théorie qui ne se contrôle que dans un domaine fini. Dans le cas de systèmes critiques, comme nous le verrons par la suite, les fréquences sont bornées supérieurement par l'existence d'une échelle minimale.
- Divergences IR : elles qualifient les divergences apparaissant aux grandes échelles. Elles sont une des caractéristiques fortes des systèmes critiques, voire même une définition. Les divergences IR sont dues aux corrélations à longue portée des constituants du système. Les fluctuations s'ajoutent de manière constructive et ne donnent pas une moyenne nulle. Le plus souvent, les méthodes perturbatives sont inefficaces et seules les méthodes issues du groupe de renormalisation peuvent traiter ce type de problème.

Théorie quantique des champs

Avec une sémantique différente, en l'occurrence celle de la régularisation, la renormalisation est apparue en théorie quantique des champs en tant que technique d'intégration sur tous les quanta virtuels de fréquence élevé. Dans les années 1950, R. Feynman, J. Schwinger, S. Tomonaga et F. J. Dyson utilisèrent les techniques de renormalisation afin de venir à bout des divergences ultraviolettes en électrodynamique quantique. De leur travail est apparu le qualificatif de théorie renormalisable, précisément une théorie où l'influence de certains phénomènes à une gamme d'échelle donnée peut être prise en compte simplement par la modification de paramètres initiaux par des paramètres effectifs. Laquelle gamme d'échelle est donnée par des fréquences à une certaine valeur de coupure Λ .

La relation fonctionnelle entre les paramètres initiaux et renormalisés peut être défini au moyen d'opérateurs formant une structure de semi-groupe. D'où la dénomination abusive de groupe de renormalisation. Cette abstraction a permis d'utiliser la batterie d'outils de la théorie des groupes (Algèbres de Lie, Théorie des Représentations, ...) afin de donner une assise mathématique puissante aux techniques de renormalisation et d'exploiter l'existence de groupe de symétrie. En effet, le groupe de renormalisation est un groupe de symétrie particulier et donne une algorithmique pour dégager des lois quantitatives traduisant les propriétés d'invariance donc de symétrie d'un système.

Théorie statistique des champs

Le groupe de renormalisation a par la suite permis de s'intéresser et de traiter les systèmes critiques, i.e les systèmes où la longueur de corrélation devient infini et exhibe des divergences infrarouges ; ce qui empêche de découpler les échelles et de travailler avec des quantités moyennes. De plus, la nature fractale des phénomènes critiques pousse à chercher des lois d'échelle, c'est à dire des lois en puissance. Comme le montrera le chapitre suivant, la stratégie des méthodes de renormalisation est de chercher à déterminer les couplages entre échelles et par là même de comprendre comment les fluctuations s'organisent.

Théorie des systèmes dynamiques

Depuis quelques années, les techniques de renormalisation ont permis d'envisager de comprendre l'apparition du chaos dans les systèmes dynamiques, autrement dit dans les systèmes à invariance d'échelle temporelle.

1.1.3 Universalité des phénomènes critiques

Règle de structure d'un système physique

On dénommera sous le terme de système le support physique d'un phénomène. Habituellement en sciences physiques, il convient d'étudier un phénomène en le plaçant si possible dans le cadre d'une théorie et en lui associant un modèle formel (hamiltonien, équations d'équilibre ou d'évolution,...) qu'on appelle une règle de structure, susceptibles de prédire les quantités pertinentes $\{\mathcal{O}_i\}$ ou fonctions d'état, dépendantes de paramètres $\{\alpha_j\}$. La modélisation est une étape essentielle, puisque elle doit générer des équations solvables aisément, mais doit aussi permettre de reproduire certaines caractéristiques complexes du dit phénomène. Elle dépend profondément de l'échelle à laquelle on l'observe. Les états du système modélisé sont représentés par un point dans un espace appelé espace de phase, l'évolution du système dans cet espace étant décrite à l'aide de la règle de structure invoquée.

Généricité d'un phénomène

Certains phénomènes restent qualitativement stables sous une faible modification des modèles, de la géométrie ou de toute autre caractéristiques du système physique. On les qualifie alors de phénomènes génériques. Cette définition s'étend aux systèmes eux mêmes : un système est générique si les systèmes voisins (dans une topologie à préciser) possèdent les mêmes propriétés. On peut rapprocher cette définition de généricité de celle de stabilité structurelle, développée par René Thom dans sa Théorie des Catastrophes [5, 6], lesquelles catastrophes se produisent dès lors que la règle de structure du système n'est plus structurellement stable.

Le physicien ne se préoccupe que des systèmes génériques car si de faibles perturbations détruisent un phénomène, celui-ci ne pourra jamais être observé expérimentalement. Pour qu'il le soit, il doit dépendre uniquement de paramètres tels que la dimension de l'espace réel et de l'espace de phase, du nombre de paramètres extérieurs indépendants, de la régularité des modèles et des règles de structure, du comportement asymptotique de certaines grandeurs, et des symétries du système. Par contre, il ne doit pas dépendre des conditions initiales ou aux limites du modèle choisi, ni des diverses approximations utilisées.

Pour les phénomènes critiques, seules les propriétés génériques ont un intérêt et on néglige les résultats obtenus pour des modèles particuliers. En fait, on ne s'intéresse plus aux valeurs des observables $\{\mathcal{O}_i(\{\alpha_j\})\}$, mais plutôt aux relations fonctionnelles $(\{\alpha_j\} \mapsto \mathcal{O}_i)$.

Transformation d'échelle

La nécessité de ne s'intéresser qu'aux propriétés génériques des phénomènes critiques provient aussi de la très grande sensibilité des fonctions d'état d'un système critique à ses détails microscopiques. En effet, la moindre perturbation est répercutée à toutes les échelles. Finalement, seule la relation fonctionnelle $(\{\alpha_j\} \mapsto \mathcal{O}_i)$ sera conservée, puisqu'elle seule a une réalité physique. Certaines fonctions d'état divergent au point critique, et donc leur valeurs importent peu, seule la manière dont elles divergent permet de donner une information sur les mécanismes à l'origine du phénomène critique.

De plus, il apparaît au point critique un comportement coopératif des degrés de libertés microscopiques, leurs détails physiques ne jouant un rôle qu'à partir du moment où ils influent sur la structure collective.

Cela implique donc de se passer de l'étude du système et de ne se préoccuper que des transformations d'échelle. On cherchera à prouver l'existence de lois d'échelle du type $\mathcal{O}_i(\{\alpha_j\}) \sim \mathcal{O}_0 \cdot \alpha_j^{\gamma_{ij}}$ en déterminant l'exposant γ_{ij} . Ce dernier est un exposant universel pour une classe de modèles donnés. De manière concrète on essaiera d'explicitier l'évolution des fonctions d'états ainsi que des fonctions de corrélation sous un changement d'échelle. Techniquement, l'invariance d'échelle sous certaines transformations exhibera la structure et l'organisation hiérarchique responsable de la criticité.

Classes d'universalité de phénomènes critiques

Les systèmes critiques exhibant les mêmes propriétés d'invariance sous une transformation d'échelle ou associée à toute autre symétrie, appartiendront à une même classe d'universalité. On essaiera donc de développer des résultats au sein de classes d'universalités en ne se préoccupant que des propriétés génériques.

1.1.4 Echelles phénoménologiques

Echelle caractéristique

Un système physique peut présenter des propriétés différentes suivant l'échelle où on l'observe. La notion d'échelle caractéristique d'un phénomène va permettre de créer une hiérarchie entre les structures observées, les interactions, les corrélations, et les effets extérieurs. Elle indique la distance de variation typique d'une grandeur. On ne peut malheureusement donner un sens quantitatif à cette notion pour tous les systèmes physiques étudiés. On doit souvent se contenter d'une notion qualitative. Cependant deux situations physiques de référence permettent de définir quantitativement cette notion :

- Une observable de type ondulatoire : $\Psi(x) = \Psi_0 \cos(kx)$. Dans ce cas, la longueur caractéristique est la longueur d'onde $l_\Psi \equiv \lambda_\Psi = \frac{2\pi}{k}$.
- Une observable de type exponentielle : $\Psi(x) = \Psi_0 e^{\frac{x}{\xi}}$. Ici, la longueur caractéristique est $l_\Psi = |\xi|$.

Dans les autres cas, on peut introduire une échelle caractéristique de variation de Ψ de différentes manières en utilisant des moyennes spatiales. Il faut toutefois garder à l'esprit que seul l'ordre de grandeur importe et que l'échelle caractéristique ne doit pas varier brutalement si les paramètres intervenant dans le calcul de ces moyennes varient sensiblement :

- Si Ψ est une fonction oscillante, il suffit de chercher dans le spectre de Fourier de Ψ , la ou les composantes maximales. Si il n'y en a qu'une, sa longueur d'onde fournit immédiatement l'échelle caractéristique. Si il y en a plusieurs, cela signifie qu'il existe plusieurs échelles caractéristiques et la question n'a pas de sens. On peut proposer la formule empirique suivante où $\langle \rangle$ désigne une moyenne sur un grand nombre d'oscillations :

$$l_\Psi = 2 \cdot \frac{\langle \sup \Psi \rangle - \langle \inf \Psi \rangle}{\langle \left| \frac{d\Psi}{dx} \right| \rangle} \quad (1.2)$$

Dans le cas d'une onde sinusoidale, on retrouve sa longueur d'onde.

- Si Ψ est essentiellement monotone, on cherche dans son spectre de Laplace, le point p_0 autour duquel les composantes sont maximales. Il suffit de prendre alors $l_\Psi = \frac{1}{|\Re(p_0)|}$ où \Re désigne la partie réelle d'un complexe. On peut généraliser :

$$l_\Psi = \frac{\langle |\Psi| \rangle}{\langle \left| \frac{d\Psi}{dx} \right| \rangle} \quad (1.3)$$

- Si Ψ est une densité telle que $x^2\Psi(x)$ soit intégrable sur \mathbb{R}^d . On définit l'échelle caractéristique comme :

$$l_\Psi = \sqrt{\frac{\int_{\mathbb{R}^d} \|x - \bar{x}\|^2 \Psi(x) d^d x}{\int_{\mathbb{R}^d} \Psi(x) d^d x}} \quad (1.4)$$

où le barycentre \bar{x} est déterminé par

$$\bar{x} = \frac{\int_{\mathbb{R}^d} x \Psi(x) d^d x}{\int_{\mathbb{R}^d} \Psi(x) d^d x} \quad (1.5)$$

Dans le cas où Ψ est la densité d'un vecteur aléatoire, \bar{x} est son espérance, et le carré de l'échelle caractéristique l_Ψ^2 est sa variance.

- Dans le cas, très intéressant, où Ψ dépend d'un paramètre α selon

$$\Psi_\alpha(x) = \varphi\left(\frac{x}{\alpha}\right) \quad (1.6)$$

on en tire immédiatement la relation liant les longueurs caractéristiques de Ψ et de φ

$$l_{\Psi_\alpha} = \alpha \cdot l_\varphi \quad (1.7)$$

Echelle d'observation

Il s'agit de l'échelle caractéristique maximale. Son intérêt réside dans le fait qu'elle est l'échelle de description des propriétés du système mais aussi l'échelle caractéristique des contraintes extérieures. Dans le paradigme développé pour l'étude des systèmes critiques, un des enjeux majeurs est de relier les grandeurs exprimées à cette échelle aux variables aléatoires décrivant sa structure aux échelles inférieures.

Echelle minimale

C'est l'échelle des configurations du système. C'est aussi l'échelle de discrétisation du système : on ne distingue plus ce qui est inférieur à cette échelle. Les sous-systèmes constitués par cette discrétisation sont les constituants élémentaires du système global. Ils ne sont pas divisibles, n'ont pas de structure interne et peuvent être assimilés à des points lorsqu'on les observe de loin.

1.1.5 Echelles relatives

On associera désormais et de manière relative les termes microscopique, mésoscopique, et macroscopique aux échelles suivantes :

- *microscopique* à l'échelle minimale a des phénomènes étudiés
- *macroscopique* à la plus grande échelle d'observation L
- *mésoscopique* à l'échelle intermédiaire l telle que $a \ll l \ll L$

1.1.6 Limite thermodynamique et régime asymptotique

La principale caractéristique des phénomènes critiques est, rappelons le, la divergence de la portée des corrélations entre éléments du système. Afin de pouvoir les mettre en évidence, le système doit être formellement adapté au niveau de certaines de ses caractéristiques géométriques pour un système spatialement étendu, et temporel pour un système dynamique.

Limite thermodynamique

Les grandeurs globales seront d'abord ramenées à des grandeurs volumiques, puis passée à la limite $L \rightarrow \infty$ mais à densité constante. Cette opération souvent qualifiée de limite thermodynamique permet d'utiliser les propriétés de symétries d'un système, comme par exemple l'invariance par translation, mais aussi de donner un sens à la notion de divergence des corrélations statistiques.

Dans le cas d'un système spatialement étendu, si d est la dimension de l'espace, on peut montrer que le nombre relatif de constituants impliqués dans des effets de bord varie comme $\frac{1}{L}$. Dans la limite $L \rightarrow \infty$, les effets de bord deviennent donc négligeables.

Régime asymptotique

A l'instar de la limite thermodynamique, le régime asymptotique qualifie l'évolution d'un système dynamique sur un intervalle de temps $[t_0, t_0 + T]$ où t_0 et T doivent être suffisamment grand respectivement pour que le régime permanent ait pu s'installer, et pour que la notion de divergence d'un temps caractéristique ait un sens. De manière analogue aux effets de bord pour les systèmes spatiaux, les conditions initiales perdent leur capacité à perturber le système dès lors que t_0 est grand. En effet, le poids statistique des phénomènes observés pendant $[0, t_0]$ n'influencera pas les moyennes temporelles calculées un tant soit peu que $T \gg t_0$.

Remarque 1.1.1 *Lorsque ces limites ne sont pas atteintes les propriétés des systèmes critiques sont fortement modifiées. On parle alors d'effets de taille finie.*

1.1.7 Lois d'échelle, exposants critiques et paramètres de contrôle

Une loi d'échelle caractérise un comportement en puissance d'une fonction d'état \mathcal{F} d'un système par rapport à une variable x au voisinage d'un point donné $x = x_c$ de la forme $\mathcal{F}(x) \sim A \cdot (x - x_c)^\gamma$. On peut ne plus faire référence à la constante A en écrivant $\mathcal{F}(kx) \sim k^\gamma \mathcal{F}(x)$.

Si x est défini à gauche et à droite de x_c , l'exposant γ peut prendre dans ce cas deux valeurs distinctes γ_- et γ_+ et la loi d'échelle s'exprimera

$$\begin{aligned}\mathcal{F}(x) &\sim A_+ \cdot (x - x_c)^{\gamma_+}, & x \geq x_c \\ \mathcal{F}(x) &\sim A_- \cdot (x_c - x)^{\gamma_-}, & x \leq x_c\end{aligned}\tag{1.8}$$

Il est évident que le point x_c est une singularité, puisque $\frac{d^n \mathcal{F}(x)}{dx^n}$ diverge en x_c dès lors que $\gamma_+ < 1$ ou $\gamma_- < 1$.

Remarque 1.1.2 *On peut généraliser cette définition à des fonctions de plusieurs variables, comme par exemple dans le cas de deux variables : $\mathcal{F}(x, y) \sim A \cdot [(x - x_c)(y - y_c)^{-\beta}]^\gamma$. Dans la pratique, on ne s'intéressera jamais à ce cas, car un phénomène régit par les variations de plusieurs paramètres n'est pas structurellement stable.*

Les systèmes dynamiques exhibent souvent ce type de caractéristiques. En effet, un paramètre contrôle l'état les propriétés statiques, donc a fortiori d'équilibre, un autre contrôlant les propriétés dynamiques, comme le bruit par exemple.

Paramètre de contrôle

Un paramètre de contrôle est par définition une grandeur permettant de modifier les propriétés statiques et dynamiques d'un système sans en être influencé en retour. Bien entendu, le qualificatif "paramètre de contrôle" dépend fortement du modèle choisi, ainsi que de son échelle spatiale ou temporelle. Un paramètre de contrôle est au sens premier un paramètre qui peut être ajusté à l'échelle macroscopique, et qui intervient dans la règle de structure en donnant une mesure de l'importance d'une influence extérieure. Ces paramètres de contrôle sont souvent des grandeurs intensives, comme par exemple la température, la pression, la densité, un champ électrique ou magnétique, une force d'entraînement en hydrodynamique.

Les paramètres internes forment une autre classe de paramètres de contrôle. Ce sont des grandeurs que l'on peut considérer comme constante dès lors que leur évolution temporelle est beaucoup plus lente que celle du phénomène étudié. Dans le cas où leur temps caractéristique est court par rapport à celui du phénomène étudié, on les assimile dans ce cas à leur moyenne temporelle. Des exemples typiques de tels paramètres sont les constantes de couplage, de diffusion. La relation fonctionnelle entre ces paramètres et l'environnement du système est difficile à expliciter. Si bien que ce sont les paramètres internes qui seront les paramètres pertinents et non les paramètres directement réglables.

1.2 Méthodes de renormalisation

1.2.1 Objectifs

Les propriétés d'un système critique $\mathcal{S}(x_c)$ ne sont pas correctement expliquées en prenant la limite $x \rightarrow x_c$ pour un système non critique $\mathcal{S}(x)$. On introduit donc les méthodes de renormalisation pour résoudre ce problème. La difficulté sous-jacente aux systèmes critiques est de comprendre et d'expliquer pourquoi des interactions à courte portée engendrent des phénomènes perceptibles à grande échelle. Dans le paradigme de la physique actuelle, on admet généralement que c'est l'existence de comportements collectifs hiérarchisés depuis les échelles microscopiques jusqu'aux échelles macroscopiques qui est responsable des phénomènes critiques. La hiérarchie impose donc de ne s'intéresser qu'à la manière dont les constituants microscopiques coopèrent et non aux détails de leur constitution. De plus, il est important de relier les différentes échelles entre elles, afin de mettre en évidence d'éventuelles invariances d'échelle.

Limitations des méthodes classiques

On se rend très facilement compte que les approches physiques et mathématiques usuelles échouent pour l'étude des phénomènes critiques. Et ce, pour plusieurs raisons :

- un phénomène critique est caractérisé par une longueur de corrélation ξ divergente, empêchant ainsi une analyse locale
- le fait que le système de taille L est supposé homogène à une échelle $l \ll L$, comme par exemple dans les théories de champ moyen où l'on remplace les interactions entre constituants élémentaires par une interaction externe homogène et indépendante des propriétés statistiques du système, est incompatible avec la divergence de la longueur de corrélation
- on constate par simulation ou expérimentalement que ξ donne la dimension des inhomogénéités microscopiques du phénomène. Si ξ diverge alors, on ne peut traiter perturbativement les fluctuations statistiques depuis une échelle macroscopique qui ne fait intervenir que des valeurs moyennes
- les fonctions d'état ne sont pas analytiques au voisinages d'un point critique. Il est donc impossible d'effectuer un traitement perturbatif. De plus la convergence du développement est de plus en plus lente dès lors que l'on se rapproche du point critique
- pour une fonction d'état $\mathcal{F}_N(x)$ donnée et bien que l'on observe $\lim_{x \rightarrow x_c} \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{F}_N(x)$ et que l'on sait plutôt calculer $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{x \rightarrow x_c} \mathcal{F}_N(x)$, on ne peut intervertir les limites thermodynamiques et critiques (à tous les ordres de dérivation par rapport à x en x_c)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{x \rightarrow x_c} \frac{d^k}{dx^k} \mathcal{F}_N(x) \neq \lim_{x \rightarrow x_c} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{d^k}{dx^k} \mathcal{F}_N(x) \quad , k \in \mathbb{N} \quad (1.9)$$

Algorithmique des méthodes de renormalisation

Les méthodes de renormalisation vont pouvoir quant à elles :

- prouver l'existence de lois d'échelle
- déterminer les exposants critiques
- montrer le caractère universel du phénomène critique et exhiber sa classe d'universalité

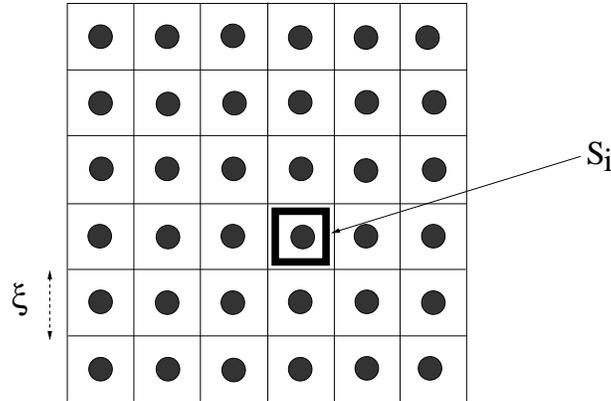


FIG. 1.1 – Système non critique

Pour décrire un système \mathcal{S} à l'échelle macroscopique, les méthodes de renormalisation doivent tout d'abord réduire le nombre de degrés de liberté, qui est *a priori* infini. De plus, la longueur de corrélation ξ étant elle aussi infinie, il n'est pas possible de se contenter d'un échantillon de taille inférieure à ξ .

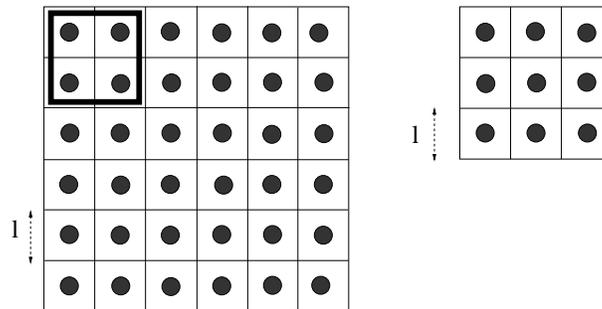


FIG. 1.2 – Système critique agrandi

Afin d'utiliser au mieux l'invariance d'échelle due à la divergence de ξ , on effectue un agrandissement, ou changement de grain (coarse-graining en anglais) : on décompose \mathcal{S} en sous-système emboîtés déductibles les uns des autres par des changements d'échelle. On décrit ainsi le système à une échelle agrandie d'un facteur k . Ce qui permet de diminuer la criticité du système puisque la longueur de corrélation

devient $\frac{\xi}{k}$ et d'augmenter la résolution au voisinage d'une singularité dans l'espace de Fourier.

L'algorithme d'une méthode de renormalisation est décrit comme suit :

1. on explicite l'espace des règles de structure Φ , c'est à dire un sous-ensemble des fonctions φ définies sur l'espace de phase \mathcal{X} du système \mathcal{S}
2. on introduit un opérateur de renormalisation \mathcal{R}_k , $k > 1$, agissant dans l'espace Φ . On préfère étudier la relation, i.e une règle de structure $\varphi \in \Phi$, entre les états du système \mathcal{S} et les données du problème, plutôt que d'étudier l'évolution du système dans l'espace de phase \mathcal{X} . On déplace ainsi l'analyse du système de \mathcal{X} à Φ
3. on réduit en même temps le nombre de degrés de liberté d'un facteur k à l'aide d'une opération de décimation et on modifie la règle de structure $\varphi \in \Phi$. On effectue un changement d'échelle adapté, afin de conserver certains invariants physiques du système (échelle minimale par exemple). On affaiblit ainsi le caractère critique puisque la longueur de corrélation est divisée par k . L'opérateur de renormalisation \mathcal{R}_k doit être conçu de telle manière que l'invariance d'échelle crée une invariance de la règle de structure $\varphi = \mathcal{R}_k \varphi$. Supposons de plus que la règle de structure φ dépende en plus d'un paramètre de contrôle x . Dans ce cas il est très utile de reporter la renormalisation sur ce paramètre x au moyen d'un autre opérateur r_k tel qu'au voisinage de la valeur critique du paramètre $x = x_c$, on ait la relation $\mathcal{R}_k \varphi_x = \varphi_{r_k x}$, amenant ainsi à un autre problème de point fixe $r_k x_c = x_c$.
4. on essaie de prouver l'existence d'un point fixe hyperbolique $\varphi^* \in \Phi$. On renvoie à [3, 19] pour la définition d'un point fixe hyperbolique. Une analyse différentielle au voisinage de ce dernier permet d'explicitier les exposants comme des fonctions du logarithme des valeurs propres du linéarisé de \mathcal{R}_k au voisinage de φ^* , c'est à dire $D\mathcal{R}_k(\varphi^*)$.

1.2.2 Classes d'universalité

L'ensemble des règles de structure convergeant vers le même point fixe est donc une classe d'universalité. Le point fixe φ^* est donc un représentant de cette classe d'universalité et peut être considéré comme un système universel. On verra plus loin qu'une classe d'universalité est du point de vue de la géométrie et du calcul différentiel une variété hyperbolique.

Chapitre 2

Exemple de système critique

L'archétype du système critique est le modèle d'Ising [7, 9]. C'est pourquoi on se propose de concrétiser une méthode de renormalisation sur ce système. Il constitue un excellent modèle de référence en Théorie Quantique et Statistique des Champs [10, 11, 12, 13, 14].

2.1 Modèles d'Ising

2.1.1 Introduction

Les modèles rencontrés en physique statistique sont souvent des modèles sur réseau, comme par exemple les modèles pour l'étude du magnétisme. Le modèle d'Ising est un modèle de spin pour le ferromagnétisme, considéré comme l'archétype des problèmes de transition de phase, permettant de développer rapidement et très simplement une méthode de renormalisation spatiale adaptée aux phénomènes apparaissant à la limite thermodynamique.

Sachant que l'interaction entre spins est à courte portée, l'hamiltonien le plus simple qui tend à les aligner est celui de Heisenberg qualifié de *quantique*.

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \quad (2.1)$$

où J est une constante de couplage positive, les $\{\boldsymbol{\sigma}_i\}$ sont des matrices de Pauli, et le symbole \langle, \rangle indiquant une sommation sur les plus proches voisins.

Il se trouve que les effets quantiques n'ont pas d'influence au voisinage de la température critique à moins que cette dernière ne soit nulle. Il est donc possible de remplacer les matrices de Pauli par des vecteurs classiques $\{S_i\}$ normalisés afin d'obtenir ce qui est communément appelé le modèle de Heisenberg *classique*. Malheureusement ce modèle est encore trop complexe et c'est pourquoi Lenz proposa en 1920 à son étudiant Ising comme sujet de thèse son étude au travers d'une simplification supplémentaire : les vecteurs sont remplacés par des scalaires ne prenant que des valeurs ne pouvant être que ± 1 et considérés comme toujours parallèles à un axe fixe. Ce modèle décrit précisément un système de spins fixés aux noeuds d'un réseau

régulier et en équilibre thermique par rapport à une température $T = \frac{1}{k_B\beta}$. On obtient la valeur physique des spins en multipliant S_i par une constante μ dépendant de la nature physique du spin. On se permet de restreindre le couplage des spins en raison de la faible portée. Puisque les phénomènes critiques dépendent fortement de la dimension du paramètre d'ordre, en l'occurrence la dimension du spin, trois dans le cas de Heisenberg classique, un dans le cas d'Ising, la description quantitative risque d'être peu vraisemblable. On espère seulement des résultats qualitatifs. l'hamiltonien du modèle d'Ising s'écrit donc comme

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j \quad (2.2)$$

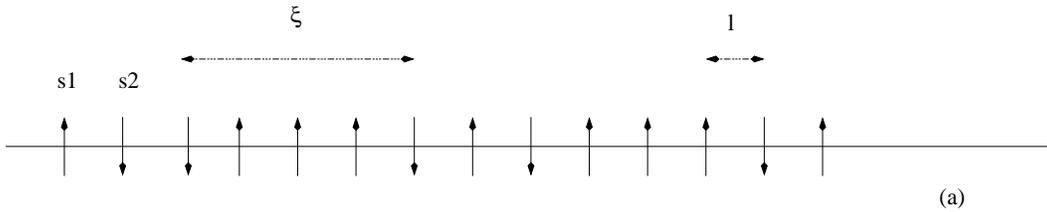


FIG. 2.1 – Modèle d'Ising 1D

Toutefois pour des raisons calculatoires on introduit un champ magnétique sur chaque site du modèle et on se donne la possibilité d'avoir des couplages $\{J_{ij}\}$ différents entre chaque site, ce qui donne

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N J_{ij} S_i \cdot S_j - \sum_{j=1}^N B_j \cdot S_j = -\frac{1}{2} {}^t S \cdot J \cdot S - {}^t B \cdot S \quad (2.3)$$

où on définit

$$\begin{cases} S = (S_1, \dots, S_N) \\ J = \begin{pmatrix} J_{11} & J_{12} & \dots \\ J_{21} & J_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \\ B = (B_1, \dots, B_N) \end{cases}$$

2.1.2 Forme usuelle de la fonction de partition

Dans la théorie des phénomènes critiques, le calcul des exposants critiques s'appuie essentiellement sur le calcul de la fonction de partition. Les quantités pertinentes devant être calculées pour décrire le modèle d'Ising sont donc :

- La fonction de partition ou fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation dans le langage de la théorie quantique des champs, elle s'écrit comme

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta E(\{S_i\})} \quad (2.4)$$

où β est l'inverse de la température.

– L'aimantation sur site

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\{S_i\}} S_i e^{-\beta E(\{S_i\})} \quad (2.5)$$

– La fonction de corrélation à deux points

$$G_{ij} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \quad (2.6)$$

Puisque

$$\frac{\partial Z}{\partial B_i} = \sum_{\{S_i\}} \beta S_i e^{-\beta E(\{S_i\})} \quad (2.7)$$

on en déduit immédiatement que

$$\langle S_i \rangle = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B_i} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln(Z)}{\partial B_i} \quad (2.8)$$

De la même manière,

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j} = \beta^2 \sum_{\{S_i\}} \beta S_i S_j e^{-\beta E(\{S_i\})} \quad (2.9)$$

et donc

$$\langle S_i S_j \rangle = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j} \quad (2.10)$$

On peut donc finalement écrire que

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \\ &= \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B_i \partial B_j} - \frac{1}{\beta^2 Z^2} \frac{\partial Z}{\partial B_i} \frac{\partial Z}{\partial B_j} \\ &= \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln(Z)}{\partial B_i \partial B_j} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle S_j \rangle}{\partial B_i} \end{aligned} \quad (2.11)$$

La fonction de corrélation connexe G_{ij} est donc directement reliée aux dérivées de $\ln(Z)$ que l'on appelle la fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation connexe. On voit que la quantité centrale est la fonctionnelle $Z(\{B_i\})$. Le fait que Z dépend des champs magnétiques empêche d'avoir une approche plus physique car la quantité accessible expérimentalement est l'aimantation. Il faudrait pour cela changer de variables et décrire le système en terme d'aimantation. On y arrive en effectuant une transformation de Legendre qui permet de passer de l'énergie libre $F(\{\langle S_i \rangle\}; \beta) = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(\{B_i\}; \beta))$ au potentiel de Gibbs (ou potentiel thermodynamique) $\Gamma(\{\langle S_i \rangle\}; \beta)$ selon

$$F(\{\langle S_i \rangle\}; \beta) = \Gamma(\{\langle S_i \rangle\}; \beta) + \sum_{j=1}^N B_j \cdot \langle S_j \rangle \quad (2.12)$$

On en tire rapidement quelques relations très utiles

$$\langle S_i \rangle = -\frac{\partial F}{\partial B_i} \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial \langle S_i \rangle} = B_i \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \langle S_i \rangle \partial \langle S_j \rangle} = \frac{\partial B_i}{\partial \langle S_j \rangle} \quad (2.15)$$

Les champs $\{B_i\}$ sont fonction des aimantations $\{\langle S_i \rangle\}$, elles mêmes fonction des champs $\{B_k\}$. On a naturellement

$$\frac{\partial B_i}{\partial B_k} = \delta_{ik} = \sum_j \frac{\partial B_i}{\partial \langle S_j \rangle} \cdot \frac{\partial \langle S_j \rangle}{\partial B_k} \quad (2.16)$$

D'après (2.11)(2.15)

$$\delta_{ik} = \sum_j \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \langle S_i \rangle \partial \langle S_j \rangle} \cdot \frac{\partial \langle S_j \rangle}{\partial B_k} \quad (2.17)$$

D'où l'on tire que

$$G_{ij}^{-1} = \beta \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial \langle S_i \rangle \partial \langle S_j \rangle} \quad (2.18)$$

Cette relation est souvent mise à profit pour calculer à l'aide de sa transformée de Fourier la longueur de corrélation ξ , celle-ci étant définie par

$$G_{ij} \equiv G(\vec{r}_i - \vec{r}_j) = e^{-\frac{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}{\xi}} \quad (2.19)$$

2.1.3 Approximation de champ moyen

On va donc commencer par une approximation assez usuelle en physique statistique : l'approximation de champ moyen. Elle consiste à considérer que les fluctuations des degrés de libertés par rapport à leur valeurs moyennes sont petites. Si on définit δS_i comme $\delta S_i = S_i - \langle S_i \rangle$, on va donc négliger les termes d'ordre deux en δS . Ce qui donne

$$\begin{aligned}
S_i S_j &= (\delta S_i + \langle S_i \rangle)(\delta S_j + \langle S_j \rangle) \\
&\simeq \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle + \delta S_i \langle S_j \rangle + \delta S_j \langle S_i \rangle \\
&\simeq S_i \langle S_j \rangle + S_j \langle S_i \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle
\end{aligned} \tag{2.20}$$

On va pouvoir réécrire l'hamiltonien sous la forme

$$\begin{aligned}
H &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} (S_i \langle S_j \rangle + S_j \langle S_i \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) - \sum_i B_i S_i \\
&= -\sum_i \underbrace{\left(B_i + \sum_j J_{ij} \langle S_j \rangle \right)}_{B_i^{eff}} S_i + \frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Cet hamiltonien est celui d'un système de spins paramagnétiques découplés. La fonction de partition devient donc

$$Z = \sum_{\{S_i\}} e^{-\beta H} = e^{-\frac{\beta}{2} \sum_{ij} J_{ij} \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle} \prod_i Z_i \tag{2.22}$$

où

$$Z_i = \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{\beta B_i^{eff} S_i} = 2 \cosh(\beta B_i^{eff}) \tag{2.23}$$

Finalement, on obtient une équation non-linéaire pour l'aimantation

$$m_i \equiv \langle S_i \rangle = \tanh \left[\beta \left(B_i + \sum_j J_{ij} m_j \right) \right] \tag{2.24}$$

En champ nul, cette relation devient

$$m_i \equiv \langle S_i \rangle = \tanh \left[\beta \sum_j J_{ij} m_j \right] \tag{2.25}$$

La solution $m_i = 0, \forall i$, est triviale, mais il importe de trouver une solution à basse température. Si par exemple on considère un réseau cubique en dimension D avec couplages $J > 0$ entre premiers voisins, alors à température nulle, la configuration de plus basse énergie correspond à une solution d'aimantation uniforme $m_i = \pm 1 \forall i$. Cette aimantation uniforme m doit par conséquent vérifier

$$m = \tanh(\beta 2DJm) \quad (2.26)$$

Cette équation n'a de solution non nulle que si $\beta 2DJ > 1$, ce qui donne donc une température

$$T < T_0 = 2DJ \quad (2.27)$$

L'approximation de champ moyen prédit donc l'existence d'une aimantation spontanée en dessous de T_0 , ce qui nous le verrons plus loin n'est pas valide pour de faibles dimensions.

Calcul du potentiel thermodynamique

On peut inverser (2.24) en

$$B_i = \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} m_i - \sum_j J_{ij} m_j \quad (2.28)$$

ce qui permet de calculer l'énergie libre comme

$$\begin{aligned} F(\beta; \{B_i\}) &= -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta; \{B_i\}) \\ &= \frac{-1}{\beta} N \ln 2 - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln \cosh \left[\beta(B_i + \sum_j J_{ij} m_j) \right] \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \end{aligned} \quad (2.29)$$

Par transformée de Legendre on retrouve le potentiel thermodynamique

$$\begin{aligned} \Gamma(\beta; \{m_i\}) &= F(\beta; \{B_i(m_j)\}) + \sum_i B_i m_i \\ &= \frac{-1}{\beta} N \ln 2 - \frac{1}{\beta} \sum_i \ln \cosh \tanh^{-1}(m_i) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j + \frac{1}{\beta} \sum_i \ln \cosh \tanh^{-1} m_i \\ &- \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j \end{aligned} \quad (2.30)$$

Sachant que $\cosh \tanh^{-1}(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ et que $\tanh^{-1}(x) = \frac{1}{2} \ln \frac{1+x}{1-x}$, on trouve finalement

$$\begin{aligned}\Gamma(\beta; \{m_i\}) &= \frac{-1}{\beta} N \ln 2 + \frac{1}{2\beta} \sum_i \{(1 + m_i) \ln(1 + m_i) + (1 - m_i) \ln(1 - m_i)\} \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} m_i m_j\end{aligned}\quad (2.31)$$

Susceptibilité uniforme Dans le cas des solutions uniformes $m = m_i$, et pour un réseau cubique en dimension D avec interaction $J > 0$ au plus proche voisin, on obtient

$$\begin{aligned}\Gamma(\beta; \{m_i\}) &= \frac{-1}{\beta} N \ln 2 + \frac{N}{2\beta} \{(1 + m) \ln(1 + m) + (1 - m) \ln(1 - m)\} \\ &\quad - NJDm^2\end{aligned}\quad (2.32)$$

Le potentiel de Gibbs par site est donné selon $\gamma(\beta; \{m_i\}) = \Gamma(\beta; \{m_i\})/N$. Un développement limité à l'ordre 4 pour m petit nous donne

$$\gamma(\beta; \{m_i\}) \simeq -T \ln 2 + \frac{m^2}{2}(T - 2JD) + \frac{T}{12}m^4\quad (2.33)$$

autrement dit

$$\gamma(\beta; \{m_i\}) \simeq -T \ln 2 + \frac{m^2}{2}(T - T_0) + \frac{T}{12}m^4\quad (2.34)$$

Lorsque $T < T_0$ il n'y a qu'un seul minimum en $m = 0$. Par contre lorsque $T > T_0$ il y a un minimum deux fois dégénérés, ce qui est donc une transition de phase. La susceptibilité magnétique est donnée par l'expression

$$\chi^{-1} = \left(\frac{\partial B}{\partial m} \right)_{m=0} = \left(\frac{\partial^2 \gamma}{\partial m^2} \right)_{m=0} = T - T_0\quad (2.35)$$

Les raisonnements issus de considérations de lois d'échelle annoncent que la susceptibilité magnétique doit se comporter comme

$$\chi \propto (T - T_0)^{-\gamma}\quad (2.36)$$

On voit que l'approximation du champ moyen nous donne un exposant critique $\gamma = 1$.

Fonction de corrélation

L'approche de champ moyen ne peut être valide que lorsque $\langle \delta S_i \delta S_j \rangle$ est faible. Il est donc nécessaire de déterminer la décroissance de cette fonction spatiale afin de connaître la validité spatiale de l'approximation de champ moyen. Pour ce faire on calcule

$$\langle \delta S_i \delta S_j \rangle = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \equiv G_{ij} \quad (2.37)$$

Ainsi le calcul de la quantité $\langle \delta S_i \delta S_j \rangle$ se fera au travers de celui de la fonction de corrélation qui est reliée au potentiel thermodynamique par

$$\frac{1}{\beta} G_{ij}^{-1} = \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial m_i \partial m_j} \quad (2.38)$$

ce qui se simplifie en

$$T G_{ij}^{-1} = -J_{ij} + \delta_{ij} \frac{1}{2\beta} \left(\frac{1}{1+m_i} + \frac{1}{1-m_i} \right) \quad (2.39)$$

Dans la phase haute température l'agitation thermique détruit l'ordre et $m_i = 0 \forall i$. Ce qui donne donc

$$T G_{ij}^{-1} = -J_{ij} + T \delta_{ij} \quad (2.40)$$

La transformée de Fourier en espace de cette équation donne immédiatement

$$T G^{-1}(\vec{q}) = -2J \sum_{k=1}^D \cos(q_k) + T \quad (2.41)$$

D'où

$$G(\vec{q}) = \frac{T}{T - 2J \sum_{k=1}^D \cos(q_k)} \quad (2.42)$$

La transformée de Fourier inverse en espace nous donne

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \frac{1}{(2\pi)^D} \int_{ZB} d^D \vec{q} G(\vec{q}) e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \\ &= \frac{T}{(2\pi)^D} \int_{ZB} d^D \vec{q} \frac{e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}}{T - 2J \sum_{k=1}^D \cos(q_k)} \end{aligned} \quad (2.43)$$

Ce sont les modes à petite longueur d'onde qui dominent dans cette intégrale, on peut donc l'approcher par

$$G_{ij} \simeq \frac{T}{(2\pi)^D} \int_{ZB} d^D \vec{q} \frac{e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)}}{T - T_0 + Jq^2} \quad (2.44)$$

Considérons le cas $D = 3$, et en posant $\vec{r} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, une intégration en coordonnées sphériques donne

$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &\simeq \frac{T}{(2\pi)^3} \int 2\pi \sin \theta d\theta \int_0^{+\infty} dq q^2 \frac{e^{-iqr \cos \theta}}{\frac{T-T_0}{J} + q^2} \frac{1}{J} \\ &\simeq \frac{T}{J(2\pi)^2} \int_0^{+\infty} dq \frac{q^2}{\xi^{-2} + q^2} \int d\theta \sin \theta e^{-iqr \cos \theta} \end{aligned} \quad (2.45)$$

où $\xi = \sqrt{\frac{J}{T-T_0}}$. Finalement l'intégration en fermant le contour par le haut pour englober le pôle $q = i\xi^{-1}$ amène à

$$G(\vec{r}) = \frac{T}{J} \frac{1}{2\pi} \frac{e^{-r/\xi}}{r} \quad (2.46)$$

ξ est donc interprétée comme une longueur de corrélation. Les lois d'échelle prédisent une loi de puissance pour la longueur de corrélation en $(T - T_0)^{-\nu}$. On trouve donc à l'approximation de champ moyen que $\nu = \frac{1}{2}$.

On voit que $\lim_{|T-T_0| \rightarrow +\infty} \xi = 0$, et que $\lim_{|T-T_0| \rightarrow +\infty} G(\vec{r}) = 0$. On en déduit que loin du point critique, l'approximation de champ donne des résultats corrects. Mais au voisinage du point critique, les spins étant corrélés sur de grandes distances, $G(\vec{r})$ est grand. L'approximation de champ moyen est mise en défaut sur cette prédiction et est donc mauvaise.

2.1.4 Fonction de partition sous forme d'intégrale de chemin

Le calcul de la fonction de partition n'est en général pas du tout trivial. Sous sa forme usuelle, la fonction de partition ne permet pas de développer naturellement une méthode permettant de raffiner les corrections vis à vis des approximations de départ. On peut cependant le faire de manière systématique en écrivant la fonction de partition sous forme d'intégrale fonctionnelle.

Afin de simplifier les notations, on pose

$$\left\{ \begin{array}{l} A = \beta J \\ C = \beta B \\ Z = \sum_{\{S\}} e^{\frac{1}{2} \sum S \cdot A \cdot S + \sum C \cdot S} \end{array} \right. \quad (2.47)$$

On va utiliser l'intégrale gaussienne pour ramener cette expression à une expression linéaire en \mathbf{S} , ce qui devrait permettre de faire aboutir la somme sur les différentes configurations. Pour cela on utilise le fait que

$$e^{\frac{1}{2}tS \cdot A \cdot S} = \frac{1}{Z(0)} \int \prod_{i=1}^N dx_i e^{-\frac{1}{2}t x \cdot A^{-1} \cdot x + t S \cdot x} \quad (2.48)$$

avec

$$Z(0) = (2\pi)^{\frac{N}{2}} \frac{1}{\sqrt{\det A^{-1}}} = (2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det A} \quad (2.49)$$

ce qui donne donc

$$Z = \sum_{\{\mathbf{S}\}} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det A}} \int \prod_{i=1}^N dx_i e^{-\frac{1}{2}t x \cdot A^{-1} \cdot x + t S \cdot x + t S \cdot C} \quad (2.50)$$

Le changement de variables $\varphi := x + C$ permet de réécrire cette relation

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det A}} e^{-\frac{1}{2}t C \cdot A^{-1} \cdot C} \int \prod_{i=1}^N d\varphi_i e^{-\frac{1}{2}t \varphi \cdot A^{-1} \cdot \varphi + t C \cdot A^{-1} \cdot \varphi} \cdot \sum_{\{\mathbf{S}\}} e^{t S \cdot \varphi} \quad (2.51)$$

La somme discrète peut être aisément calculée

$$\begin{aligned} \sum_{\{\mathbf{S}\}} e^{t S \cdot \varphi} &= \sum_{\substack{S_1 = \pm 1 \\ S_2 = \pm 1 \\ \vdots}} e^{S_i \varphi_i} = \prod_i \sum_{\{S_i = \pm 1\}} e^{S_i \varphi_i} \\ &= \prod_i (e^{\varphi_i} + e^{-\varphi_i}) \end{aligned} \quad (2.52)$$

$$= \prod_i \cosh(\varphi_i) \quad (2.53)$$

$$= 2^N \prod_i \cosh(\varphi_i) \quad (2.54)$$

Ainsi, la fonction de partition peut s'écrire

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det A}} e^{-\frac{1}{2}t C \cdot A^{-1} \cdot C} \int \prod_{i=1}^N d\varphi_i e^{-\frac{1}{2}t \varphi \cdot A^{-1} \cdot \varphi + t C \cdot A^{-1} \cdot \varphi} \cdot 2^N \prod_i \cosh(\varphi_i) \quad (2.55)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det A}} e^{-\frac{1}{2}t C \cdot A^{-1} \cdot C} \int \prod_{i=1}^N d\varphi_i e^{-\frac{1}{2}t \varphi \cdot A^{-1} \cdot \varphi + t C \cdot A^{-1} \cdot \varphi - U(\varphi)} \quad (2.56)$$

$$(2.57)$$

avec $U(\varphi) = -N \ln(2) - \sum_i \ln \cosh(\varphi_i)$. En utilisant la définition 2.47, on obtient finalement

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det {}^t \beta J}} e^{-\frac{\beta}{2} B^t \cdot J^{-1} \cdot B} \int \prod_{i=1}^N d\varphi_i e^{-\frac{1}{2} t \varphi \cdot A^{-1} \cdot \varphi + t C \cdot A^{-1} \cdot \varphi - U(\varphi)} \quad (2.58)$$

Cette expression est analogue à celle d'un propagateur euclidien sur un réseau de dimension 1 où le champ serait φ . En utilisant le formalisme bien connu des intégrales de chemin, on peut écrire une expression plus synthétique pour la fonction de partition du modèle d'Ising

$$Z \propto \int \mathcal{D}\varphi e^{-\mathcal{S}[\varphi]} \quad (2.59)$$

où l'action \mathcal{S} s'écrit sous forme d'intégrale numérique

$$\mathcal{S}[\varphi] = \int d^d \vec{r} \mathcal{L}[\varphi] \quad (2.60)$$

2.1.5 Approximation du col

L'action précédemment trouvée s'écrit comme

$$\mathcal{S}[\varphi] = \frac{1}{2\beta} \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} \varphi_i \varphi_j - \sum_{i,j} J_{ij}^{-1} B_i \varphi_j - \sum_i \ln \cosh(\varphi_i) - N \ln(2) \quad (2.61)$$

Soit $\bar{\varphi}_i$ le point-selle de l'action, i.e la solution de l'équation suivante

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial \varphi_i} = \frac{1}{\beta} \sum_j J_{ij}^{-1} \varphi_j - \sum_j J_{ij}^{-1} B_j - \tanh \varphi_i = 0 \quad (2.62)$$

Un développement d'ordre 1 autour de $\bar{\varphi}$ permet d'écrire

$$Z = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} \sqrt{\det {}^t \beta J}} e^{-\frac{\beta}{2} B \cdot J^{-1} \cdot B} e^{-\mathcal{S}[\bar{\varphi}]} \quad (2.63)$$

A une constante près sans importance, on a

$$\ln Z = -\frac{\beta}{2} B \cdot J^{-1} \cdot B - \frac{1}{2\beta} t \bar{\varphi} J^{-1} \bar{\varphi} + t B \cdot J^{-1} \cdot \bar{\varphi} + U(\bar{\varphi}) \quad (2.64)$$

En insérant (2.62), on arrive à

$$\ln Z = -\frac{1}{2\beta} t (\bar{\varphi} + \beta B) \cdot J^{-1} \cdot (\bar{\varphi} + \beta B) - U(\bar{\varphi}) \quad (2.65)$$

On peut maintenant calculer l'aimantation qui est la valeur moyenne donnée par

$$m_i = \langle S_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B_i} \quad (2.66)$$

$$= - \sum_j J_{ij} B_j + \frac{1}{\beta} \sum_j J_{ij}^{-1} \overline{\varphi}_i \quad (2.67)$$

$$= \tanh(\overline{\varphi}_i) \quad (2.68)$$

Ce qui implique nécessairement que

$$B_i = \frac{1}{\beta} \tanh^{-1} m_i - \sum_j J_{i,j} m_j \quad (2.69)$$

On retrouve là les équations de champ moyen.

2.2 Analyse par renormalisation

2.2.1 Singularités critiques de la limite thermodynamique

On a vu précédemment (1.9) que des limites thermodynamiques peuvent présenter des singularités aux points critiques. Pour déterminer la dépendance des fonctions thermodynamiques, de la longueur de corrélation à la température et aux constantes de couplage, et ainsi en déduire leurs éventuelles singularités, on transfère la limite $N \rightarrow \infty$ dans l'itération d'une transformation de l'hamiltonien en s'appuyant sur l'autosimilarité des systèmes de N et de N/k spins. On va donc ramener un système de N spins à un système "apparent" de N/k spins, mais de paramètres "renormalisés", i.e modifiés pour prendre en compte l'influence des spins réels n'intervenant plus explicitement.

2.2.2 Décimation

On divise le système de N_0 spins en $N_1 = N_0/k$ blocs de k spins voisins puis on moyenne localement dans chaque bloc afin d'assimiler ce dernier à un superspin. Le facteur k peut être quelconque, on le choisit en général en fonction des symétries du système. On obtient l'hamiltonien des N_1 spins effectifs à partir d'une transformation de l'hamiltonien des N_0 spins réels. Un changement d'échelle des longueurs et des amplitudes des spins permet de conserver les densités et échelles minimales, c'est à dire les invariants physiques du système. De plus la procédure doit conserver la fonction de partition du système afin de préserver les propriétés thermodynamiques du système.

La renormalisation ne doit pas modifier la nature du système mais seulement la perception que nous avons de sa structure interne avant et après renormalisation.

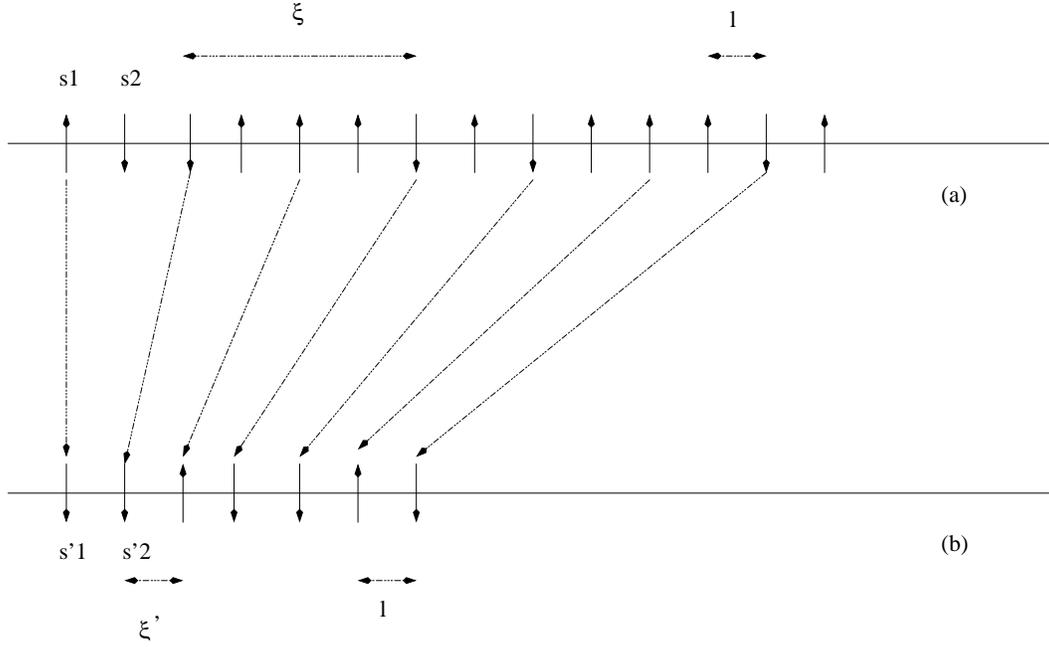


FIG. 2.2 – Modèle d'Ising 1D avant (a) et après renormalisation (b)

2.2.3 Equations de renormalisation

On pose $K_i = \beta_i J$ et on prendra $k = 2$. La décimation peut aussi être vue comme une trace partielle de la fonction de partition $Z(N_0, K_0)$ sur les spins d'indice impair, où l'on va constituer un superspin à partir du couple de spin (S_{2i}, S_{2i+1}) . Il s'agit d'une moyenne locale sur les spins d'indice impair.

$$Z(N_0, K_0) = \sum_{[S_{2j}]_{0 \leq j < N_1}} \sum_{[S_{2j+1}]_{0 \leq j < N_1}} e^{K_0 S_{2j+1} (S_{2j} + S_{2j+2})} \quad (2.70)$$

On contracte les longueurs du facteur $k = 2$ afin de conserver l'échelle minimale, en l'occurrence le pas du réseau. De plus, la conservation de la densité de spins force à avoir $|S'_j| = |S_{2j}| = 1$. Les calculs se simplifient en utilisant le fait que les spins ne peuvent prendre que les valeurs ± 1

$$\sum_{S_i} e^{K_0 (S_{i-1} S_i + S_i S_{i+1})} = e^{2K_1} e^{K_1 S_{i-1} S_{i+1}} \quad (2.71)$$

avec $\tanh K_1 = (\tanh K_0)^2$.

On remarque ainsi que l'hamiltonien des configurations décimées a la même structure que l'hamiltonien initial. La renormalisation se traduit simplement par une évolution des constantes de couplage K_i . Elle s'exprime donc dans la transformation des constantes de couplage au travers de l'équation $\tanh r(K) = (\tanh K)^2$ où r est l'opérateur de renormalisation agissant sur la constante de couplage K . Ainsi par itération on obtient

$$Z(N_0, K_0) = C^{N_1} Z(N_1, K_1) \quad (2.72)$$

où $C = 2e^{K_1} = 2\sqrt{\cosh 2K_0}$ et $N_1 = N_0/2$.

La distribution de probabilité est conservée par renormalisation car la probabilité marginale de $\{S'\}$ déduite de $p(N_0, K_0, \{S_i\})$ coïncide avec $p(N_1, K_1, \{S'_i\})$

$$p(N_1, K_1, \{S'_i\}) = \sum_{[S_{2j+1}]_{0 \leq j < N_1}} p(N_0, K_0, \{S_i\}) \quad (2.73)$$

Il est à noter que la constante C ne joue aucun rôle dans les propriétés thermodynamiques du système de spins puisqu'elle est indépendante des configurations du système.

2.2.4 Analyse et résultats

Dans la procédure de renormalisation, on vient de réaliser deux choses :

1. on a réduit le nombre de degrés de liberté N_0 par le facteur k , ce qui a permis d'atteindre la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$ en la transférant dans l'action d'un opérateur agissant dans l'espace des règles de structure.
2. on a contracté la longueur de corrélation apparente d'un facteur k , ce qui a affaibli la criticité du système.

Les systèmes autosimilaires sont donc les points fixes de l'équation $r(K) = K$. Les solutions sont donc $K^* = 0$ ou $K^* = \infty$.

$K^* = 0$:

Ce point est stable puisque $r'(0) = 0$. On peut donc considérer de manière équivalente soit $J = 0$ et $T < \infty$, soit $J > 0$ et T est infini. Dans cette dernière version, on peut comprendre que les couplages déterministes sont détruits par l'agitation thermique. Il n'existe donc à l'échelle du pas du réseau aucun couplage direct pouvant organiser directement les fluctuations thermiques. On peut calculer l'aimantation moyenne par spin et on trouve que $m_i = 0, \forall i$. On a donc un système uniquement thermique, sans magnétisme. Il s'agit là de l'archétype du système non-critique obtenu par renormalisation d'un système non-critique.

Un développement de la fonction $r(K)$ au voisinage du point fixe $K^* = 0$ donne

$$r(K) \sim K^2 \quad (2.74)$$

On obtient immédiatement pour la longueur de corrélation

$$\xi(r(K)) = \xi(K^2) = \frac{\xi(K)}{2} \quad (2.75)$$

ce qui donne donc $\xi(K) \sim \frac{a}{|\log K|}$.

$K^* = \infty$:

Il n'y a pas d'agitation thermique puisque la température T^* est nulle. Ce qui oblige le système à être gelé dans une des deux configurations où tous les spins sont alignés, car elles sont d'énergie minimale. De toute façon les autres configurations sont exclues puisque leur facteur de Boltzmann respectif est nul. Finalement l'état du système n'est plus aléatoire. Ce qui s'exprime par la divergence de la longueur de corrélation. On a donc bien un point fixe qui est par ailleurs instable sous l'action de r car celle-ci est contractante. Cela traduit le fait que la renormalisation diminue la criticité. On peut effectuer un développement limité au voisinage de $K^* = \infty$:

$$r(K) \sim K - \frac{\log(2)}{2} + \dots \quad (2.76)$$

$$\xi(r(K)) = \xi\left(K - \frac{\log(2)}{2}\right) = \frac{\xi(K)}{2} \quad (2.77)$$

d'où l'on tire que $\xi(K) \sim ae^{2K}$ et qu'il diverge à l'infini. De plus, comme on le verra plus loin, puisque $r'(K^* = \infty) = 1$, $K^* = \infty$ un point fixe marginalement stable.

Remarque 2.2.1 *Pour compléter notre propos, on pourrait effectuer la même procédure de renormalisation à partir de l'écriture sous forme d'intégrale de chemin de la fonction de partition et en l'écrivant à l'aide d'une mesure fonctionnelle dans l'espace de Fourier.*

Deuxième partie

Aspects mathématiques des méthodes de renormalisation

Chapitre 3

Analyse linéaire

On montre dans ce chapitre comment les outils mathématiques de l'analyse linéaire, c'est à dire de la géométrie différentielle sur des variétés permettent de mieux comprendre le lien entre les lois d'échelle et les opérateurs de renormalisation [15, 16, 19].

3.1 Opérateurs de renormalisation dans l'espace réel

La renormalisation est le plus souvent conçu dans l'espace réel, où son interprétation physique et géométrique est plus évidente. La construction de \mathcal{R} est plus simple car guidée par la configuration géométrique et l'autosimilarité de ses points fixes. L'autre intérêt réside dans la possibilité d'effectuer des simulations numériques utilisant un grand nombre de configurations du système aléatoires et indépendantes. L'analyse statistique de ces configurations renormalisées un certain nombre de fois permet d'explicitier l'action du même nombre d'itérés de \mathcal{R} sans d'autres erreurs que les erreurs statistiques.

3.1.1 Objectifs

On a vu que la renormalisation est introduite afin de rendre compte quantitativement des propriétés singulières d'une grandeur macroscopique $X(\theta)$ à grande échelle spatiale ou temporelle d'un système physique \mathcal{S} pour lequel le paramètre de contrôle θ tend vers une valeur critique θ_c .

On aimerait remplacer les relations suivantes

$$\lim_{\theta \rightarrow \theta_c} X(\theta) = \infty \text{ ou } \lim_{\theta \rightarrow \theta_c} X(\theta) = 0 \text{ ou } \lim_{\theta \rightarrow \theta_c} X(\theta) = X_c \quad (3.1)$$

par des lois d'échelle :

– Si $0 < X_c < \infty$

$$\gamma^\pm = \lim_{\theta \rightarrow \theta_c \pm 0} \frac{\log |X(\theta) - X_c|}{\log |\theta - \theta_c|} \quad (3.2)$$

– Si $X_c = \infty$

$$\gamma^\pm = \lim_{\theta \rightarrow \theta_c \pm 0} \frac{\log |X(\theta)|}{\log |\theta - \theta_c|} \quad (3.3)$$

où les γ^\pm sont les exposants critiques.

La renormalisation \mathcal{R} va s'appuyer sur la connaissance qualitative du phénomène, c'est à dire une conjecture sur la forme de la loi d'échelle, pour que les points fixes de \mathcal{R} correspondent à des systèmes autosimilaires vérifiant exactement les lois d'échelle. Par exemple si on conjecture que $X(\theta) \sim |\theta|^\gamma$ si $\theta \rightarrow \theta_c = 0$, on introduit dans ce cas l'opérateur $\mathcal{R}_{b,K}$, tel que si \mathcal{S} est décrit par $X(\theta)$, alors $\mathcal{R}_{b,K}\mathcal{S}$ est décrit par $K^{-1}X(b\theta)$.

La renormalisation va débiter par une sommation par paquets ayant le même effet que celui d'une décimation en réduisant d'un facteur n le nombre N de constituants élémentaires pour caractériser le fait que le système critique est organisé à toutes les échelles. Les degrés de liberté du système peuvent être

- spatiaux, comme souvent en physique statistique des systèmes à l'équilibre. Si a est la résolution, alors l'extension linéaire de \mathcal{S} est donnée par $L = N^{1/d}a$ en dimension d . En prenant pour sous-système élémentaire de $\mathcal{R}_k\mathcal{S}$ une cellule de volume $(ka)^d$, alors \mathcal{R}_k réduit N d'un facteur k^d . Une contraction des longueurs (ou des temps) d'un facteur k va ensuite permettre de conserver la résolution apparente. En effet, on ne peut comparer des systèmes que pour la même résolution. L'action de \mathcal{R}_k va ainsi affaiblir le caractère critique apparent de \mathcal{S} en réduisant d'un facteur k la portée des corrélations statistiques dans le système renormalisé.
- temporels comme pour les systèmes dynamiques. On se donne une durée d'observation $T = N\tau$ tendant vers l'infini pour que le régime asymptotique soit atteint et où le nombre de pas temporels τ est N . \mathcal{R}_k réduit aussi N d'un facteur k .
- spatio-temporels comme pour les phénomènes critiques dynamiques ou les problèmes de diffusion. Dans ce cas, la renormalisation doit réduire conjointement L et T selon $L \mapsto L/k$ et $T \mapsto T/k^\alpha$. On doit trouver la valeur de α au travers des lois liant les échelles spatiales aux échelles temporelles correspondantes $\tau(\lambda) \sim \lambda^\alpha$, et au travers de l'action itérée de \mathcal{R}_k .

Rappelons que la renormalisation doit s'accompagner d'une transformation de la règle de structure $\phi \mapsto \mathcal{R}_k\phi$. Cette opération permet de compenser la perte d'information sur les très petites échelles dues à la sommation par paquets et au changement de résolution $a \mapsto ka$ qu'elle induit dans le système initial. Ainsi $\mathcal{R}_k\phi$ va dépendre des corrélations statistiques à courte portée $l < ka$, internes à un constituant élémentaire du système renormalisé. Au fur et à mesure des itérations de \mathcal{R}_k on implique de plus en plus de corrélations.

Enfin, on essaie de reporter l'action de \mathcal{R}_k sur les fonctions d'état X de \mathcal{S} . Pour ce faire, deux voies sont possibles, on reporte l'action de \mathcal{R}_k :

- soit sur des quantités qui se déduisent de la règle de structure ϕ et expriment plus directement ses conséquences sur le comportement global de \mathcal{S} . Par exemple, la mesure invariante associée à une loi d'évolution. Les probabilités sont accessibles aux expérimentateurs ou aux numériciens au travers de leurs moments, rendant ainsi le transfert de la renormalisation sur la description statistique particulièrement avantageuse.
- soit sur une famille de coefficients $[K]$ paramétrant la règle de structure, ce qui transforme des équations de renormalisation fonctionnelles en équations algébriques. Cependant, les renormalisations successives risquent dans la majorité des cas d'augmenter à chaque itération la dimension du vecteur des paramètres. On est alors amené à effectuer des troncatures afin de pouvoir résoudre un système d'équations de dimension finie et soluble.

3.2 Opérateurs de renormalisation dans l'espace conjugué

L'étude analytique de la renormalisation peut s'effectuer dans l'espace de Fourier, l'espace conjugué.

3.2.1 Objectifs

Plusieurs arguments justifient et caractérisent l'utilisation du groupe de renormalisation dans l'espace de Fourier

- La discrétisation d'un champ quelconque $\psi(\vec{x})$ de l'espace réel par une résolution finie a conserve le caractère continu du champ conjugué $\psi(\vec{q})$, mais limite son support en fréquence. Ce qui s'exprime par le fait que $\psi(\vec{q})$ est continu dans $\{q \leq \Lambda \sim \frac{2\pi}{a}\}$.
- Le facteur d'échelle spatial $k \geq 1$ de \mathcal{R}_k pourra varier continûment, ce qui fait de $\{\mathcal{R}_k, k \geq 1\}$ un semi-groupe de Lie dont il suffit d'analyser le générateur infinitésimal $(\frac{d\mathcal{R}_k}{dk})_{k=1}$.
- La renormalisation écarte directement les mécanismes et les structures d'échelle plus petite que l'échelle minimale a car ces derniers sont associés aux modes tels que $q > \Lambda$. Mais elle conserve une trace de leur influence dans des paramètres effectifs ou éventuellement dans un terme stochastique.
- Lors de la sommation par paquet, il est souvent délicat d'essayer de séparer les dépendances spatiales suivant les échelles dans l'espace réel, alors que dans l'espace conjugué elle est immédiate. En effet, la décimation dans l'espace de Fourier correspond simplement à une partition $\{q \leq \frac{\Lambda}{k}\} \cup \{q > \frac{\Lambda}{k}\}$. La trace partielle correspond quant à elle à une intégration des modes $\{q > \frac{\Lambda}{k}\}$ dans des paramètres renormalisés.

- Lorsque la statistique microscopique du système est homogène, les modes $\psi(\vec{q})$ sont de covariances nulles. Ce qui s'exprime comme

$$\langle \psi(\vec{q})\psi(\vec{q}') \rangle = 0, \text{ si } \vec{q} \neq \vec{q}' \quad (3.4)$$

Ce résultat peut être utilisé pour découpler dans le calcul d'une fonction d'état les modes éliminés par la renormalisation, i.e $q > \frac{\Lambda}{k}$ que l'on notera $\psi_{\Lambda}^{>}(\vec{q})$, des modes conservés $q \leq \frac{\Lambda}{k}$ que l'on notera $\psi_{\Lambda}^{<}(\vec{q})$:

$$\int \mathcal{D}\psi(\vec{q}) = \int \mathcal{D}\psi^{<}(\vec{q}) \int \mathcal{D}\psi^{>}(\vec{q}) \quad (3.5)$$

En termes de moyennes statistiques ce résultat s'exprimera sous la forme

$$\begin{aligned} \langle \cdot \rangle_{\psi(\vec{q})} &= \langle \cdot \rangle_{\psi^{<}(\vec{q})} \langle \cdot \rangle_{\psi^{>}(\vec{q})} \\ &= \langle \cdot \rangle_{\psi^{>}(\vec{q})} \langle \cdot \rangle_{\psi^{<}(\vec{q})} \\ &= \langle \cdot \rangle_{\psi^{<}(\vec{q})} \langle \cdot \rangle_{\psi^{>}(\vec{q})} \end{aligned} \quad (3.6)$$

Si de plus la statistique microscopique est isotrope, $\psi(\vec{q}) = \psi(q)$, la nullité des covariances implique que

$$\int d^d(\vec{q}) f(q) = \frac{2\pi^{\frac{d}{2}}}{\Gamma(\frac{d}{2})} \int_0^{\infty} d(q) f(q) \quad (3.7)$$

La dimension n'est donc qu'un simple paramètre et il est alors possible d'effectuer un développement perturbatif autour d'une dimension particulière d^* où la solution est connue et maîtrisée, en posant $\epsilon = d - d^*$. C'est ce que l'on dénomme le développement en ϵ .

3.3 Transfert de limites

Il est très important de rappeler que la renormalisation ne doit pas modifier la nature d'un système physique, mais seulement la perception qu'en a l'observateur. Elle doit donc satisfaire

$$X\left(\frac{N}{k}, \mathcal{R}_k \phi\right) = R_k X(N, \phi) \quad (3.8)$$

où ϕ est la règle de structure du système .

Si on définit un opérateur \mathcal{T}_k par

$$\mathcal{T}_k X(\cdot, \phi) = R_k^{-1} X(\cdot, \mathcal{R}_k \phi) \quad (3.9)$$

on peut réécrire la relation précédente comme

$$X(N) = \mathcal{T}_k X\left(\frac{N}{k}\right) \quad (3.10)$$

Par itération, on exprime la relation de dépendance entre N et X ,

$$\forall N_0, p \in \mathbb{N}, X(k^p N_0, \phi) = R_k^{-p} X(N_0, \mathcal{R}_k^p \phi) = \mathcal{T}_k^p X(N_0, \phi) \quad (3.11)$$

Ce qui va permettre de transférer la limite thermodynamique sur l'itération de \mathcal{T}_k :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} X(N, \phi) = \lim_{p \rightarrow \infty} R_k^{-p} X(N_0, \mathcal{R}_k^p \phi) = \lim_{p \rightarrow \infty} \mathcal{T}_k^p X(N_0, \phi) \quad (3.12)$$

Ainsi plutôt que d'étudier la dépendance asymptotique de X en fonction de N , on s'intéresse à la dépendance de X en fonction du flot asymptotique engendré par \mathcal{T}_k dans l'espace fonctionnel des fonctions d'état X . L'interprétation physique de la renormalisation nous assure que

$$R_{k_1} \circ R_{k_2} = R_{k_1 k_2} \text{ et } \mathcal{R}_{k_1} \circ \mathcal{R}_{k_2} = \mathcal{R}_{k_1 k_2} \quad (3.13)$$

Ce qui implique que

$$R_k^p = R_{k^p} \text{ et } \mathcal{R}_k^p = \mathcal{R}_{k^p} \quad (3.14)$$

On peut donc reprendre (3.12)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} X(N, \phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} R_N^{-1} X(N_0, \mathcal{R}_N^p \phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{T}_N X(N_0, \phi) \quad (3.15)$$

3.3.1 Points fixes et variétés critiques

On vient de voir que la renormalisation d'un système revient à étudier l'action d'un opérateur fonctionnel dans l'espace des règles de structure Φ , en ne s'intéressant qu'aux comportements asymptotiques des trajectoires $\{\mathcal{R}^p \phi, \phi \in \Phi, p \in \mathbb{N}\}$. La procédure étant itérative, le rôle des éventuels points fixes est particulièrement important. Par construction des opérateurs de renormalisation, ils correspondent à des systèmes autosimilaires dont la règle de structure ϕ^* décrit les propriétés du système à toutes les échelles, y compris celle de la limite thermodynamique puisque $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{R}^n \phi^* = \phi^*$. Les propriétés caractérisant un tel point fixe $\phi^* \in \Phi$ sont données ci-dessous :

- le point fixe ϕ^* possède des directions stables, c'est à dire des trajectoires faisant converger ϕ vers ϕ^* , dont la variété associée, dite variété critique, est constituée de tous les systèmes critiques convergent eux aussi vers ϕ^* .

- le point fixe possède des directions instables, rendant ainsi l'itéré d'un système moins critique que le système initial, et l'éloignant ainsi du point fixe.

L'équation de point fixe permet ainsi d'écrire pour la longueur de corrélation $\mathcal{R}\phi^* = \phi^* \Rightarrow \xi(\phi^*) = \xi(\mathcal{R}\phi^*) = \xi(\frac{\phi^*}{k})$. On en déduit que la longueur de corrélation au point critique ne peut prendre que deux valeurs $\xi(\phi^*) = 0$ pour un point fixe associé à un système non critique et $\xi(\phi^*) = \infty$ pour un point fixe critique.

Remarque On ne se préoccupera pas dans la suite de la situation où l'opérateur de renormalisation ne possède pas de points fixes marginaux, i.e ayant des directions de valeurs propres de module unité. On qualifiera ce point fixe de point fixe hyperbolique.

3.3.2 Analyse linéaire

Points fixes et directions propres

On décompose la règle de structure $\phi \in \Phi$ en

$$\phi = \phi^* + \sum_j c_j(\phi)e_j, \text{ et } D\mathcal{R}(\phi^*) \cdot e_j = \lambda_j e_j, \text{ où } e_j \in \Phi \quad (3.16)$$

Les directions e_j sont donc les directions propres de la différentielle de \mathcal{R} en ϕ^* . Les composantes stables correspondent à $|\lambda_j| < 1$, les composantes instables $|\lambda_j| > 1$ et les composantes marginales à $|\lambda_j| = 1$.

On voit immédiatement que les composantes dites stables ou inessentiels seront réduites après itérations

$$\lim_{n \rightarrow \infty} D\mathcal{R}(\phi^*)^n \cdot [c_j(\phi)e_j] = 0 \text{ car } |\lambda_j| < 1 \quad (3.17)$$

Définissons précisément la notion de variété critique. On la notera \mathcal{V}_s et elle est définie par

$$\mathcal{V}_s = \{\phi \in \Phi, \lim_{n \rightarrow \infty} \mathcal{R}^n \phi = \phi^*\} \quad (3.18)$$

Dans le cas où une règle de structure appartient à cette variété, le comportement macroscopique du système est critique bien évidemment mais aussi universel.

Les perturbations n'ayant que des composantes inessentiels ne vont pas modifier la classe d'universalité du système. Les directions instables ou pertinentes (ou encore essentielles) quant à elles, correspondent à des aspects du phénomène, sélectionnés et amplifiés par la renormalisation. Une perturbation peut donc faire changer le système de classe d'universalité. Elles influenceront directement les grandeurs critiques.

Pour un point fixe hyperbolique, un théorème de redressement de flot assure l'équivalence entre le flot engendré par l'opérateur linéarisé au voisinage de ϕ^* , $D\mathcal{R}$, et l'opérateur originel \mathcal{R} .

Points fixes et valeurs propres

Montrons maintenant qu'un ensemble d'opérateurs de renormalisation et sans directions marginales ont tous le même point fixe. Pour ce faire soit $\mathcal{G} = \{\mathcal{R}_k\}_{k \in \mathcal{K}}$ avec $\mathcal{K} \subset]0, \infty[$, une famille d'opérateurs de renormalisation paramétrée par le facteur d'échelle k . On a vu précédemment que la cohérence physique de ces opérateurs imposait une structure de semi-groupe au travers d'une loi de composition interne définie par

$$\mathcal{R}_k \circ \mathcal{R}_{k_0} = \mathcal{R}_{kk_0} \quad \forall k, k_0 \in \mathcal{K} \quad (3.19)$$

Ce qui implique que \mathcal{R}_{k_0} et \mathcal{R}_k commutent $\forall k, k_0 \in \mathcal{K}$ et montre que $\phi^* \in \Phi$ et $\mathcal{R}_k \phi^*$ sont simultanément des points fixes de \mathcal{R}_{k_0} . Ainsi, si un seul opérateur du semi-groupe \mathcal{G} admet un point fixe ϕ^* dans Φ alors celui-ci est point fixe de tous les autres opérateurs de \mathcal{G} .

Si on considère maintenant que \mathcal{G} est un groupe continu, c'est à dire que l'on prend $\mathcal{K} =]0, \infty[$, un point fixe ϕ^* commun à deux opérateurs $\mathcal{R}_a, \mathcal{R}_b \in \mathcal{G}$, $a, b \in \mathbb{Z}$, est aussi point fixe de $\mathcal{R}_{a^nb^m}$, $\forall n, m \in \mathbb{Z}$.

De plus, $\mathbb{Z} \log(a) + \mathbb{Z} \log(b)$ est dense dans $\mathbb{R} = \{\log(k), k \in \mathcal{K}\}$, on en déduit par continuité que ce point fixe ϕ^* est aussi point fixe de tout $\mathcal{R}_k, k \in \mathcal{K}$. Puisque ϕ^* est point fixe de tous les éléments de \mathcal{G} , on peut linéariser la loi de composition interne de celui-ci autour de ϕ^* :

$$D\mathcal{R}_{k_1}(\phi^*) \circ D\mathcal{R}_{k_2}(\phi^*) = D\mathcal{R}_{k_2}(\phi^*) \circ D\mathcal{R}_{k_1}(\phi^*) = D\mathcal{R}_{k_1 k_2}(\phi^*), \quad \forall k_1, k_2 \in \mathcal{K} \quad (3.20)$$

$D\mathcal{R}_{k_1}(\phi^*)$ et $D\mathcal{R}_{k_2}(\phi^*)$ commutent, et admettent donc les mêmes vecteurs propres, indépendants de $k_1, k_2 \in \mathcal{K}$. On obtient de suite que les valeurs propres $\lambda_j(k_1)$ et $\lambda_j(k_2)$ vérifient

$$\lambda_j(k_1)\lambda_j(k_2) = \lambda_j(k_1 k_2) \quad (3.21)$$

Dans les cas particuliers où $\mathcal{K} = \{k_0^n, n \in \mathbb{N}\}$ ou bien $\mathcal{K} = [1, \infty[$, elles s'écrivent comme $\lambda_j(k) = k^{\gamma_j}$, avec $k \in \mathcal{K}$ et $\gamma_j \in \mathbb{C}$ en général.

Un autre cas de figure intéressant est celui où un des opérateurs $\mathcal{R} \in \mathcal{G}$ admet un ensemble de points fixes paramétré par un réel a , $\{\phi_a^*\}_{a \in \mathbb{R}}$. Dans ce cas $(\partial_a \phi_a^*)_{a=a_0}$ est un vecteur propre de $D\mathcal{R}(\phi_{a_0}^*)$ avec la valeur propre 1.

Dans le cas d'un semi-groupe continu $\mathcal{G} = \{\mathcal{R}_k\}_{k \geq 1}$, soit le point fixe ϕ^* de \mathcal{R}_{k_0} est point fixe de tous les $\{\mathcal{R}_k\}_{k \geq 1}$, soit $(\partial_k \mathcal{R}_k)_{k=k_0} \phi^*$ est un vecteur propre de $D\mathcal{R}_{k_0}(\phi^*)$ de valeur propre 1 ; un point fixe hyperbolique, sans valeur propre égale à 1, est donc nécessairement commun à tous les opérateurs \mathcal{R}_k avec $k \geq 1$.

3.3.3 Renormalisation d'une famille paramétrée

On pose désormais le (semi-)groupe de renormalisation $\mathcal{G} = \{\mathcal{R}_k\}_{k \geq 1}$. On va montrer qu'une analyse linéaire au voisinage d'un point fixe hyperbolique, c'est à dire

non marginal, permet d'obtenir simplement les exposants critiques du système. Mais pour une réelle exploitation de la démarche, il est nécessaire de ramener l'étude de la règle de structure $\phi \in \Phi$ à un vecteur la paramétrant. C'est le cas par exemple d'un Hamiltonien paramétré par des constantes de couplages en nombre fini, mais qui peut développer des interactions d'ordre supérieur au fur et à mesure de la procédure de renormalisation, augmentant ainsi la dimension du vecteur de paramètres. On va donc supposer que l'on peut paramétrer la règle de structure du système \mathcal{S} par une suite $A = (A_j)_{j \geq 0}$. Le système présente un comportement critique lorsque le paramètre de contrôle θ passe par une valeur θ_c . On pose $A_0 = \theta - \theta_c$.

L'idée essentielle est maintenant de reporter l'action de l'opérateur de renormalisation $\mathcal{R}_k \in \mathcal{G}$ non plus sur la règle de structure ϕ , mais sur les paramètres $(A_j)_{j \geq 0}$ au moyen d'un autre opérateur r_k agissant dans l'espace des paramètres. On note donc $r_k[A]$ les paramètres de $\mathcal{R}_k \mathcal{S}$. Le problème consiste désormais à chercher les points fixes A^* de r_k , autrement dit les paramètres vérifiant $r_k[A^*] = A^*$. On suppose qu'il existe dans l'espace des paramètres \mathcal{A} un point fixe A^* hyperbolique, autour duquel on effectuera l'analyse linéaire du flot engendré dans \mathcal{A} par r_k .

La loi de (semi-)groupe de \mathcal{G} se reporte pour l'ensemble $\mathcal{G}' = \{r_k, k \geq 1\}$:

$$r_{k_1} \circ r_{k_2} = r_{k_1 k_2} \quad (3.22)$$

Un raisonnement identique que précédemment pour \mathcal{R}_k montre que les valeurs propres de $Dr_k(A^*)$ sont de la forme $\{k^{\gamma_j}\}_{j \geq 0}$. Les exposants $\{\gamma_j\}_{j \leq 1}$ peuvent être complexes, mais dans notre cas A_0 est réel car il est le seul paramètre de contrôle. En se ramenant à un paramétrage $(\mathcal{S} \mapsto A)$ et en se ramenant à $A^* = 0$ ainsi qu'à $Dr_k(A^*)$ diagonal, on a

$$\forall k \geq 1, [r_k(A)]_j = k^{\gamma_j} A_j + \mathcal{O}(A^2) \quad (3.23)$$

On montrera plus bas le lien entre les γ_j et les exposants critiques du système. Tout d'abord si $A_0 \neq 0$, \mathcal{S} n'est pas critique et la renormalisation va écarter le système de la criticité par construction de l'opérateur. Ce qui assure $\gamma_0 > 0$. On ordonne l'indexation des directions propres de telle manière que $\Re \gamma_j > 0$ si $j_0 > j$ (directions essentielles ou relevantes) et $\Re \gamma_j < 0$ si $j > j_0 > 0$ (directions inessentiels ou irrelevantes).

Soit F une fonction d'état régulière au point critique $A^* = 0$. On peut la développer au voisinage de ce point afin de déterminer le comportement de ses renormalisées

$$F(A) = F^* + \sum_j A_j F_j + \mathcal{O}(A^2) \Rightarrow F(r_k^n(A)) = F^* + \sum_j k^{n\gamma_j} A_j f_j + \mathcal{O}(A^2) \quad (3.24)$$

Le fait que F soit régulière implique que $|f_j| < \infty$ et que les restes sont bien d'ordre A^2 . La renormalisation amplifie asymptotiquement l'écart de $F - F^*$ sauf dans deux cas majeurs :

- si $f_0 = f_1 = \dots = f_{j_0}$, ce qui correspond au fait que la fonction d'état F est insensible à la criticité du système
- si $A_0 = A_1 = \dots = A_{j_0}$, ce qui revient à considérer un système exactement critique que la renormalisation ramène vers le point fixe $A^* = 0$

Dans les deux cas, $\lim_{n \rightarrow \infty} F(r_k^n(A)) = F^*$.

On peut raisonner comme précédemment pour \mathcal{R}_k et montrer que pour une fonction d'état sensible au comportement critique du système, et pour tout réel $k > 1$, l'action de \mathcal{R}_k sur \mathcal{S} transforme $F(\mathcal{S})$ en $F(\mathcal{R}_k \mathcal{S}) = k^{\alpha_F} F(\mathcal{S})$. Si F diverge au point critique c'est que $\alpha_F < 0$ car \mathcal{R}_k est conçu pour faire diminuer les divergences critiques.

Quelque soit le signe de α_F on pourra toujours écrire que

$$F(A_0, A_1, \dots) = k^{-\alpha_F} F(k^{\gamma_0} A_0, k^{\gamma_1} A_1, \dots) \quad (3.25)$$

Dès lors que $k > 1$ cette équation assure que F vérifie la loi d'échelle suivante

$$F(A_0, A_1, \dots) = A_0^{\frac{\alpha_F}{\gamma_0}} h(A_1 A_0^{\frac{-\gamma_1}{\gamma_0}}, \dots, A_j A_0^{\frac{-\gamma_j}{\gamma_0}}, \dots) \quad (3.26)$$

où h est une fonction réduite analytique. Seules les directions telles que $\Re \gamma_j > 0$ vont influencer le comportement critique car l'argument réduit $A_j A_0^{\frac{-\gamma_j}{\gamma_0}}$ tend vers 0 avec A_0 si $\Re \gamma_j < 0$.

Chapitre 4

Groupe de renormalisation et symétries

Le Groupe de Renormalisation est un groupe de symétrie particulier et il est très utile de le voir sous le point de vue de la Théorie des Groupes de Lie. De plus, la Théorie des Algèbres de Lie permet d'obtenir aisément certains résultats et de faciliter les calculs ainsi que les raisonnements [17, 18, 19, 20].

4.1 Groupes de Lie

On peut construire à partir de n'importe quel opérateur de renormalisation \mathcal{R} agissant dans l'espace des règles de structure Φ un semi-groupe $\mathcal{G}^+ = \{\mathcal{R}^n, n \in \mathbb{N}\}$ pour la loi de composition \circ . Il se prolonge en un groupe $\mathcal{G} = \{\mathcal{R}^n, n \in \mathbb{Z}\}$ si \mathcal{R} est inversible sur un domaine $\mathcal{D} \subset \Phi$. On va suivre la démarche habituelle et largement confirmée dans son efficacité d'essayer de relier par des isomorphismes \mathcal{G} à un groupe dont les propriétés de la structure sont connues. Ceci devrait permettre de décrire algébriquement l'action de la renormalisation et de pouvoir la relier aux groupes de symétries d'un système.

4.1.1 Générateurs infinitésimaux et Groupe de Lie

(Semi-)Groupe à un paramètre

Le facteur $k > 1$ utilisé par la renormalisation peut être choisi en général comme $k \in \mathcal{K} \subset]1, \infty[$. On a vu que la condition de cohérence physique imposait que (\mathcal{K}, \times) devait être un semi-groupe commutatif isomorphe au semi-groupe (\mathcal{G}^+, \circ) . Cet isomorphisme $(k \mapsto \mathcal{R}_k)$ permet ainsi de paramétrer \mathcal{G}^+ et de remplacer l'étude du comportement asymptotique $n \rightarrow \infty$ de la suite $(\mathcal{R}_{k_0}^n)_{n \in \mathbb{N}^*}$ pour un k_0 donné, par celle du comportement $k \rightarrow \infty$ dans $\mathcal{K} \subset \mathbb{R}$ de \mathcal{R}_k . Comme le semi-groupe $\mathcal{K} \neq \{1\}$ est un sous-groupe de $(]1, +\infty[, \times)$, il peut

- soit être égal à $\{k_0^n, n \geq 0\}$
- soit être un sous-groupe dense dans $(]1, \infty[, \times)$

– soit être le sous-groupe trivial $([1, \infty[, \times)$

Dans le dernier cas, on étudiera la régularité de la dépendance en k de \mathcal{R}_k .

Groupes de Lie

L'étude de la renormalisation au travers de la structure de semi-groupe n'est instructive que si (\mathcal{G}^+, \circ) est lui-même un (semi)-groupe de Lie. Rappelons que ce dernier est simplement un (semi)-groupe muni d'une structure différentiable compatible avec la loi de groupe. Supposons que \mathcal{G}^+ se prolonge en un groupe \mathcal{G} . La dimension de ce dernier est notée d et est définie comme la dimension topologique de sa structure différentiable. On peut maintenant ramener l'étude de la renormalisation à celles de d opérateurs linéaires formant une base de l'espace tangent à \mathcal{G} au point $Id_\Phi \in \mathcal{G}$, qui est une algèbre de Lie \mathcal{A} de \mathcal{G} et de dimension d . Ces opérateurs linéaires agissent eux aussi sur les éléments de Φ , et on les appelle générateurs infinitésimaux du groupe car ils permettent de le reconstruire entièrement et de connaître ses principales caractéristiques.

On donne un exemple de renormalisation sur un modèle simple à une dimension avant de généraliser à des modèles de dimension quelconque.

4.1.2 Exemples de renormalisation

Renormalisation d'une règle de structure analytique

On se propose d'étudier un exemple de renormalisation sur un espace de règles de structure $((x, y) \mapsto F_{a,b}(x, y)) \in \Phi$ définies par

$$a, b \in \mathbb{R}, \quad (\mathcal{R}_k F_{a,b})(x, y) = e^{kb} F_{a,b}(e^{-k}x, e^{-ak}y), \quad \mathcal{G} = \{\mathcal{R}_k, k \in \mathbb{R}\} \quad (4.1)$$

Φ est un espace vectoriel muni de la topologie de la convergence simple, et on dote \mathcal{G} de la topologie de la convergence faible.

L'isomorphisme analytique $(k \mapsto \mathcal{R}_k)$ permet de transmettre la structure de groupe de Lie commutatif de dimension 1 de $(\mathbb{R}, +)$ à (\mathcal{G}, \circ) . L'algèbre de Lie \mathcal{A} de \mathcal{G} est simplement $\mathcal{A} = \mathbb{R}A$ où A est le générateur infinitésimal du groupe $A = \left(\frac{d\mathcal{R}_k}{dk}\right)_{k=0}$ défini par

$$\forall F_{a,b} \in \Phi, \quad (AF)(x, y) = bF_{a,b}(x, y) - x\partial_x F_{a,b}(x, y) - ay\partial_y F_{a,b}(x, y) \quad (4.2)$$

On peut reconstruire tous les opérateurs de \mathcal{G} à partir de A car

$$\forall k \in \mathbb{R}, \quad \mathcal{R}_k = e^{kA} = Id_\Phi + \sum_{n \geq 1} \frac{k^n}{n!} A^n \quad (4.3)$$

On voit bien l'intérêt et l'économie de ne s'intéresser qu'à l'opérateur A et non aux éléments du groupe de renormalisation dans leur totalité!

De manière plus générale, on voit que tout groupe de renormalisation $\mathcal{G} = \{\mathcal{R}_k, k \in \mathbb{R}\}$ muni d'une structure différentiable et tel que $(k \mapsto \mathcal{R}_k)$ soit un isomorphisme différentiable de $(\mathbb{R}, +)$ dans (\mathcal{G}, \circ) , est un groupe de Lie de dimension un. Son générateur infinitésimal est $(\frac{d\mathcal{R}_k}{dk})_{k=0}$.

La relation (4.3) montre qu'il y a équivalence entre le fait que $\phi^* \in \Phi$ est point fixe de tous les éléments de \mathcal{G} et le fait que $A(\phi^*) = 0$. On peut différentier la loi de groupe de $\mathcal{R}_{k_1} \circ \mathcal{R}_{k_2} = \mathcal{R}_{k_1+k_2}$ en ϕ^* pour montrer que $\mathcal{L}_{\phi^*} = \{L_k = D\mathcal{R}_k(\phi^*), k \in \mathbb{R}\}$ est un groupe de Lie isomorphe à \mathcal{G} .

La dérivation par rapport à k en $k = 0$, et la différentiation en ϕ^* commutent si bien que l'algèbre de Lie de \mathcal{L}_{ϕ^*} est $A'_{\phi^*} = \mathbb{R}DA(\phi^*)$. On montre donc que $L_k = e^{kDA(\phi^*)}$. L'élément $e_\gamma \in T_{\phi^*}\Phi$ est un vecteur propre de $DA(\phi^*)$ pour la valeur propre γ s'il est vecteur propre de chaque opérateur L_k avec la valeur propre $e^{\gamma k}$. Les directions stables de L_k ne dépendent pas de $k > 0$, mais elles coïncident avec les directions instables de tous les opérateurs $\{L_k, k < 0\}$ ainsi qu'avec les directions de valeurs propres strictement négatives $\gamma < 0$ de $DA(\phi^*)$.

Généralisation à une dimension quelconque $d > 1$

Les résultats précédents se généralisent à une dimension $d > 1$ quelconque.

La renormalisation va dépendre de d changements d'échelle indépendants et paramétrés par $\vec{k} = (k_1, \dots, k_d) \in \mathcal{K}_d$.

$(\mathcal{G}^+, \circ) = (\{\mathcal{R}_{\vec{k}}\}_{\vec{k} \in \mathcal{K}_d}, \circ)$ est un semi-groupe isomorphe à $(\mathcal{K}_d, \times_d)$ où la loi de composition interne \times_d est définie comme le produit composante par composante. On peut maintenant écrire tout opérateur $\mathcal{R}_{\vec{k}}$ comme le produit commutatif d'opérateurs élémentaires explicitant l'indépendance des changements d'échelle comme suit :

$$\mathcal{R}_{\vec{k}} = \mathcal{R}_{(k_1, 1, \dots, 1)} \circ \mathcal{R}_{(1, k_2, \dots, 1)} \circ \dots \circ \mathcal{R}_{(1, 1, \dots, k_d)} \quad (4.4)$$

Si $\mathcal{K}_d =]0, \infty[^d$, et si \mathcal{G} est un groupe de Lie, l'algèbre de Lie de ce dernier est engendrée par les d générateurs infinitésimaux $\{A_j, j = 1 \dots d\}$ donnés par

$$A_j = \left(\frac{d\mathcal{R}_{(1, \dots, k_j, \dots, 1)}}{dk_j} \right)_{k_j=1}, \quad \forall j = 1, \dots, d \quad (4.5)$$

Ce qui donne immédiatement

$$\mathcal{R}_{(1, \dots, k_j, \dots, 1)} = e^{\log(k_j)A_j}, \quad \forall j = 1, \dots, d \quad (4.6)$$

On peut déterminer les points fixes communs à tous les opérateurs $\mathcal{R} \in \mathcal{G}$ en cherchant simplement les éléments $\phi^* \in \Phi$ dont les images par les d opérateurs $\{A_j, j = 1 \dots, d\}$ d'une base de l'algèbre de Lie \mathcal{A} de \mathcal{G} sont simultanément nulles. Si $A_j(\phi^*) = 0$ pour $j = 1, \dots, d$, ϕ^* est point fixe de tous les opérateurs de \mathcal{G} . L'ensemble $\mathcal{L}_{\phi^*} = \{L_{\vec{k}} = D\mathcal{R}_{\vec{k}}(\phi^*), \vec{k} \in]0, \infty[^d\}$ est un groupe de Lie de dimension d et

son algèbre a pour base la famille $\{DA_j(\phi^*)\}_{j=1,\dots,d}$. Ces d opérateurs commutent et ont donc les mêmes modes propres. Ainsi v est vecteur propre de $DA_j(\phi^*)$ avec la valeur propre γ_j pour chaque valeur de $j = 1, \dots, d$ si et seulement si c'est un vecteur propre de chaque opérateur linéaire $L_{\vec{k}}$ avec pour valeur propre $\lambda(\vec{k}) = \prod_{1 \leq j \leq d} k_j^{\gamma_j}$.

En résumé, on déduit de l'analyse spectrale des linéarisés $\{DA_j(\phi^*), j = 1, \dots, d\}$ les résultats de l'analyse linéaire des éléments de \mathcal{G} autour de ces points fixes ϕ^* . Toute l'étude linéaire de l'action de la renormalisation dans Φ peut ainsi se faire sur une base de l'algèbre de Lie \mathcal{A} sans avoir à expliciter ni à étudier les éléments de \mathcal{G} .

4.1.3 Groupes de transformations et symétries associées

A chaque élément $g \in \mathcal{G}$, où \mathcal{G} est un groupe de transformations d'un système physique \mathcal{S} , on peut lui associer une transformation T agissant sur les fonctions d'état F de \mathcal{S} ,

$$T_{F,g}(F(\mathcal{S})) = F(g\mathcal{S}) \quad (4.7)$$

La loi de groupe de \mathcal{G} se transmet par

$$T_{F,g_1} \circ T_{F,g_2} = T_{F,g_1 \cdot g_2} \quad (4.8)$$

Ce qui implique que l'invariance de \mathcal{S} sous l'action de $g \in \mathcal{G}$ entraîne celle de chacune de ses fonctions d'états $F(\mathcal{S})$ sous l'action de la transformation $T_{F,g}$ correspondante. L'invariance de \mathcal{S} sous l'action de tous les éléments de \mathcal{G} est une des manifestations de symétrie de \mathcal{S} . Dans le cas du modèle d'Ising unidimensionnel par exemple, la symétrie du système est seulement statistique, car ce ne sont pas les fonctions d'état qui sont invariantes mais la distribution de probabilité.

Exemples de groupe de symétrie

- Le groupe des translations spatiales $\mathcal{G} = \{\theta_{\vec{x}_0} : \vec{x} \mapsto \vec{x}_0, \vec{x}_0 \in G\}$ où $(G, +)$ où est un sous-groupe de $(\mathbb{R}^d, +)$ agissant sur les fonctions spatiales f de la manière suivante

$$[T_{\vec{x}_0}f](\vec{x}) = f(\theta_{\vec{x}_0}\vec{x}) = f(\vec{x} - \vec{x}_0) \quad (4.9)$$

L'invariance du système \mathcal{S} sous l'action de \mathcal{G} traduit l'homogénéité de \mathcal{S} si $G = \mathbb{R}^d$. Dans ce cas l'état local du système est identique en tout point; de même pour sa périodicité spatiale si $G = \mathbb{Z}\vec{a}$.

- Le groupe des translations temporelles $\mathcal{G} = \{\tau_{t_0} : t \mapsto t_0, t_0 \in G\}$ où $(G, +)$ où est un sous-groupe de $(\mathbb{R}, +)$ agissant sur les fonctions temporelles f de la manière suivante

$$[T_{t_0}f](\vec{x}) = f(\tau_{-t_0}t) = f(t - t_0) \quad (4.10)$$

L'invariance du système \mathcal{S} sous l'action de \mathcal{G} traduit l'homogénéité de \mathcal{S} si $G = \mathbb{R}$. Dans ce cas l'état instantané du système est indépendant du temps ; de même pour sa périodicité temporelle de période t_0 si $G = \mathbb{Z}t_0$.

- Le groupe des rotations spatiales $\mathcal{G} = O(d)$ des rotations de \mathbb{R}^d est associé à l'isotropie d'un système \mathcal{S} évoluant dans \mathbb{R}^d . Il agit sur les champs scalaires de la manière suivante $[T_r A](\vec{x}) = A(r^{-1}\vec{x})$ et sur les champs de vecteurs comme $[T_r \vec{V}](\vec{x}) = r[\vec{V}(r^{-1}\vec{x})]$.
- Les groupes de permutation sont associés à des propriétés d'indiscernabilité lorsqu'on permute l'indexation des constituants de \mathcal{S} .
- Les groupes d'homothétie sont quant à eux associés aux invariances d'échelle de \mathcal{S} : une loi d'échelle $F(kx) = k^\alpha F(x)$ sera caractérisée par l'invariance $T_{k, k^\alpha} F = F$ où $[T_{k, k^\alpha} F](x) = k^\alpha F(x/k)$.

Un groupe de renormalisation n'est rien d'autre qu'un groupe de symétrie particulier. C'est un groupe de transformations agissant dans l'espace des règles de structure Φ , l'invariance de $\phi \in \Phi$ sous l'action d'un de ses éléments traduit l'auto-similarité du système régi par ϕ et révèle quantitativement les lois d'échelle associées. C'est la raison pour laquelle les opérateurs de renormalisation sont construits en fonction des propriétés de symétrie que l'on souhaite exhiber. On retrouve donc dans un même formalisme l'action de la renormalisation ainsi que les conséquences des autres symétries du système.

Exemples d'invariance par renormalisation

- La renormalisation abstraite $(\mathcal{R}_k F)(x, y) = k^b F(xk^{-1}, yk^{-a})$ décrit les transformations d'échelle $(x, y) \mapsto (kx, k^a y)$ et $(F \mapsto k^b F)$. L'invariance par renormalisation exprime l'invariance d'échelle $F(kx, k^a y) = k^b F(x, y)$.
- Dans le modèle d'Ising unidimensionnel, l'invariance par renormalisation $\mathcal{RH} = \mathcal{H}$ de l'hamiltonien réduit équivaut à une invariance statistique du système de spins, c'est à dire une invariance de la loi de probabilité par rapport à la transformation $K \mapsto r(\tanh^{-1}[(\tanh K)^2])$ de la constante de couplage réduite suivie d'une contraction des longueurs de moitié.
- Un processus stochastique stationnaire, diffusif et markovien $\{\vec{X}_t\}_{t \geq 0}$ peut être décrit dans \mathbb{R}^d par une probabilité de transition $p(\vec{x}, \vec{y}, t)$. Le déplacement quadratique moyen observé est $D(p, t) = \int_{\mathbb{R}^d} \|\vec{x} - \vec{y}\|^2 p(\vec{x}, \vec{y}, t) d^d \vec{y}$. La renormalisation agit au travers de l'opérateur $\mathcal{R}_{k, l}$ de la manière suivante

$$[\mathcal{R}_{k, l} p](\vec{x}, \vec{y}, t) = k^d p(k\vec{x}, k\vec{y}, lt) = p(\vec{x}, \vec{y}, t) \quad (4.11)$$

Ce qui implique

$$D(\mathcal{R}_{k, l} p, t) = k^{-2} D(p, lt) \quad (4.12)$$

L'invariance par renormalisation $\mathcal{R}_{k,l}p = p$ correspond à l'invariance statistique des trajectoires par la transformation d'échelle

$$\vec{x} \mapsto \frac{\vec{x}}{k}, \quad t \mapsto \frac{t}{l} \quad (4.13)$$

ce qui implique une loi d'échelle pour le déplacement quadratique

$$D(p, t) = L(\log t)t^{2\gamma} \quad (4.14)$$

où $\gamma = \frac{\log l}{\log k}$ et L est une fonction $\log l$ -périodique.

Directions marginales et symétries

Si le système renormalisable \mathcal{S} possède une symétrie continue, caractérisée par l'action d'un semi-groupe de transformations $(T_a)_{a \geq 1}$, on peut obtenir un point fixe ϕ^* de l'opérateur de renormalisation \mathcal{R} avec la valeur propre de module 1.

Pour le montrer, il suffit de se rappeler que la renormalisation ne doit pas modifier la nature d'un système physique, mais seulement la perception qu'en a l'observateur. En conséquence, les symétries doivent être conservées, ce qui oblige l'opérateur de renormalisation à commuter avec tous les opérateurs $(T_a)_{a \geq 1}$ afin que ce dernier ainsi que \mathcal{R} conservent simultanément ϕ et $\mathcal{R}\phi$. Ainsi $\forall a \geq 1$, $T_a\phi^*$ est donc un point fixe de \mathcal{R} puisque

$$\mathcal{R}T_a\phi^* = T_a\mathcal{R}\phi^* = T_a\phi^* \quad (4.15)$$

En dérivant (4.15) par rapport à a , on obtient

$$D\mathcal{R}(\phi^*)(\partial_a T)_{a=1}\phi^* = (\partial_a T)_{a=1}\phi^* \quad (4.16)$$

Deux cas se présentent :

- soit $(\partial_a T)_{a=1}\phi^*$ est nul, et dans ce cas ϕ^* est point fixe de tous les $(T_a)_{a \geq 1}$. Ce qui exprime le fait que le système décrit par ϕ^* a les mêmes symétries que \mathcal{S} .
- soit $(\partial_a T)_{a=1}\phi^*$ est vecteur propre de $D\mathcal{R}(\phi^*)$ de module 1, situation que l'on qualifie dès lors de marginale.

On peut généraliser ce résultat à un groupe de symétrie ayant une structure de groupe de Lie : si un opérateur appartient à son algèbre de Lie, alors soit l'action de cet opérateur sur le point fixe est une règle de structure nulle, soit c'est un vecteur propre marginal de la différentielle de l'opérateur de renormalisation au point fixe.

4.1.4 Représentations et groupes de symétrie

Définition d'une représentation

Lorsque le système \mathcal{S} possède des propriétés de symétrie on peut envisager d'étudier l'action du groupe de renormalisation au travers de ses représentations.

Rappelons qu'une représentation d'un groupe (G, \times) sur un espace vectoriel E est

une application ($g \in G \mapsto M_g \in GL(E)$) et conservant la loi de groupe $M_{g_1} \circ M_{g_2} = M_{g_1 \times g_2}$, $\forall g_1, g_2 \in G$. $GL(E)$ est le groupe des automorphismes de E . La dimension de la représentation est celle de E .

Deux groupes reliés par un isomorphisme auront les mêmes représentations. Physiquement, on interprète les représentations d'un groupe comme les manifestations de son action. Par exemple, si on prend pour observable une fonction d'état F , l'action d'un groupe G sur le système \mathcal{S} induit une transformation sur la fonction d'état $T_{F,g}[F(\mathcal{S})] = F(g\mathcal{S})$. Les opérateurs $T_{F,g}$ sont linéaires et vérifient la loi de groupe $T_{F,g_1} \circ T_{F,g_2} = T_{F,g_1 \times g_2}$, donc ($g \mapsto T_{F,g}$) est une représentation linéaire de (G, \times) sur l'espace vectoriel E où F prend ses valeurs.

Représentations des groupes de Lie

Il est bon de faire quelques rappels de notions élémentaires sur les représentations des groupes de Lie.

Soit $\mathcal{G} = \{g_\theta, \theta \in \mathbb{R}\}$ un groupe à un paramètre isomorphe à $(\mathbb{R}, +)$. Une application de \mathcal{G} dans $GL(E)$ en est une représentation linéaire sur un espace vectoriel E où $\dim E = d$ si et seulement si ($\theta \mapsto \tilde{M}_\theta \equiv M(g_\theta)$) est une représentation linéaire de $(\mathbb{R}, +)$. Si (\mathcal{G}, \circ) est un groupe de Lie et si M est un difféomorphisme, alors $M(\mathcal{G}) = \{\tilde{M}_\theta, \theta \in \mathbb{R}\}$ est un sous-groupe de Lie de dimension 1 du groupe de Lie $GL(E)$ de dimension d^2 . son algèbre de Lie est dans ce cas $\mathbb{R}L$ où

$$L = \frac{d\tilde{M}_\theta}{d\theta}(0) = \frac{dM_g}{dg}(g_0) \cdot \frac{dg_\theta}{d\theta}(0) = \frac{dM_g}{dg}(g_0) \cdot A \quad (4.17)$$

en notant A le générateur infinitésimal de \mathcal{G}

$$g_\theta = e^{\theta A} \text{ et } \tilde{M}_\theta = e^{\theta L} \quad (4.18)$$

Puisque pour un endomorphisme quelconque $B \in \text{End}(E)$, e^B est inversible et d'inverse e^{-B} , l'algèbre de Lie de $GL(E)$ est $\text{End}(E)$. On en déduit donc que L n'est pas forcément inversible.

Dans le cas général, l'image $M(\mathcal{G})$ d'un groupe de Lie \mathcal{G} , d'algèbre de Lie \mathcal{A} par une représentation M différentiable et injective est un groupe de Lie de même dimension n , formant un sous-groupe du groupe de Lie $GL(E)$, ce qui exige que $\dim E \geq \sqrt{n}$. Si $\{A_1, \dots, A_n\}$ est une base de l'algèbre de Lie $GL(E)$, on construit $L_j = \frac{dM_g}{dg}(g_0) \cdot A_j$, ainsi la famille $\{L_1, \dots, L_n\}$ forme une base de l'algèbre $\mathcal{L} \subset \text{End}(E)$ de \mathcal{M} . On peut étendre la notion de représentation d'un groupe de Lie \mathcal{G} à son algèbre de Lie \mathcal{A} et étudier les représentations de \mathcal{G} à travers celles de \mathcal{A} puisque la correspondance ($A_j \mapsto L_j$), $j = 1, \dots, n$ définit un isomorphisme entre les algèbres \mathcal{A} et \mathcal{L} . Pour concrétiser ce résultat, on peut prendre pour exemple le cas d'un sous-espace vectoriel F de E invariant par chaque endomorphisme $\{M_g\}_{g \in \mathcal{G}}$ d'une représentation injective et différentiable de \mathcal{G} sur E , isomorphe à \mathbb{R}^n , si et seulement s'il est invariant par les opérateurs, en nombre fini n , d'une base de \mathcal{L} .

Représentations des groupes de renormalisation

On peut prendre pour exemple de représentation d'un groupe de renormalisation \mathcal{G} agissant sur l'espace des règles de structure Φ une application ($R \mapsto T_R$) transformant f , une fonction d'état du système \mathcal{S} de la manière suivante

$$T_R[f(\phi)] = f(R\phi) \quad (4.19)$$

On pose alors pour l'espace vectoriel $E = \{f(\phi), \phi \in \Phi\}$. La règle de structure n'est en général perçue qu'au travers des valeurs des fonctions d'état $f(\phi)$, c'est donc l'action de T_R est non celle de R qui est observée.

Les représentations sont intéressantes à étudier et exhibent des propriétés remarquables s'il existe un sous-ensemble $\Phi_{sym} \subset \Phi$ de règles de structure invariantes par tous les opérateurs d'un groupe de symétrie \mathcal{T} . Les éléments de \mathcal{G} restreints à Φ_{sym} doivent commuter avec chaque élément $T \in \mathcal{T}$ puisque la renormalisation préserve les symétries. Soit s une représentation d'un groupe S de transformations contenant $\mathcal{T} \cup \mathcal{G}$ sur un espace vectoriel E de dimension finie. Notons t la restriction de s à \mathcal{T} et r la restriction de s à \mathcal{G} . Puisque la loi de groupe $s_{S_1} \circ s_{S_2} = s_{S_1 \circ S_2}$ est vérifiée par définition même de s . Il est évident que la commutativité de deux opérateurs (T, R) quelconques implique deux résultats remarquables. D'abord celui que des opérateurs linéaires t_T et r_R associés. On en déduit que t et r sont deux représentations de \mathcal{T} et \mathcal{G} sur un même espace vectoriel E ayant les mêmes invariants et diagonalisant dans une même base. La deuxième conséquence est que si $\phi \notin \Phi_{sym}$ et si $\lim_{n \rightarrow \infty} R^n \phi = \phi^*$ avec $\phi^* \in \Phi_{sym}$, alors les règles de structure $\{T\phi\}_{T \in \mathcal{T}}$ appartiendront à la classe d'universalité de ϕ^* puisqu'elles auront le même comportement asymptotique sous l'action de la renormalisation. On peut inverser le raisonnement pour comprendre que des systèmes de symétrie différentes appartiendront à des classes d'universalité différentes puisque leurs limites sous l'action itérée de la renormalisation, de symétries différentes, ne pourront coïncider. Finalement, on pourra ainsi différencier et nommer les classes d'universalité par leur groupes de symétrie. C'est la démarche suivie en Théorie Quantique des Champs et en Physique Statistique. On désigne par exemple la classe du modèle d'Ising par $\mathbb{Z}_2 = \{-1, +1\}$, ou encore les groupes orthogonaux $O(n)$ ou leurs quotients $O(n)/O(k)$ dès lors que certaines propriétés de symétrie par rotation des systèmes critiques peuvent être envisagées.

Chapitre 5

Etude probabiliste des systèmes critiques

Les phénomènes critiques sont caractérisés par le fait qu'il existe un couplage statistique des interactions physiques. Puisqu'un grand nombre de degrés de liberté manifestent un comportement collectif, il est évident que ce sont les caractéristiques statistiques de ces couplages qui déterminent le comportement critique. Autrement dit, la théorie des probabilités peut être le cadre idéal pour comprendre comment des phénomènes dont les interactions sont à courte portée à l'échelle microscopique peuvent générer des phénomènes à l'échelle macroscopique [21]. On se propose dans ce chapitre d'exposer un nouveau point de vue sur le Groupe de Renormalisation, en tant que généralisation du Théorème de la Limite Centrale.

5.1 Approche probabiliste

La modélisation utilisée est celle qui considère chacun des N constituants du système \mathcal{S} comme une variable aléatoire $X = (X_n)_{n=1, \dots, N}$. Ce qui nous importe le plus ce sont les corrélations statistiques entre ces variables aléatoires. A l'aide de théorèmes limites, on va essayer de traduire les résultats de convergence stochastique des suites $(X_n)_n$ au travers du comportement de l'observable $\sum_{j=1}^N X_j$ lorsque $N \rightarrow \infty$ et essayer de faire ainsi le lien avec les phénomènes critiques. Les propriétés d'échelle seront reliées par les exposants critiques aux propriétés statistiques des configurations.

5.2 Renormalisation en terme probabiliste

On considère que le système \mathcal{S} est homogène et que les conditions aux bords n'influent que très peu sur ses propriétés thermodynamiques. De plus, la suite $X = (X_n)_n$ est statistiquement homogène. Afin de simplifier les calculs, on considérera éventuellement des variables aléatoires centrées.

5.2.1 Transformation d'échelle

Théorème 5.2.1 *Les constituants de \mathcal{S} vont présenter un comportement collectif autosimilaire s'il existe une transformation d'échelle reliant le système décrit par n variables aléatoires et celui décrit par kn variables aléatoires regroupées en n k -blocs de k variables aléatoires. Il suffit pour cela qu'il existe une valeur β^* pour laquelle la variable aléatoire $S_n(X, \beta^*) = \frac{1}{n^{\beta^*}} \sum_{j=1}^n X_j$ converge vers une variable $S_\infty(X)$ non nulle et à valeurs réelles finies.*

Démonstration 5.2.2 *Posons au préalable $S_n(X) = B_n \sum_{j=1}^n X_j$. Essayons de déterminer les suites $(B_n)_{n \geq 1}$ pour lesquelles $S_{kn}(X)$ coïncide pour tous les entiers k et n avec le résultat $S_n[S_k(X)]$ de la sommation par paquets en n k -blocs décrits chacun par une variable aléatoire identique à $S_k(X)$:*

$$S_{kn} = B_n \sum_{1 \leq q \leq n} S_k^{(q)} \Leftrightarrow B_{kn} \sum_{1 \leq j \leq kn} X_j = B_n \sum_{1 \leq q \leq n} B_k \sum_{1 \leq j \leq k} X_{k(q-1)+j} \quad (5.1)$$

La condition de cohérence impose que $B_{kn} = B_k B_n, \forall k, n \in \mathbb{N}$ ce qui donne la forme des coefficients B_n

$$B_n = \frac{1}{n^\beta} = n^{-\beta}, \beta \in \mathbb{R} \quad (5.2)$$

Ainsi un k -bloc décrit par $S_k(X, \beta) = \frac{1}{k^\beta} \sum_{j=1}^k X_j$ est alors assimilable à un unique sous-système car la relation imposée $S_{kn}(X) = S_n[S_k]$ exprime simplement le fait que les comportements collectifs de la famille initiale X sont les mêmes que celle d'une famille $\{S_k^{(q)}\}_{q \geq 1}$ de k -blocs. Cependant, il est nécessaire de s'intéresser au comportement de $S_N(X, \beta)$ lorsque $N \rightarrow \infty$ afin que la similarité imposée corresponde à un phénomène invariant d'échelle. Ce qui a pour effet de restreindre l'ensemble des suites X concernées et de fixer la valeur de l'exposant β en fonction des propriétés statistiques de X .

On obtient de la forme de S_n que

$$S_n(X, \beta) = n^{\beta' - \beta} S_n(X, \beta') \quad \beta, \beta' \in \mathbb{R} \quad (5.3)$$

La valeur β^* si elle existe est unique pour la suite X car en remplaçant β' par β^* dans l'expression de S_n ci-dessous on observe qu'elle converge vers 0 lorsque $\beta > \beta^*$ et diverge dans le cas contraire. La valeur de l'exposant β^* est donc une valeur de coupure, on peut la définir simplement par

$$\beta^* = \inf_{\mathbb{R}} \left\{ \beta, \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-\beta} \sum_{j=1}^n X_j = 0 \right\} \quad (5.4)$$

L'amplitude effective d'un bloc de k constituants d'amplitude individuelle A est donnée par $A'_k = k^{\beta^*} A$; l'exposant β^* est donc une quantité importante dans la description d'un phénomène collectif. La transformation $X \mapsto S_k(X, \beta^*)$ apparaît comme une renormalisation $S_k = \mathcal{R}_{\beta^*, k} X$. On retrouve par une méthode probabiliste la justification de la démarche effectuée pour le traitement du modèle d'Ising dans le premier chapitre.

De plus, la forme en puissance $k^{-\beta}$ du facteur par lequel les amplitudes des k -blocs sont contractées provient directement de la loi de groupe $\mathcal{R}_{\beta, k_1} \circ \mathcal{R}_{\beta, k_2} = \mathcal{R}_{\beta, k_1 k_2}$ que doivent vérifier les éléments de $\mathcal{G} = \{\mathcal{R}_{\beta, k}, k \in \mathbb{N}^*\}$.

Si la variance $\sigma^2 = \langle X^2 \rangle = A^2$ est finie, l'amplitude réelle d'un k -bloc

$$A'_k = \sqrt{\left\langle \sum_{j=1}^k X_j^2 \right\rangle} \quad (5.5)$$

est reliée à l'amplitude individuelle A des variables $\{X_j, 1 \leq j \leq n\}$ et aux corrélations internes à un bloc $C_i = \langle X_q X_{i+q} \rangle_{|i| < k}$ par

$$A'^2_k = \sum_{-k < i < k} C_i(k - |i|) = k^{2\beta^*} A^2 \quad (5.6)$$

et puisque $|C_i| \leq A^2$, on a $A'^2_k \leq A^2 k^2$. Ce qui permet de déterminer la valeur de $\beta^* \leq 1$ telle que l'amplitude effective d'un k -bloc après renormalisation $S_k^{(q)} = k^{-\beta^*} \sum_{i=1}^k X_{i+k(q-1)}$ converge vers A lorsque $k \rightarrow \infty$. Une suite X point fixe d'un opérateur $\mathcal{R}_{\beta_0, k_0}$ décrira un comportement collectif exactement autosimilaire avec $\beta^*(X) = \beta_0$ puisque dans ce cas $\langle S_k(X, \beta)^2 \rangle = \langle X^2 \rangle = A$ puisque la valeur finie k_0 . L'opérateur de renormalisation $\mathcal{R}_{\beta_0, k_0}$ intègre les corrélations à courte portée, c'est à dire telles que $|i| < k_0$ dans la définition du système effectif, similaire au système initial car $\langle X^2 \rangle \sim \langle S_k(X, \beta_0)^2 \rangle$, mais d'extension réelle k_0 . La longueur de corrélation sera ainsi réduite d'un facteur k .

5.2.2 Liens avec le théorème de la limite centrale

Le théorème de la limite centrale ou centrale limite exhibe pour des constituants statistiquement indépendants un comportement collectif autosimilaire d'exposant $\beta^* = \frac{1}{2}$.

La variable aléatoire $S_n(X, \beta^* = \frac{1}{2})$ a une amplitude $\frac{A'_n}{\sqrt{n}} = A = \sqrt{\langle X^2 \rangle}$. Elle converge en loi vers la variable $S_\infty(X)$ de loi de probabilité gaussienne centrée réduite et de variance $\langle X^2 \rangle$. La validité de ce résultat persiste asymptotiquement si les corrélations $C_j = \langle X_i X_{j+i} \rangle$ décroissent assez vite en fonction de leurs distances mutuelles j pour être sommables; ce qu'on exprime par le fait que $\sum_{j=-\infty}^{+\infty} |C_j| < \infty$ et

la limite en loi $S_\infty(X)$ a pour variance $\sigma_\infty^2 = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} C_j$.

Si les corrélations n'existent pas on retrouve $\sigma_\infty^2 = \langle X^2 \rangle$. Par contre deux cas extrêmes peuvent se présenter :

- si des corrélations sont présentes à toutes les échelles, indépendantes de la distance entre les constituants, c'est à dire $C_j = A$, alors l'amplitude effective $A'_n = nA$ et il est nécessaire de fixer $\beta^* = 1$.
- si X présente des corrélations destructrices maximales, c'est à dire $C_j = (-1)^j A$, alors $A'_{2n} = 0$ et $A'_{2n+1} = A$, ce qui oblige à prendre $\beta^* = 0$.

5.3 Généralisation du théorème de la limite centrale

Théorème 5.3.1 *On peut généraliser le théorème de la limite centrale à une suite $X = (X_j)_{j \geq 1}$ statistiquement homogène, faiblement corrélée au sens où les corrélations du $j^{\text{ème}}$ constituant $(C_n = \langle X_j X_{j+n} \rangle)_{n \in \mathbb{Z}}$ sont sommables.*

Démonstration 5.3.2 *La démonstration se fait en deux étapes :*

- On généralise d'abord la loi des grands nombres. en contrepartie de l'affaiblissement de l'hypothèse d'indépendance des variables aléatoires, la loi que l'on va obtenir est plus faible, pour la notion de convergence en moyenne quadratique et non pour la convergence presque sûre. La variance de la variable aléatoire centrée $S_N(X, \alpha) = N^{-\alpha} \sum_{1 \leq j \leq N} X_j$ s'écrit

$$\sigma_0^2 = \langle S_N(X, \alpha) \rangle^2 = N^{-2\alpha} \sum_{-N < k < N} C_k(N - |k|) \geq 0 \quad (5.7)$$

On peut traduire la sommabilité par

$$\forall \epsilon > 0, \exists N(\epsilon), \frac{1}{N} \sum_{N_\epsilon < |k| < N} |k| \cdot |C_k| < \sum_{N_\epsilon \leq |k|} |C_k| < \epsilon \quad (5.8)$$

On a de plus pour $N > \sup(N_\epsilon, \frac{N_\epsilon \sigma_0}{\epsilon})$

$$N^{-1} \sum_{|k| \leq N_\epsilon} |k| |C_k| < \frac{N_\epsilon \sigma_0^2}{N} < \epsilon \quad (5.9)$$

ce qui implique si $N > N'_\epsilon$

$$N^{-1} \sum_k |k| |C_k| < 2\epsilon \quad (5.10)$$

D'où le résultat de convergence

$$\sigma_\infty^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{-N < k < N} \frac{C_k(N - |k|)}{N} = \sum_{k \in \mathbb{Z}} C_k \geq 0 \Rightarrow \langle S_N(X, \alpha)^2 \rangle \sim \sigma_\infty^2 N^{1-2\alpha} \quad (5.11)$$

On voit immédiatement que $\langle S_N(X, \alpha)^2 \rangle$ converge en moyenne quadratique vers 0 dès que $\alpha > \frac{1}{2}$.

On peut encore sauver la loi forte des grands nombres si les corrélations ne sont plus sommables mais que $\sum_{-N < k < N} |C_k| < \sigma_\infty^2 N^\gamma$. On a dans ce cas

$$\langle S_N(X, \alpha)^2 \rangle \leq \sigma_0^2 N^{\gamma+1-2\alpha} \quad (5.12)$$

On a donc en conséquence $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle S_N(X, \alpha)^2 \rangle = 0$ si $2\alpha > 1 + \gamma$.

- En faisant la même hypothèse de sommabilité des corrélations, on peut montrer que $\langle S_N(X, \alpha = \frac{1}{2})^2 \rangle$ converge en loi si N tend vers l'infini vers la loi gaussienne centrée de variance $\sigma_\infty^2 = \sum_{n \in \mathbb{Z}} C_n$. Ce résultat est bien une généralisation du théorème de la limite centrale puisqu'il exprime que les fluctuations de la densité $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_j$ autour de sa moyenne 0 sont d'ordre $\mathcal{O}(\frac{\sigma_\infty}{\sqrt{N}})$ comme en l'absence de toutes corrélations.

5.4 Fluctuations et corrélations

Si on s'intéresse aux valeurs sur chaque constituant du système d'une grandeur locale \mathcal{Y} , lesquelles valeurs sont décrites par une suite de variables aléatoires $Y = (Y_j)_{j \geq 1}$, *a priori* non centrées et d'espérance $\langle Y \rangle$ indépendante de l'indexation j .

La valeur moyenne de l'observable \mathcal{Y} sur N constituants est $\bar{Y} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N Y_j$.

La loi des grands nombres assure la convergence presque sûre de la variable aléatoire \bar{Y} vers la moyenne statistique $\langle Y \rangle$. A la limite thermodynamique, on peut donc se permettre d'utiliser $\langle Y \rangle$ pour décrire le système à l'échelle macroscopique, sans avoir à préciser sa configuration microscopique puisqu'elle n'influe pas sur \bar{Y}_N lorsque $N \rightarrow \infty$.

Il est cependant très important de s'intéresser à la dépendance en N des fluctuations $\delta \bar{Y}_N = \sqrt{(\bar{Y}_N - \langle Y \rangle)^2}$ de \bar{Y}_N autour de $\langle Y \rangle$, car N est toujours une quantité finie lorsque l'on observe le système. Pour ce faire, on pose simplement $X_j = Y_j - \langle Y \rangle$ et on arrive rapidement à montrer que

$$\bar{Y}_N - \langle Y \rangle = S_N(X, \beta = 1) \sim N^{\beta^*(X)-1} S_\infty(X), \text{ lorsque } N \rightarrow \infty \quad (5.13)$$

Ainsi, l'amplitude des fluctuations $\delta\bar{Y}_N$ est d'ordre $\sqrt{\langle X^2 \rangle} N^{\beta^*(X)-1}$. Finalement, on en déduit que la grandeur \mathcal{Y} va avoir un comportement critique si cet écart-type décroît vers 0 à la limite $N \rightarrow \infty$ moins rapidement que $\frac{1}{\sqrt{N}}$, c'est à dire moins rapidement que dans le cas non-critique où les N constituants sont indépendants. La convergence en loi de $S_N(X, \beta^*(X))$ vers une limite non triviale $S_\infty(X)$ engendre un phénomène critique si et seulement si $\beta^*(X) > \frac{1}{2}$. Ce qui signifie que le type et les propriétés d'un phénomène critique sont déterminées uniquement par la nature des corrélations statistiques internes et non par les mécanismes physiques sous-jacents et à l'origine de ces corrélations ainsi que par la nature des constituants. On a là une explication de l'universalité des phénomènes critiques.

Troisième partie

Calculs *ab initio* et Théorie de la Fonctionnelle de Densité (TFD)

Chapitre 6

Méthodes *ab initio* usuelles

6.1 Formalisme de la mécanique quantique non-relativiste

6.1.1 Equations de Schrödinger

Considérons un système matériel constitué par N électrons positionnés en $\{\vec{r}_i\}$, et M noyaux atomiques positionnés en $\{\vec{R}_j\}$. En mécanique quantique non-relativiste toute l'information est contenue dans la fonction d'onde, dont l'évolution est régie par l'équation de Schrödinger [22] dite dépendante du temps

$$H\psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}) \quad (6.1)$$

où H est l'hamiltonien du système.

Lorsque la partie potentielle de l'hamiltonien ne dépend pas du temps, on peut ramener cette équation à un problème aux valeurs propres, l'équation indépendante du temps

$$(T + U + V + W)\psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}) = E\psi(\{\vec{r}_i\}, \{\vec{R}_i\}) \quad (6.2)$$

où l'on définit les termes comme suit

– Energie cinétique

$$T = T_e + T_n \equiv \sum_i^N -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_e} + \sum_k^M -\frac{\hbar^2 \nabla_k^2}{2m_k} \quad (6.3)$$

– Interaction coulombienne

$$U = \sum_{i < j} U(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \sum_{i < j} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (6.4)$$

- Energie potentielle à un corps

$$V = \sum_i^N v(\vec{r}_i) \quad (6.5)$$

- Pour un atome

$$V = \sum_i^N v(\vec{r}_i) = - \sum_i^N \frac{Ze^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}|} \quad (6.6)$$

où \vec{R} est le vecteur-position du noyau et Z la charge nucléaire

- Pour une molécule ou un solide

$$V = \sum_i^N v(\vec{r}_i) = - \sum_{ik} \frac{Z_k e^2}{|\vec{r}_i - \vec{R}_k|} \quad (6.7)$$

où les $\{\vec{R}_k\}$ sont les vecteur-positions des noyaux et Z_k leur charge nucléaire

- Energie potentielle d'interactions inter-noyaux

$$W = \sum_{i<j} W(\vec{R}_i, \vec{R}_j) = \sum_{i<j} \frac{Z_i Z_j e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} \quad (6.8)$$

Minimisation de l'énergie

On cherche à résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps pour les énergies les plus basses, c'est à dire le fondamental. On peut montrer dans ce cas que résoudre ce problème aux valeurs propres est complètement équivalent à minimiser une fonctionnelle d'énergie sur un espace fonctionnelle approprié.

On voit bien que les seules différences formelles notables entre un solide et une molécule sont d'une part l'arrangement spatial des noyaux, et d'autre part les conditions aux limites. Il faut noter que la résolution de Schrödinger indépendante du temps est particulièrement ardue voire impossible dès lors que le nombre de corps est supérieur ou égal à deux. Il faut donc chercher une approximation supplémentaire. Par chance, la masse des noyaux et des électrons va nous permettre de justifier une approximation très utile, l'approximation de Born-Oppenheimer.

6.1.2 Approximation de Born-Oppenheimer

Les noyaux sont bien plus lourds que les électrons, $m_{noyau} \gg m_{electron}$. Le temps de réponse des électrons est ainsi "instantané" par rapport à celui des noyaux, ce qui va nous permettre de découpler leurs mouvements. Une exploitation particulière de ce fait est développée sous forme d'un algorithme connu sous le nom d'optimisation de géométrie :

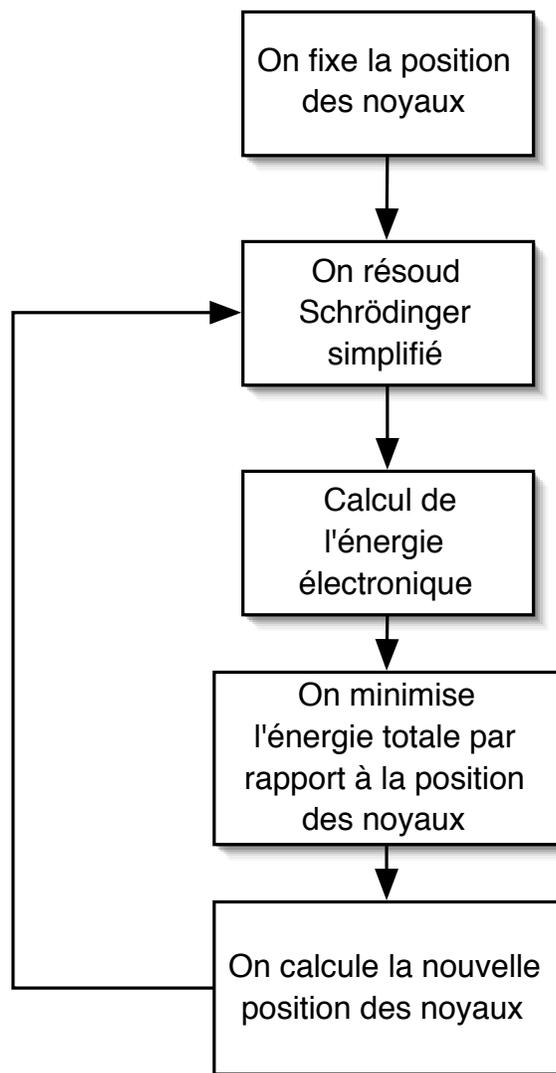


FIG. 6.1 – Mise en oeuvre algorithmique de l'approximation de Born-Oppenheimer

1. On fixe la position des noyaux, ils deviennent donc des paramètres et les degrés de liberté nucléaire apparaissent uniquement dans un potentiel $v(\vec{r})$
2. On résout une équation de Schrödinger "simplifiée" pour calculer l'énergie électronique

$$H_e \psi(\{\vec{r}_i\}|\{\vec{R}_i\}) \equiv (T + U + V)\psi(\{\vec{r}_i\}|\{\vec{R}_i\}) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\{\vec{r}_i\}|\{\vec{R}_i\}) \quad (6.9)$$

3. On minimise l'énergie totale par rapport à la position des noyaux

6.2 Espace de Sobolev des fonctions d'ondes

Avant de faire l'analyse fonctionnelle de l'équation de Schrödinger, il est nécessaire de bien situer le problème dans des espaces fonctionnels appropriés, en l'occurrence les espaces de Sobolev [82, 137]. On étudie le comportement d'un système de N éléments dans l'espace décrit par une fonction d'onde

$$\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \in \bigotimes_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \quad (6.10)$$

En fait, toute fonction d'onde vérifie les propriétés suivantes

- Les particules sont localisées dans l'espace donc la fonction d'onde doit être normalisée

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_N |\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 = 1 \quad (6.11)$$

- Les particules doivent posséder une énergie cinétique finie

$$\left(\langle \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) | T_e | \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \rangle \right) < \infty \quad (6.12)$$

Ce qui implique que pour chaque particule, l'énergie cinétique doit être finie

$$\left(\langle \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) | -\Delta_i | \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \rangle \right) < \infty, \forall i = 1, \dots, N \quad (6.13)$$

Ce qui après intégration par partie et sachant que les fonctions d'ondes sont de carré sommable et par conséquent qu'elles sont nulles à l'infini

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_N |\nabla \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)|^2 < \infty \quad (6.14)$$

Si on a posé pour $\psi \in \bigotimes_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ et $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N \in \mathbb{R}^3$

$$|\nabla\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)|^2 = \sum_{i=1}^N \left| \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \Psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \right|^2 \quad (6.15)$$

Il est alors équivalent d'imposer

$$\forall j \in [1, N], \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 \dots d^3\vec{r}_N \left| \frac{\partial}{\partial \vec{r}_j} \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \right|^2 < \infty \quad (6.16)$$

Ces deux propriétés assurent l'appartenance de la fonction d'onde ψ décrivant notre système à l'espace de Sobolev $\bigotimes_{i=1}^N H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$. Définissons les espaces de Sobolev $W^{m,p}(\Omega, \mathbb{C})$ pour Ω ouvert de \mathbb{R}^N

$$W^{m,p}(\Omega, \mathbb{C}) = \left\{ u \in L^p(\Omega, \mathbb{C}); \forall |j| \leq m \quad \partial^j u \in L^p(\Omega, \mathbb{C}) \right\} \quad (6.17)$$

Avec i multi-indice. On note

$$H^m(\Omega, \mathbb{C}) = W^{m,2}(\Omega, \mathbb{C}) \quad \forall \Omega \text{ ouvert de } \mathbb{R}^N \quad (6.18)$$

On munit $W^{m,p}(\Omega)$ de la norme

$$\|u\|_{W^{m,p}(\Omega)} = \sum_{0 \leq |\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha u\|_{L^p} \quad (6.19)$$

Mais seul les espaces $H^m(\Omega, \mathbb{C})$ peuvent être munis d'un produit scalaire

$$(u, v)_{H^m} = \sum_{|\alpha| \leq m} \int \partial^\alpha u(\vec{x}) \overline{\partial^\alpha v(\vec{x})} dx \quad (6.20)$$

de norme associée

$$\|u\|_{H^m} = \sqrt{\sum_{|\alpha| \leq m} \|\partial^\alpha u\|_{L^2}^2} \quad (6.21)$$

équivalente à la norme précédemment définie sur $W^{m,2}(\Omega)$. On a alors la propriété suivante

Théorème 6.2.1 *L'espace $W^{m,p}(\Omega, \mathbb{C})$ est un espace de Banach pour $1 \leq p \leq \infty$. L'espace $W^{m,p}(\Omega, \mathbb{C})$ est réflexif pour $1 < p < \infty$. L'espace $H^m(\Omega, \mathbb{C})$ est un espace de Hilbert séparable.*

Nous renvoyons à [137] pour la preuve dans le cas $m=1$. La dernière partie de ce théorème nous permettra en particulier d'affirmer que le double orthogonal d'un sous-ensemble fermé est égal à ce sous-ensemble. Nous avons exploité le fait que les particules étaient présentes dans l'espace et d'énergie finie pour affirmer que la fonction d'onde décrivant le système appartenait à l'espace de Sobolev $\bigotimes_{i=1}^N H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$;

Les électrons et les protons sont des fermions. Leur spin est *hf*. L'interprétation probabiliste de la fonction d'onde ainsi que le principe d'exclusion de Pauli nous imposent donc que

$$\psi \in \bigwedge_{i=1}^{3(N+M)} L^2(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \subset \bigotimes_{i=1}^{3(N+M)} H^1(\mathbb{R}, \mathbb{C}) \equiv \bigotimes_{i=1}^{N+M} H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \quad (6.22)$$

Nous n'allons considérer qu'un sous-ensemble de cet espace des fonctions d'ondes totalement antisymétriques

Posons

$$\mathcal{W}_N = \left\{ \phi = (\psi_i)_{1 \leq i \leq N}, \psi_i \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}), \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{i,j}, 1 \leq i, j \leq N \right\} \quad (6.23)$$

Avec

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i^* \psi_j \quad (6.24)$$

6.3 Méthode de Hartree-Fock

On va essayer de résoudre l'équation de Schrödinger indépendante du temps par une méthode de type Galerkin. En effet, l'espace des fonctions d'onde antisymétriques admet pour base les déterminants construits à partir des fonctions de \mathcal{W}_N . On peut donc travailler sur un sous-espace de dimension fini et augmenter la précision des résultats en augmentant la dimension de cet espace.

Soit $\varphi = (\psi_i)_{1 \leq i \leq N} \in \mathcal{W}_N$, on définit le déterminant de Slater associé à φ comme

$$S_\varphi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det(\psi_i(\vec{r}_j, t)) \quad (6.25)$$

On note \mathcal{S}_N l'ensemble des déterminants de Slater ainsi constitués. Ces fonctions, remarquables par leur expression, constituent un sous-espace de $\bigwedge_{i=1}^N H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ topologiquement trop petit pour décrire convenablement l'espace entier des fonctions totalement antisymétriques $\bigwedge_{i=1}^N H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$, mais qui est l'espace sur lequel nous pouvons effectuer nos calculs. On dénomme donc le fait d'approcher une fonction d'onde antisymétrique par un déterminant de Slater sous le nom de méthode ou approximation d'Hartree-Fock.

6.3.1 Calcul de l'hamiltonien

Le cas à deux particules se généralise immédiatement à N particules, c'est pour cela que nous ne considérons qu'un système à deux particules décrit par une fonction d'onde ψ qui est le déterminant de Slater associé à $\varphi = (\psi_1, \psi_2)$

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)) \quad (6.26)$$

avec $\varphi \in \mathcal{W}_2$, $\psi \in \mathcal{S}_2$, et $\psi_i \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$. Vérifions que nous avons bien normalisé la fonction d'onde ψ définie ci-dessus

$$\begin{aligned}
\langle \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} |\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)|^2 d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2)|^2 + |\psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)|^2 \right. \\
&\quad \left. - 2\Re \psi_1^*(\vec{r}_1)\psi_2^*(\vec{r}_2)\psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) \right) d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \\
&= \frac{1}{2} \left(\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_2 \left(|\psi_2(\vec{r}_2)|^2 \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 |\psi_1(\vec{r}_1)|^2}_1 + |\psi_1(\vec{r}_2)|^2 \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 |\psi_2(\vec{r}_1)|^2}_1 \right) \right. \\
&\quad \left. - 2\Re \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_2 \underbrace{\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 \left(\psi_1^*(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_1) \right)}_0 \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2^*(\vec{r}_2) \right) \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_2 \left(|\psi_2(\vec{r}_2)|^2 + |\psi_1(\vec{r}_2)|^2 \right) \\
&= 1
\end{aligned} \tag{6.27}$$

Nous venons en fait de vérifier que les fonctions déterminants de Slater sont bien normalisées (dans le cas à deux particules qui se généralise immédiatement). Revenons alors au calcul de notre hamiltonien électronique. On va prendre $\frac{\hbar^2}{2m_e} = 1$ pour simplifier les développements.

$$\begin{aligned}
H_e \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) &= (T + U + V)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\
&= -\Delta_{\vec{r}_1} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \Delta_{\vec{r}_2} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + V(\vec{r}_1)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \\
&\quad + V(\vec{r}_2)\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \frac{\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad \forall \psi \in \mathcal{S}_2
\end{aligned} \tag{6.28}$$

On développe l'écriture de ψ comme déterminant de Slater de deux particules

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1)) \quad \psi_i \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}) \tag{6.29}$$

On effectue alors les calculs de ces différents termes

$$\begin{aligned}
T_1 &= \langle -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}_1} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \\
&= -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \Delta_{\vec{r}_1} \left(\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) \right)^* \\
&\quad \left(\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) \right) \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 \left(|\nabla_1 \psi_1(\vec{r}_1)|^2 + |\nabla_1 \psi_2(\vec{r}_1)|^2 \right)
\end{aligned} \tag{6.30}$$

Si on a posé pour $\Psi \in \bigotimes_{i=1}^N L^2(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ et $(\vec{r}_i)_{i=1..N} \in \mathbb{R}^{3N}$ comme indiqué en (6.15)

$$|\nabla \Psi((\vec{r}_i)_{i=1..N})|^2 = \sum_{i=1}^N \left| \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} \Psi((\vec{r}_i)_{i=1..N}) \right|^2 \quad (6.31)$$

On obtient de même, pour tout $\psi \in \mathcal{S}_2$ s'écrivant comme déterminant de Slater de $\psi_i \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$

$$\begin{aligned} \langle -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}_2} \psi | \psi \rangle &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{r}_2 \left(|\nabla_2 \psi_1(\vec{r}_2)|^2 + |\nabla_2 \psi_2(\vec{r}_2)|^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{r}_1 \left(|\nabla_2 \psi_1(\vec{r}_1)|^2 + |\nabla_2 \psi_2(\vec{r}_1)|^2 \right) \end{aligned} \quad (6.32)$$

Donc

$$\begin{aligned} T &= \langle -\frac{1}{2} (\Delta_1 + \Delta_2) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi_1|^2 + |\nabla \psi_2|^2 \end{aligned} \quad (6.33)$$

On doit maintenant effectuer le calcul pour la partie potentielle

$$\begin{aligned} V_1 &= \langle V(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} V(\vec{r}_1) |\psi_1(\vec{r}_1) \psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}_1)|^2 d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{r}_1 V(\vec{r}_1) \left(|\psi_1(\vec{r}_1)|^2 + |\psi_2(\vec{r}_1)|^2 \right) \end{aligned} \quad (6.34)$$

On en déduit donc la contribution du potentiel

$$\langle \left(V(\vec{r}_1) + V(\vec{r}_2) \right) \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} V[|\psi_1(\vec{x})|^2 + |\psi_2(\vec{x})|^2] dx \quad (6.35)$$

Il ne reste plus que le terme coulombien

$$\begin{aligned} U &= \langle \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) | \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \left(\frac{|\psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\psi_2(\vec{r}_2)|^2 + |\psi_1(\vec{r}_2)|^2 |\psi_2(\vec{r}_1)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2|\psi_1(\vec{r}_1)|^2 |\psi_2(\vec{r}_2)|^2 |\psi_1(\vec{r}_2)|^2 |\psi_2(\vec{r}_1)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right) \end{aligned} \quad (6.36)$$

On pose maintenant

$$\begin{aligned}\rho_\psi(\vec{x}) &= \rho_{\psi_1, \psi_2}(\vec{x}) = |\psi_1(\vec{x})|^2 + |\psi_2(\vec{x})|^2 \\ \tau_\psi(\vec{x}, \vec{y}) &= \psi_1(\vec{x})\psi_1(\vec{y}) + \psi_2(\vec{x})\psi_2(\vec{y})\end{aligned}\quad (6.37)$$

Ce qui permet de simplifier la forme précédente

$$\begin{aligned}U &= \left\langle \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \middle| \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{\rho_\psi(\vec{r}_1)\rho_\psi(\vec{r}_2) - |\tau_\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\end{aligned}\quad (6.38)$$

Finalement nous obtenons

$$\begin{aligned}\left\langle H_e \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \middle| \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle &= \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla\psi_1|^2 + |\nabla\psi_2|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V[|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2] \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{\rho_\psi(\vec{r}_1)\rho_\psi(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{|\tau_\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\end{aligned}\quad (6.39)$$

avec

$$\forall \psi \in \mathcal{S}_2, \quad \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) \right) \quad \psi_1, \psi_2 \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \quad (6.40)$$

Remarquons que cette dernière expression a un sens malgré la divergence possible du terme

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{\rho_\psi(\vec{r}_1)\rho_\psi(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (6.41)$$

En effet, dans le cas d'égalité pour \vec{r}_1 et \vec{r}_2 nous avons une simplification avec le terme

$$-\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{|\tau_\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (6.42)$$

6.3.2 Equations de Fock

Nous posons l'énergie de Hartree-Fock

$$\begin{aligned}E^{HF}[\psi] &= \int_{\mathbb{R}^3} \left(|\nabla\psi_1(\vec{x})|^2 + |\nabla\psi_2(\vec{x})|^2 \right) d^3\vec{x} + \int_{\mathbb{R}^3} V(\vec{x})[|\psi_1(\vec{x})|^2 + |\psi_2(\vec{x})|^2] d^3\vec{x} \\ &+ \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{\rho_\psi(\vec{r}_1)\rho_\psi(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{|\tau_\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\end{aligned}\quad (6.43)$$

$$\forall \psi \in \mathcal{W}_2, \quad \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_1(\vec{r}_1)\psi_2(\vec{r}_2) - \psi_1(\vec{r}_2)\psi_2(\vec{r}_1) \right) \in \mathcal{S}_2 \quad \psi_1, \psi_2 \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \quad (6.44)$$

Ce problème se ramène alors au problème de minimisation suivant

$$E_{min}^{HF} = \min_{\psi \in \mathcal{W}_2} E^{HF}[\psi] \quad (6.45)$$

Remarque 6.3.1 *Remarquons ici que nous pouvons prouver l'existence d'un minimum pour la fonctionnelle $E^{HF}[\psi]$, comme nous le verrons dans la suite de ce chapitre, mais la question de l'unicité reste ouverte.*

On désire maintenant caractériser les fonctions qui minimisent l'énergie ci-dessus. Soit $\Psi \in \mathcal{W}_2$ la fonction qui minimise E^{HF} et soit ψ_1 et ψ_2 ses composantes, et soit $\chi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ telle que

$$\langle \psi_1 | \chi \rangle = \langle \psi_2 | \chi \rangle = 0, \quad \langle \chi | \chi \rangle = 1 \quad (6.46)$$

On développe le problème de minimisation (6.45) et on obtient

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{x} \left(-\frac{1}{2}\Delta\psi_1(\vec{x}) + V\psi_1(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \frac{|\psi_2(\vec{y})|^2}{|\vec{x} - \vec{y}|} \psi_2(\vec{x}) - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \frac{\psi_1(\vec{y})\psi_2(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \right) \cdot \chi(\vec{x}) = 0 \quad (6.47)$$

Si on pose maintenant $\forall \psi_1, \psi_2 \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$

$$A(\psi_1, \psi_2)(\vec{x}) = -\frac{1}{2}\Delta\psi_1(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi_1(\vec{x}) + \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \frac{\psi_2^2(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \psi_2(\vec{x}) - \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{y} \frac{\psi_1(\vec{y})\psi_2(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \quad (6.48)$$

On obtient

$$\langle A(\psi_1, \psi_2) | \chi \rangle = 0 \quad (6.49)$$

Rappelons ici que H^1 est un espace de Hilbert séparable et par conséquent que

$$\text{vect}(\psi_1, \psi_2)^{\perp\perp} = \text{vect}(\psi_1, \psi_2) \quad (6.50)$$

Donc A est une fonction dans le plan engendré par ψ_1 et ψ_2 . Il existe ϵ_1^1 et ϵ_2^1 réels (multiplicateurs de Lagrange) tels que

$$A(\psi_1, \psi_2) = \epsilon_1^1 \psi_1 + \epsilon_2^1 \psi_2 \quad (6.51)$$

En inversant les rôles de ψ_1 et ψ_2 , on aboutit à une équation analogue qui nous permet d'étendre le résultat obtenu pour toutes les fonctions d'ondes de \mathcal{W}_N et qui s'exprime sous forme condensée [82] en écrivant que $\Psi = (\psi_i) \in \mathcal{W}_N$ est solution de l'équation d'Euler-Lagrange du problème (6.45)

$$-\frac{1}{2}\Delta\Psi + V\Psi + \rho * \frac{1}{|\vec{x}|} \Psi - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\tau_\Psi(\vec{x}, \vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \Psi(\vec{y}) d^3\vec{y} = \left(\sum_{j=1}^N \epsilon_j^i \psi_j \right)_{i=1..N}$$

avec

$$\rho_\psi(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N \psi_i^2(\vec{x}), \tau_\psi(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{i=1}^N \psi_i(\vec{x})\psi_i(\vec{y}) \quad (6.52)$$

pour $\psi = {}^t(\psi_1, \dots, \psi_N)$. On définit l'opérateur de Hartree-Fock par

$$F_\psi(\psi) = -\frac{1}{2}\Delta\psi + V\psi + \rho_\psi * \frac{1}{|\vec{x}|}\psi - \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\tau_\psi(\vec{x}, \vec{y})\psi(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} d^3\vec{y} \quad \forall \psi \in \mathcal{W}_N \quad (6.53)$$

Ainsi les états minimisant l'énergie sur l'ensemble des déterminants de Slater sont les ψ vérifiant

$$F_\psi(\psi) = \left(\sum_{j=1}^N \epsilon_j^i \psi_j \right)_{i=1..n} \quad (6.54)$$

Remarque 6.3.2 *Remarquons que notre opérateur de Fock est un opérateur intégral-différentiel qui dépend de plus de la fonction sur laquelle il agit. Le problème de la résolution d'une telle équation est donc un problème fin ; en particulier nous pouvons démontrer que ce problème admet une solution, mais l'unicité reste ouverte.*

La matrice $M = (\epsilon_j^i)$ est une matrice symétrique (car F_ψ est un opérateur symétrique) donc diagonalisable dans une base orthonormale.

Donc il existe une matrice U telle que $U^*U = \mathbb{I}$ et λ_i tels que si $\tilde{\psi} = U\psi$, on a

$$F_{\tilde{\psi}}(\tilde{\psi}) = (\lambda_i \tilde{\psi}_i)_{i=1..N} \quad (6.55)$$

Ce qui est la forme usuelle des équations de Hartree-Fock, car donnant l'interprétation la plus immédiate.

6.4 Quelques propriétés de ces équations

On exhibe dans ce paragraphe une interprétation possible des termes intervenant dans nos équations (6.55) en prenant $\psi \in \mathcal{W}_N$

$$\begin{aligned} (F_\psi \cdot \psi)(\vec{x}) &= -\frac{1}{2}\Delta\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x}) + \left(\rho_\psi * \frac{1}{|\vec{x}|}\right)(\vec{x})\psi(\vec{x}) - \int \frac{\rho(\vec{x}, \vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \psi(\vec{y}) d^3\vec{y} \\ &= \epsilon_i \psi(\vec{x}) \end{aligned} \quad (6.56)$$

Remarque 6.4.1 *Remarquons que cette dernière expression a un sens malgré la divergence possible du terme*

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{\rho_\psi(\vec{r}_1)\rho_\psi(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (6.57)$$

En effet, dans le cas d'égalité pour \vec{r}_1 et \vec{r}_2 nous avons une simplification avec le terme

$$-\frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \frac{|\tau_\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (6.58)$$

Remarque 6.4.2 Le terme $-\frac{1}{2}\Delta\psi(\vec{x})$ a une interprétation évidente comme énergie cinétique propre des électrons. Le terme $V(\vec{x})\psi(\vec{x})$ est lui aussi transparent à l'interprétation puisqu'il représente l'énergie potentielle due au champ extérieur. Le terme $(\rho_\psi * \frac{1}{|\vec{x}|})(\vec{x})\psi(\vec{x})$ décrit l'interaction coulombienne.

Le terme $-\int \frac{\rho(\vec{x}, \vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} \psi(\vec{y}) d^3\vec{y}$ est le terme d'échange-corrélation que nous avons vu apparaître dans notre calcul et qui provient d'une meilleure prise en compte des interactions entre électrons que nous ne l'avons fait lors de l'approximation du champ central. Assez souvent ce terme peut être modélisé par un potentiel sphérique autour des électrons repoussant les autres. Ce terme corrige donc les interactions pour tenir compte de l'impossibilité de trouver deux particules trop proches. Enfin cherchons une interprétation du second membre de notre équation : les valeurs ϵ_i représentent en fait l'énergie nécessaire pour enlever un électron. En effet, si H est l'hamiltonien total, $J_{i,j}$ désigne le terme provenant directement de l'interaction coulombienne agissant entre les fermions i et j , et si $K_{i,j}$ le terme provenant de l'interaction d'échange entre les fermions i et j , on obtient

$$\begin{aligned} E &= \langle \psi | H | \psi \rangle \\ &= \sum_i \epsilon_i - \sum_{i < j} [J_{i,j} - K_{i,j}] \end{aligned} \quad (6.59)$$

Alors en considérant un système de $N+1$ électrons et un système de N électrons et en prenant un ensemble d'orbitales indexées par un indice allant de 1 à N , on peut voir que

$$E_{N+1} - E_N = \epsilon_i \quad (6.60)$$

Ceci donne une interprétation des valeurs propres de l'opérateur de Fock comme énergie requise pour enlever un électron de la i -ème orbitale (théorème de Koopman, [26]).

Remarque 6.4.3 Pour clore ce paragraphe on notera que la méthode de Hartree Fock préserve la symétrie et nous donne pour des couches complètes une solution d'un problème de champ central. Ceci justifie en atomistique un premier calcul d'énergie pour les couches centrales avec la méthode du champ central et permet de comprendre que le terme d'échange-corrélation qui est pris en compte dans la méthode Hartree-Fock est bien un terme relatif au placement des électrons autour du noyau.

Remarque 6.4.4 On peut retrouver rapidement les équations de Hartree-Fock dans le cadre de la théorie quantique des champs [27] en ne considérant que les interactions engendrées par des bubbles et des oysters entre un système de N fermions et un

$N + 1$ ème. Naïvement un bubble consiste en un "choc élastique" : le fermion possède une quantité de mouvement qu'il cède à la particule qu'il collisionne et occupe sa place. Un oyster consiste en un échange entre le fermion et un trou créé par une particule. L'approximation d'Hartree-Fock consiste dans cette formulation à ne considérer que ces deux types d'interactions. Alors en écrivant et resommant dans l'espace de Fourier les graphes de Feymann induits par cette description des interactions, on peut obtenir immédiatement les équations d'Hartree-Fock. Dans le cadre de cette description l'énergie coulombienne se traduit en terme de bubble et l'énergie d'échange en terme d'oyster, ce qui apporte un autre éclairage sur l'approximation de Hartree-Fock.

6.5 Compacité pour Hartree-Fock

Le but de cette section est de montrer que le problème de minimisation de Hartree-Fock admet une solution mais que l'unicité de celle-ci n'est pas garantie. Comme la fonctionnelle de Fock n'est pas convexe, les arguments mathématiques usuels ne s'appliquent pas. On peut par un raisonnement assez fin montrer que l'existence d'un minimum est assurée mais il n'existe pas de preuve de l'unicité de ce dernier. La démonstration de l'existence d'un minimum pour l'énergie de Hartree-Fock (i.e. la compacité pour la méthode de Hartree-Fock) étant d'un niveau technique assez important, on indiquera ici les éléments essentiels de la preuve, en étant bien conscient que certains passages devraient être détaillés pour obtenir une démonstration complète de ce résultat. On désire montrer l'existence d'une solution au problème de minimisation

$$I^{HF} = \inf \left\{ E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N), \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}), \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j = \delta_{i,j} \right\} \quad (6.61)$$

Théorème 6.5.1 *On suppose que la charge nucléaire totale vérifie $Z > N - 1$. Alors toutes les suites minimisantes du problème (6.61) pour N électrons sont relativement compactes dans $H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})^N$, et en particulier il existe un minimum.*

Démonstration 6.5.1 *Soit $\psi_{1,n}, \dots, \psi_{N,n}$ une suite minimisante, ie une suite de N -uplets de fonctions de $H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C})$ dont l'énergie de Hartree-Fock converge en décroissant vers le minimum I^{HF} , telle que*

$$\forall n \in \mathbb{N}, \quad \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{i,n} \psi_{j,n} = \delta_{i,j} \quad (6.62)$$

On remarque que

$$E^{HF}(\psi_{1,n}, \dots, \psi_{N,n}) \geq \sum_{i=1}^N \left(\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \psi_{i,n}|^2 + \int_{\mathbb{R}^3} V \psi_{i,n}^2 \right) \quad (6.63)$$

Cette suite minimisante est donc bornée et possède une limite faible qu'on note (ψ_1, \dots, ψ_N) . On peut même montrer que

$$0 \leq \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \leq \int_{\mathbb{R}^3} \psi_{i,n} \psi_{j,n} = 1 \quad \forall i, j \quad (6.64)$$

On va maintenant relacher la contrainte du problème (6.61) afin de transformer le problème de minimisation sur une sphère en un problème de minimisation sur une boule (qui étant convexe est plus facile à étudier).

Montrons que

$$I^{HF} = \inf \left\{ E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N), \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}), \forall i, j \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \leq 1 \right\} \quad (6.65)$$

Soit $\epsilon > 0$, il existe un N -uplet de fonctions de classe C^∞ à support compact tel que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \leq 1 \quad \forall i, j \in [1, N] \quad (6.66)$$

et

$$E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N) \leq \epsilon + \inf \left\{ E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N), \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}), \forall i, j \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \leq 1 \right\}$$

On définit alors la matrice $[a_{ij}]$ par la donnée de

$$a_{ij} = \delta_{i,j} - \int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \quad (6.67)$$

On définit ensuite les fonctions ϕ_i de classe C^∞ à support compact telles que

$$\int_{\mathbb{R}^3} \phi_i \phi_j = a_{ij} \quad (6.68)$$

Ainsi que

$$A = \sum_{i=1}^N \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \phi_i|^2 + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\tilde{\rho}(\vec{x}) \tilde{\rho}(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} - \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\tilde{\rho}(\vec{x}, \vec{y})|^2}{|\vec{x} - \vec{y}|} \leq \epsilon \quad (6.69)$$

Avec

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(\vec{x}, \vec{y}) &= \sum_{i=1}^N \phi_i(\vec{x}) \phi_i(\vec{y}) \\ \tilde{\rho}(\vec{x}) &= \tilde{\rho}(\vec{x}, \vec{x}) \end{aligned} \quad (6.70)$$

On considère maintenant les fonctions tests $\psi_i^n = \psi_i + \phi_i(\cdot + n\vec{e})$ où n est un entier assez grand et \vec{e} un vecteur unitaire de \mathbb{R}^3 pour obtenir

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i^n \psi_j^n = \delta_{ij} \quad (6.71)$$

et

$$E^{HF}(\psi_1^n, \dots, \psi_N^n) \mapsto E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N) + A \quad (6.72)$$

On aboutit finalement à

$$I^{HF} \leq 3\epsilon + \inf \left\{ E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N), \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}), \left[\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \right] \leq 1 \right\} \quad (6.73)$$

On montre par ailleurs que

$$E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N) \leq \liminf E^{HF}(\psi_1^n, \dots, \psi_N^n) \quad (6.74)$$

en développant les termes mis en jeu.

On peut alors affirmer que (ψ_1, \dots, ψ_N) minimise

$$\left\{ E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_N), \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}), \left[\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \right] \leq 1 \right\} \quad (6.75)$$

On doit vérifier que la contrainte est saturée, c'est-à-dire que le minimum est atteint sur la sphère, autrement dit $\left[\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \right]_{ij} = \mathbb{I}$.

Remarquons que toute transformation orthogonale de la matrice $\left[\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \right]_{ij}$ est encore solution du problème (6.65) et que l'énergie de Hartree-Fock E^{HF} est invariante par transformation orthogonale de ses variables. Nous supposons donc la matrice $\left[\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j \right]_{ij}$ comme diagonalisée. Définissons les γ_i comme

$$\int_{\mathbb{R}^3} \psi_i \psi_j = \delta_{i,j} \gamma_i \quad (6.76)$$

Vérifier que la contrainte est saturée revient alors à vérifier que les γ_i sont égaux à l'unité. Pour cela, on introduit un problème de minimisation annexe dont on désire montrer que ψ_i est solution

$$M_i = \inf \left\{ \langle \bar{H} \psi | \psi \rangle, \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}), \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 \leq 1, \int_{\mathbb{R}^3} \psi \psi_j = 0 \quad \forall j \neq i \right\} \quad (6.77)$$

avec

$$\bar{H} \psi(\vec{x}) = -\Delta \psi(\vec{x}) + V(\vec{x}) \psi(\vec{x}) + \left(\rho * \frac{1}{|\vec{x}|} \right) (\vec{x}) \psi(\vec{x}) - \int_{\mathbb{R}^3} \rho(\vec{x}, \vec{y}) \frac{\psi(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} d^3 \vec{y} \quad \forall \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}) \quad (6.78)$$

Remarquons que

$$E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_{i-1}, \psi, \psi_{i+1}, \dots, \psi_N) = E^{HF}(\psi_1, \dots, \psi_{i-1}, 0, \psi_{i+1}, \dots, \psi_N) + \langle \bar{H} \psi | \psi \rangle - Q(\psi_i, \psi) \quad (6.79)$$

Avec

$$Q(\psi_i, \psi) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|\psi_i(\vec{x})|^2 |\psi(\vec{y})|^2 - \psi_i(\vec{x}) \psi_i(\vec{y}) \psi(\vec{x}) \psi(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} d^3 \vec{x} d^3 \vec{y} \geq 0 \quad (6.80)$$

d'après la relation de Cauchy-Schwartz.

Comme (ψ_1, \dots, ψ_N) minimise le problème avec contrainte relâchée (6.65), ψ_i minimise le problème annexe (6.77).

On déduit de cette solution de minimisation que les (ψ_i) sont combinaisons linéaires de N premiers vecteurs propres de \bar{H} . Par transformation orthogonale, on suppose que les (ψ_i) sont vecteurs propres ou nuls. Montrons qu'ils ne peuvent pas être nuls. En effet, si l'un des (ψ_i) est nul alors la borne inférieure du problème de minimisation avec contrainte relâchée (6.65) est nulle. Or \bar{H} est majoré au sens des opérateurs par $H = -\Delta + V + (\rho * \frac{1}{|\bar{x}})$. Rappelons que pour deux opérateurs A et B

$$A \leq B \Leftrightarrow \forall u, {}^t u A u \leq {}^t u B u \quad (6.81)$$

On applique alors le théorème suivant [82] pour assurer que \bar{H} possède au moins N valeurs propres négatives.

Théorème 6.5.2 Soit μ une mesure telle que $\mu(\mathbb{R}^3) < Z$. Soit $W \in L^p(\mathbb{R}^3) + L^q(\mathbb{R}^3)$ avec $W \geq 0$; $1 < p, q \leq 3$. Soit v fixé dans $L^2(\mathbb{R}^3)$ et R l'opérateur défini par

$$Ru(\vec{x}) = \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{u(\vec{y})v(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} d^3\vec{y} \right) v(\vec{x}) \quad (6.82)$$

Alors, pour chaque entier n , il existe $\epsilon_n > 0$, qui ne dépend que de bornes sur $\frac{1}{Z - \mu(\mathbb{R}^3)}$, $W \in L^p(\mathbb{R}^3) + L^q(\mathbb{R}^3)$ et $v \in L^2(\mathbb{R}^3)$, tel que l'opérateur

$$H = -\Delta - \sum_{k=1}^N \frac{z_k}{|\vec{x} - \vec{x}_k|} + W + (\mu * \frac{1}{|\bar{x}}) + R \quad (6.83)$$

admet au moins n valeurs propres en dessous de $-\epsilon_n$.

Ce dernier théorème permet de relever la contradiction sur les signes des valeurs propres de \bar{H} et d'affirmer par conséquent, que tous les (ψ_i) sont non nuls. De même, on peut affirmer que les valeurs propres associées sont non nulles, car si un tel cas se produisait on pourrait prendre le vecteur ψ_i associé nul et aboutir à la même contradiction. Le problème de minimisation (6.77) permet alors d'écrire

$$\begin{aligned} -\epsilon_i &= \inf \left\{ \langle \bar{H}\psi | \psi \rangle, \psi \in H^1(\mathbb{R}^3, \mathbb{C}), \int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 \leq 1, \int_{\mathbb{R}^3} \psi \psi_j = 0 \forall j \neq i \right\} \\ &= \langle \bar{H}\psi_i | \psi_i \rangle \\ &= -\epsilon_i \gamma_i \end{aligned} \quad (6.84)$$

Les valeurs propres ϵ_i étant strictement négatives, la simplification est valide et nous avons

$$\gamma_i = 1 \quad \forall i \in [1, N] \quad (6.85)$$

On vient de montrer que la contrainte relâchée était en fait atteinte sur le bord de la boule donc que le minimum du problème initial (6.61) était celui du problème avec contrainte relâchée (6.65) soit la limite faible de la suite minimisante initialement choisie, ce qui termine la démonstration.

Chapitre 7

Cadre général de la TFD

On peut dire que la TFD est assurément une des théories les plus populaires et les plus efficaces pour traiter les problèmes à N corps en [23, 24]. La TFD a été amplement étudiée et développée ces quarantes dernières années. On trouvera d'excellentes références dans [25, 26, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34, 35, 36, 37, 38, 39]. La présentation ici faite est dans l'esprit des articles [30, 35, 36, 40].

7.1 Approche usuelle

On peut résumer la démarche de la mécanique quantique en comprenant qu'à partir de la connaissance du potentiel v on détermine la fonction d'onde par résolution de l'équation de Schrödinger, laquelle nous permet ensuite par intégration de calculer les valeurs moyennes de n'importe quelle observable

$$v(\vec{r}) \rightarrow \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \rightarrow \langle \text{observables} \rangle \quad (7.1)$$

On peut notamment calculer la densité de particules

$$\rho(\vec{r}) = N \int d^3\vec{r}_2 \dots \int d^3\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (7.2)$$

Quand bien même, la fonction d'onde contiendrait la totalité de l'information sur le système, sa détermination est particulièrement problématique et ce pour plusieurs raisons. La plus importante est que la fonction d'onde est une fonction à $6(N + M)$ variables (en tenant compte des variables de spins). Le calcul numérique sur de tels objets est particulièrement coûteux en temps de calcul et en précision.

Comme on va le voir dans le chapitre suivant, le théorème de Hohenberg-Kohn (1964) va nous assurer que pour l'état fondamental ψ_0 , la relation entre la densité du fondamental ρ_0 et le potentiel est bijective, c'est à dire que l'on a en plus

$$\rho_0(\vec{r}) \rightarrow \psi_0(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \rightarrow v(\vec{r}) \quad (7.3)$$

On va pouvoir ainsi travailler sur un objet physico-mathématique à trois variables seulement, ce qui simplifie énormément le problème.

7.2 Des fonctions d'ondes à la fonctionnelle de densité

Il existe un lien très intéressant entre les fonctions d'onde et les fonctions de Green. Ces dernières sont directement liées aux matrices de densité réduite à une particule. Ces relations permettront de jeter un pont entre la mécanique quantique telle qu'elle est connue au travers de la détermination des fonctions d'onde, mais plutôt trop compliquée dès lors qu'il s'agit de traiter des problèmes à N-corps, et la Théorie Quantique des Champs, seule cadre apte à traiter ces derniers. En Théorie Quantique des Champs, mais aussi en Théorie Statistique des Champs les fonctions de corrélation à N points sont les outils mathématiques de base, permettant une description statistique des problèmes à N-corps. Une fonction de Green n'étant rien d'autre qu'une fonction de corrélation à deux points.

7.2.1 Fonction de Green

Mathématiquement, on définit la fonction de Green [41] d'un opérateur \mathcal{L} comme la solution de

$$[z - \mathcal{L}(z, \vec{r})]G(\vec{r}, \vec{r}'; z) = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (7.4)$$

Pour une particule indépendante, c'est à dire qu'il n'y a pas d'interactions avec d'autres particules, autrement dit $U = 0$, et dans un potentiel $v(\vec{r})$ on la note G^0 , et elle vérifie dans l'espace des fréquences [41, 42]

$$\left[E + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - v(\vec{r}) \right] G^{(0)}(\vec{r}, \vec{r}'; E) = \hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (7.5)$$

Par contre pour un système à N-corps interagissant indépendant du temps, la fonction de Green d'une particule est modifiée en raison des interactions avec les autres particules. On montre [41, 42] que l'équation à résoudre est dans ce cas

$$\begin{aligned} \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - v(\vec{r}) \right] G(\vec{r}, t; \vec{r}', t') &= \hbar \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta(t - t') \\ &- i \int d^3 \vec{x} U(\vec{r} - \vec{x}) G^{(2)}(\vec{r}, t, \vec{x}, t; \vec{r}', t', \vec{x}, t') \end{aligned} \quad (7.6)$$

où $G^{(2)}$ est la fonction de corrélation à deux points. Il faut remarquer que $G(\vec{r}, t; \vec{r}', t')$ n'est une fonction de Green que lorsque le système n'est pas interagissant, c'est à dire $U = 0$. La connaissance de $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ permet le calcul des valeurs moyennes de tous les opérateurs à un corps ainsi que les valeurs moyennes de certains opérateurs à deux corps (Hamiltonien).

Comment obtenir la fonction $G(\vec{r}, \vec{r}'; t, t')$? On montre qu'il suffit de résoudre l'équation de Dyson [41, 42, 43]

$$G(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') = G^0(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') + \int d^3\vec{x} d^3\vec{x}' d^3\tau d^3\tau' G^0(\vec{r}, \vec{x}; t, \tau) \Sigma(\vec{x}, \tau, \vec{x}', \tau') G(\vec{x}', \vec{r}'; \tau', t') \quad (7.7)$$

La quantité Σ est dénommée "self-energy" irréductible. C'est une quantité importante dans l'étude des problèmes à N-corps.

Remarque 7.2.1 *Observons que l'équation de Dyson (7.7) est self-consistante, c'est à dire que la solution $G(\vec{r}, \vec{r}'; t, t')$ se trouve des deux côtés de l'équation et dépend donc d'elle même. On a donc affaire à un problème non linéaire que l'on retrouvera dans toutes les approximations directes de la mécanique quantique telles que les approximations de Hartree-Fock pour les approches "déterminantales" et de Kohn-Sham en TFD.*

Lorsque l'énergie est conservée on peut passer de $G(\vec{r}, \vec{r}'; t, t') \equiv G(\vec{r}, \vec{r}'; t - t')$ à $G(\vec{r}, \vec{r}'; E)$ par une transformée de Fourier en temps, et on utilise l'équation (7.5). Dans le cas général on utilise une transformation de Fourier en espace et en temps afin de transformer les convolutions du terme de droite en produit de transformée de Fourier. Il n'est évidemment pas toujours possible de résoudre facilement (7.7), et c'est pour cela que des approximations sont utilisées sur les modèles d'interactions envisagées. De plus, on doit souvent se contenter d'une resommation partielle de la série obtenue par approximation de l'équation (7.7). Le cadre idéal pour traiter approximativement l'équation de Dyson se fait au travers du formalisme de seconde quantification et des diagrammes de Feynman [41, 42, 27].

Dans le cas où l'énergie est conservée, on peut établir une relation entre la matrice densité réduite à une particule $\gamma(\vec{r}, \vec{r}') = N \int d^3\vec{r}_2 \dots \int d^3\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \psi(\vec{r}', \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N)$ et la fonction de Green à l'aide de

$$\gamma(\vec{r}, \vec{r}') = -i\hbar \lim_{t' \rightarrow t} G(\vec{r}, \vec{r}', t - t') \quad (7.8)$$

On notera la densité moyenne comme

$$\rho(\vec{r}) = \langle \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \rangle \quad (7.9)$$

Celle-ci intervient dans le calcul de la valeur moyenne de tout opérateur à un corps

$$A = \sum_i^N a(\vec{r}_i)$$

$$\begin{aligned}
\langle A \rangle &= \int d^3\vec{r}_1 \dots \int d^3\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \left[\sum_i^N a(\vec{r}) \right] \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\
&= N \int d^3\vec{r}_1 \dots \int d^3\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) a(\vec{r}_1) \psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \\
&= N \int d^3\vec{r} a(\vec{r}) \gamma(\vec{r}, \vec{r})
\end{aligned} \tag{7.10}$$

En introduisant (7.9) dans (7.10) on établit que $\rho(\vec{r}) = \lim_{\vec{r}' \rightarrow \vec{r}} \gamma(\vec{r}, \vec{r}')$ et que

$$\langle A \rangle = N \int d^3\vec{r} a(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \tag{7.11}$$

On a besoin de la matrice densité réduite à deux corps pour le calcul de la valeur moyenne d'un opérateur à deux corps, comme H ou U . On perd donc de l'information en passant de G à γ . En effet l'intégration sur la presque totalité des degrés de liberté de la fonction d'onde (ou de G) effectuée pour évaluer la matrice densité γ élimine de l'information.

7.3 La TFD en tant que théorie à N corps

On va voir que lors du passage de la fonction d'onde à la matrice densité réduite à un corps et donc à la densité moyenne, aucune information n'est perdue tant que l'on ne traite que l'état fondamental du système matériel. Le théorème de Hohenberg-Kohn [44], formulé en 1964, énonce que la relation entre la densité et la fonction d'onde est bijective et que la densité contient autant d'informations sur le système que la fonction d'onde. Les détails mathématiques de sa démonstration peuvent être trouvées dans [25, 26, 44, 45, 46].

7.3.1 Le théorème de Hohenberg-Kohn

Théorème 7.3.1 *Par définition de la densité et en se restreignant à l'état fondamental, on a $\psi_0 \mapsto \rho_0$. Le Théorème de Hohenberg-Kohn (1964) établit que cette relation est bijective dans le cas de l'état fondamental. Autrement dit que la fonction d'onde est une fonctionnelle de la densité $\implies \psi_0 = \psi_0[\rho_0]$.*

Démonstration 7.3.2 *On va d'abord définir certains ensembles forts utiles pour la démonstration.*

- \mathcal{V} : espace des potentiels à un corps locaux
- Ψ : espace des fonctions d'onde de l'état fondamental
- \mathcal{N} : espace des densités de l'état fondamental

Par construction, on sait que $(C : \mathcal{V} \mapsto \Psi)$ est surjective. De plus, $(D : \Psi \mapsto \mathcal{N})$ est surjective car

$$\forall \psi \in \Psi, \rho(\vec{r}) = N \int d^3\vec{r}_2 \dots \int d^3\vec{r}_N \psi^*(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \psi(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (7.12)$$

La démonstration a lieu en plusieurs étapes :

1. Montrons l'injectivité de C , c'est à dire

$$\forall V, V' \in \mathcal{V}, V \neq V' + C^{ste} \implies \psi \neq \psi' \quad (7.13)$$

ou plutôt la contraposée $\psi = \psi' \implies V = V' + C^{ste}$.

On a

$$(T + U + V)\psi = E_0\psi, \text{ et } (T + U + V')\psi' = E'_0\psi' \quad (7.14)$$

Par soustraction

$$(V - V')\psi = (E_0 - E'_0)\psi \quad (7.15)$$

Puisque le potentiel est multiplicatif

$$V = V' + (E_0 - E'_0) \quad (7.16)$$

Ce qui montre que C est injective.

2. Montrons maintenant celle de D à l'aide d'un raisonnement par l'absurde

$$\forall \psi, \psi' \in \Psi, \psi \neq \psi' \implies \rho \neq \rho' \quad (7.17)$$

D'après le principe variationnel de Ritz

$$E_0 = \langle \psi | H | \psi \rangle < \langle \psi' | H | \psi' \rangle \quad (7.18)$$

$$< \langle \psi' | H + V - V' | \psi' \rangle \quad (7.19)$$

$$= E'_0 + \int \rho'(\vec{r}) [v(\vec{r}) - v'(\vec{r})] d^3\vec{r} \quad (7.20)$$

De la même manière $E'_0 < E_0 + \int \rho(\vec{r}) [v'(\vec{r}) - v(\vec{r})] d^3\vec{r}$. Par soustraction et avec l'hypothèse $\rho = \rho'$ on a $E_0 + E'_0 < E'_0 + E_0$.

On a donc une contradiction, l'injectivité de D est prouvée.

D est donc bijective. On vient donc de prouver le théorème de Hohenberg-Kohn.

Corollaires 7.3.3 1. *On peut immédiatement énoncer un premier corollaire. Puisque la fonction d'onde fondamentale est une fonctionnelle de la densité, et que la valeur moyenne d'un opérateur O est aussi une fonctionnelle de la fonction d'onde, par composition toute valeur moyenne d'un opérateur dans l'état fondamental est une fonctionnelle de la densité fondamentale.*

$$\langle O \rangle_0 = \langle \psi_0 | O | \psi_0 \rangle \equiv \langle \psi[\rho_0] | O | \psi[\rho_0] \rangle = O[\rho_0] \quad (7.21)$$

2. *Un second corollaire établit simplement l'existence d'un principe variationnel sur l'énergie mais par rapport à la densité. En effet, puisque $((CD)^{-1} : \rho(\vec{r}) \mapsto v(\vec{r}))$ est bijective*

$$\begin{aligned} E_{v,0} = E_v[\psi_0] &= \langle \psi[\rho_0] | H | \psi[\rho_0] \rangle \\ &\leq \langle \psi[\rho'] | H | \psi[\rho'] \rangle = E_v[\rho'] \end{aligned} \quad (7.22)$$

Ce qui implique

$$E_{v,0} = E_v[\rho_0] \leq E_v[\rho'] \quad (7.23)$$

3. *On obtient en moyennant l'hamiltonien l'expression suivante*

$$E_v[\rho] = F_{HK}[\rho] + \int d^3\vec{r} v(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \quad (7.24)$$

avec

$$F_{HK}[\rho] := \langle \psi[\rho] | T + U | \psi[\rho] \rangle \quad (7.25)$$

où $F_{HK}[\rho]$ est universelle, c'est à dire qu'elle ne dépend pas de v .

4. *La densité de l'état fondamental ρ_0 ne détermine pas seulement la fonction d'onde de l'état fondamental ψ_0 , mais aussi le potentiel v*

$$v(\vec{r}) = v[\rho_0](\vec{r}) \quad (7.26)$$

Ce qui implique clairement que l'énergie du fondamental dépend directement de la densité de l'état fondamental

$$E_{v,0} \equiv E[\rho_0] := \langle \psi[\rho_0] | T + U + V | \psi[\rho_0] \rangle \quad (7.27)$$

Théorème de Eschrig-Pickett-Kappelle-Vignale (2001)

Il s'agit d'une conséquence de (7.26). Ce théorème [48, 49, 50] énonce que les états excités dépendent eux aussi de la densité du fondamental

$$\psi_k(\{\vec{r}_i\}) = \psi_k[\rho_0](\{\vec{r}_i\}) \quad (7.28)$$

mais uniquement lorsque la TFD s'exprime en fonction de la densité de charge. Le théorème n'est pas valide pour TFD s'exprimant en fonction de la densité de spin (TFDS) ou de la densité de courant (TFDC) par exemple. La raison provient du fait de la perte d'unicité, c'est à dire qu'il n'y a plus de relation univoque entre ρ_0 et v [48, 49, 50, 51, 52].

Difficultés mathématiques

L'analyse fonctionnelle de la TFD est particulièrement ardue et fait encore l'objet de nombreuses recherches. Deux problèmes se présentent :

- Tout d'abord la N -représentabilité : comment peut on obtenir à partir d'une densité quelconque une fonction d'onde anti-symétrique à N corps ? La réponse à cette question est fort simple : la densité doit être positive et de carré intégrable
- Ensuite la V -représentabilité : comment peut on être sûr qu'une densité calculée par intégration d'une fonction d'onde anti-symétrique à N corps soit la densité de l'état fondamental d'un système plongé dans un potentiel local $v(\vec{r})$? Il n'y a pas à l'heure actuelle de réponse directe, mais la question n'est pas relevante pour démontrer HK [26, 45, 46](Levy en 1982 et Lieb en 1982).

7.3.2 Modèles de la physique statistique des gaz homogènes d'électrons (1930)

La TFD assure au travers de (7.24), que l'énergie $E_v[\rho]$ est la contribution de deux termes. Malheureusement le terme F_{HK} ne peut être explicité simplement. On est donc obligé de recourir à des approximations issues de modèles empiriques de la physique statistique des gaz homogènes d'électrons et datant des années 1930 : les modèles dits de Thomas-Fermi. Ces derniers sont hiérarchisés par amélioration successive du terme d'énergie cinétique, ainsi que du terme d'échange-corrélation en tenant compte des variations locales de la densité.

Modèle de *Thomas-Fermi*

On approxime F_{HK} par

$$\mathcal{F}_{TF}[\rho] = C_{TF} \int_{\mathbb{R}^3} \rho^{\frac{5}{3}} + \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\rho(\vec{x})\rho(\vec{y})}{|\vec{x} - \vec{y}|} dx dy \quad (7.29)$$

Le premier terme correspond à l'énergie cinétique d'un gaz homogène d'électrons et peut être déterminé simplement. Le second terme décrit l'interaction coulombienne.

Modèle de *Thomas-Fermi-von Weizsäcker*

$$\mathcal{F}_{TFW}[\rho] = C_W \int_{\mathbb{R}^3} |\nabla \sqrt{\rho}|^2 + \mathcal{F}_{TF}(\rho) \quad (7.30)$$

Modèle de *Thomas-Fermi-Dirac-von Weizsäcker*

$$\mathcal{F}_{TFDW}[\rho] = \mathcal{F}_{TFW}(\rho) - C_D \int_{\mathbb{R}^3} \rho^{\frac{4}{3}} \quad (7.31)$$

où $C_{TF} = \frac{3^{\frac{5}{3}}\pi^{\frac{4}{3}}}{10}$, $C_{TFW} = 0.093$, $C_{TFDW} = \frac{3}{4} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}$.

Approximation de Thomas-Fermi

Cette approximation [33, 47, 53, 54] entre dans la catégorie comme nous le verrons plus loin des approximations de la densité locale (LDA). On modélise le gaz d'électrons par un maillage de cellules dans lesquelles la densité ρ et le potentiel v sont considérées comme constantes. On peut donc évaluer la contribution de chacune des cellules homogènes au gaz inhomogène par simple intégration.

On se donne toujours l'énergie de Hartree, c'est à dire l'énergie d'interaction électrostatique

$$U[\rho] \simeq U_H[\rho] = \frac{e^2}{2} \int d^3\vec{r} \int d^3\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (7.32)$$

et on écrit donc pour l'énergie cinétique

$$T[\rho] \simeq T_{LDA}[\rho] = \int d^3\vec{r} t_{hom}(\rho(\vec{r})) \quad (7.33)$$

où t_{hom} est la densité d'énergie cinétique d'un gaz homogène d'électrons de densité constante $[\rho]$.

Pour un système non interagissant un calcul simple montre que

$$t_{s,hom}(\rho) = \frac{3\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}}{10m_e} \quad (7.34)$$

et donc l'approximation de Thomas-Fermi se résume à

$$E[\rho] \simeq E^{TF}[\rho] = T^{LDA}[\rho] + U[\rho] + V[\rho] \quad (7.35)$$

Cette approximation s'avère gravement défailante pour rendre compte de calculs moléculaires. En effet, elle implique que l'énergie d'un ensemble d'atomes isolés est plus faible que celle de la molécule. Cette déficience provient du fait d'une part qu'on ne tient pas compte des corrélations dans l'énergie de Hartree, mais aussi du fait de l'utilisation de l'approximation de densité locale.

7.4 La TFD en tant que théorie effective à un corps

On va maintenant développer une autre implémentation du théorème de Hohenberg-Kohn, celle dite de Kohn-Sham. Celle-ci, très populaire et relativement facile à mettre en oeuvre transforme le problème à N-corps en un problème à un corps dans un potentiel effectif. Cette approche est à rapprocher des méthodes de la Théorie Quantique des Champs où le physicien aime à transformer un problème à N-corps interagissant en N problèmes à un corps non interagissant et évoluant dans un potentiel effectif.

7.4.1 Equations de Kohn-Sham

Energie d'échange-corrélation

La dérivation des équations de Kohn-Sham [55] est particulièrement simple. Dans un premier temps on va tout simplement décomposer l'énergie cinétique en deux contributions $T[\rho] = T_s[\rho] + T_c[\rho]$ où $T_s[\rho]$ est l'énergie cinétique d'un système non interagissant. On peut exprimer T_s à l'aide d'orbitales à une particule d'un système non interagissant :

$$T_s[\rho] \equiv T_s[\{\psi_i[\rho]\}] = \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_i^N \int d^3\vec{r} \psi_i^*(\vec{r}) \nabla^2 \psi_i(\vec{r}) \quad (7.36)$$

On introduit l'énergie de Hartree dans l'expression de l'énergie totale

$$\begin{aligned} E[\rho] &= T[\rho] + U[\rho] + V[\rho] \\ &= T_s[\{\psi_i[\rho]\}] + T_c[\rho] + (U - U_H)[\rho] + U_H[\rho] + V[\rho] \\ &\equiv T_s[\{\psi_i[\rho]\}] + E_{xc}[\rho] + U_H[\rho] + V[\rho] \end{aligned} \quad (7.37)$$

où $E_{xc}[\rho] = E_x[\rho] + E_c[\rho]$ est l'énergie dite d'échange-corrélation contribution des termes d'échange E_x du au principe de Pauli, et de corrélation E_c . Ce dernier inclut donc le terme T_c . Le terme d'échange peut être écrit explicitement comme

$$E_x[\{\psi_i[\rho]\}] = \frac{-e^2}{2} \sum_{j,k} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{\psi_j^*(\vec{r}) \psi_k^*(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}') \psi_k(\vec{r})}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (7.38)$$

Il est à noter que pour obtenir ce terme Le terme de corrélation restant toutefois à modéliser par une fonctionnelle adéquate.

Propriétés de E_{xc}

Si on définit une densité "rescalée" par $\rho_\lambda(\vec{r}) := \lambda^3 \rho(\vec{r})$ alors on peut montrer que

- $E_x[\rho_\lambda] = \lambda E_x[\rho]$
- $E_c[\rho_\lambda] > \lambda E_c[\rho]$, $\lambda > 1$
- $E_c[\rho_\lambda] < \lambda E_c[\rho]$, $\lambda < 1$
- E_{xc} est faible devant T_s , U_H et V

Ces relations permettent de construire des modèles d'échange-corrélation à partir de modèles simples et maîtrisés et d'extrapoler ces résultats à un système plus complexe. Remarquons que la dernière propriété montre que cette démarche ne sera une approximation correcte qu'à partir du moment où le terme E_{xc} , qui doit être modélisé, est faible. Ce qui signifie que seuls les systèmes faiblement corrélés pourront être traités par la Théorie de la Fonctionnelle de Densité.

Equations de Kohn-Sham (1965)

Ecrivons les équations d'Euler-Lagrange pour l'énergie totale par rapport à la densité

$$0 = \frac{\delta E}{\delta \rho} = \frac{\delta T_s}{\delta \rho} + \frac{\delta V}{\delta \rho} + \frac{\delta U_H}{\delta \rho} + \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho} \quad (7.39)$$

$$= \frac{\delta T_s}{\delta \rho} + \underbrace{v(\vec{r}) + v_H(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r})}_{v_s(\vec{r})} \quad (7.40)$$

$$\equiv \frac{\delta T_s}{\delta \rho} + v_s(\vec{r}) \quad (7.41)$$

Ce qui est complètement équivalent à l'équation aux dérivées partielles (EDP) suivante

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v_s(\vec{r}) \right] \phi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i(\vec{r}) \quad (7.42)$$

On constate qu'on a affaire à une EDP type Schrödinger pour une particule dans un potentiel effectif, mais la caractéristique principale est que l'on retrouve la self-consistance du fait que v_s dépend de la densité et que

$$\rho(\vec{r}) = \rho_s(\vec{r}) = \sum_i^N |\phi_i(\vec{r})|^2, \quad (7.43)$$

autrement dit la solution dépend de v_s qui dépend de ρ . Il faut noter que les orbitales solutions de cette équation n'ont pas de "réalité" physique dans le sens qu'elles ne

sont pas des fonctions d'ondes monoélectroniques. Par contre elle donne par (7.43) la bonne densité. Cependant, dans de nombreuses situations, comme la présence de quasi-particules fermioniques et en l'absence de corrélations fortes, les énergies de Kohn-Sham sont proches des énergies "réelles" [56]. En effet, en calculant l'énergie comme la valeur moyenne de l'opérateur développé dans (7.37), et en écrivant que

$$\begin{aligned} V[\rho] &= \int d^3\vec{r} v(\vec{r})\rho(\vec{r}) = \int d^3\vec{r} [v_s(\vec{r}) - v_H(\vec{r}) - v_{xc}(\vec{r})]\rho(\vec{r}) \\ &= V_s[\rho] - \int d^3\vec{r} [v_H(\vec{r}) + v_{xc}(\vec{r})]\rho(\vec{r}) \end{aligned} \quad (7.44)$$

on obtient

$$E_0 = \sum_i^N \epsilon_i - \frac{e^2}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \frac{\rho_0(\vec{r})\rho_0(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (7.45)$$

$$- \int d^3\vec{r} v_{xc}(\vec{r})\rho_0(\vec{r}) \quad (7.46)$$

Dans le cas de systèmes faiblement corrélés, les deux derniers termes sont faibles et on peut donc utiliser les énergies de Kohn-Sham.

Lien entre les équations de Kohn-Sham et de Dyson

Avant d'établir un lien entre l'équation de Kohn-Sham et celle de Dyson, rappelons les principales équations utilisées en mécanique quantique non relativiste.

- Equation de Hartree : c'est l'équation la plus simple à obtenir. Il suffit pour cela de considérer que la fonction d'onde à N-corps est le simple produit de fonctions d'onde monoélectroniques et que le principe d'exclusion de Pauli n'intervient pas.

$$H_H \phi_i^H(\vec{r}) \equiv \left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v(\vec{r}) + v_H(\vec{r}) \right] \phi_i^H(\vec{r}) = \epsilon_i \phi_i^H(\vec{r}) \quad (7.47)$$

- Equation de Hartree-Fock : on tient compte dans l'équation de Schrödinger du principe d'exclusion de Pauli et on fait l'approximation qu'une fonction d'onde fermionique à N-corps s'écrit comme un déterminant de Slater, et ce, afin de prendre en compte le principe d'exclusion de Pauli. Il apparaît ainsi un nouveau terme, le terme d'échange-corrélation dû au fait que les spins sont corrélés.

$$H_H \phi_i^{HF}(\vec{r}) - e^2 \int d^3\vec{r}' \frac{\gamma(\vec{r}, \vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} \phi_i^{HF}(\vec{r}') = \epsilon_i \phi_i^{HF}(\vec{r}) \quad (7.48)$$

- Equation de Dyson : on peut écrire (7.7) sous une autre forme en utilisant plutôt les fonctions d’ondes [42]

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + v(\vec{r}) \right] \psi_k(\vec{r}) + \int d^3 \vec{r}' \Sigma(\vec{r}, \vec{r}', E_k) \psi_k(\vec{r}') = E_k \psi_k(\vec{r}) \quad (7.49)$$

En fait les équations de Hartree, Hartree-Fock et de Kohn-Sham sont des approximations de Dyson. Il est cependant bien plus facile de trouver une approximation pour le potentiel d’échange-corrélation v_{xc} qui est un opérateur local que pour la self-énergie Σ qui ne l’est pas. Ce qui explique l’intérêt réel des physiciens pour la version Kohn-Sham de la TFD lors de l’étude de problèmes à N-corps.

7.4.2 Résolution des équations de Kohn-Sham

L’équation de Kohn-Sham étant un problème aux valeurs propres self-consistant, une linéarisation s’impose en supposant qu’une procédure itérative convergera vers un point fixe. Mais auparavant il est nécessaire de développer les orbitales de Kohn-Sham sur une base puis de résoudre l’équation séculaire. On présente ci-dessous les principales familles de bases utilisées en physique et en chimie.

Bases utilisées en physique

L’expérience tirée du calcul de structure de bande a permis aux physiciens de développer une connaissance pointue des bases les plus pertinentes pour la physique du solide. On peut distinguer *grosso modo* deux classes de bases suivant qu’elles dépendent ou non de l’énergie.

- Bases indépendantes vis à vis de l’énergie : citons par exemple les bases d’ondes planes, éventuellement orthogonalisées (OPW), de delta de Dirac utilisées lors de l’approximation tight-binding, ou les combinaisons linéaires d’orbitales atomiques (LCAO), ...
- Bases dépendantes de l’énergie : bases d’ondes planes augmentées (APW), ou l’approche KKR (Korringa-Kohn-Rostoker), bases dépendantes de l’énergie mais linéarisées par un développement de Taylor (LMTO, LAPW) [57, 58].

Bases utilisées en chimie

Les chimistes préfèrent les méthodes déterminantales comme Hartree-Fock ou les méthodes dites d’interaction de configuration, aux méthodes issues de la DFT. Malgré tout, les bases utilisées pour les méthodes déterminantales sont elles aussi employées en DFT. Il existe *grosso modo*, deux types de bases en chimie selon la nature de la décroissance des fonctions par rapport à la distance radiale

- Bases à décroissance exponentielle radiale (STO)

– Bases de type gaussienne (GTO)

Les bases STO permettent de mieux refléter les propriétés des fonctions d'ondes réelles [24, 43]. Par contre les bases gaussienne permettent d'effectuer un calcul analytique des éléments de matrice de l'hamiltonien et non une quadrature comme pour les bases STO. Ainsi le temps de calcul de l'hamiltonien est considérablement réduit.

7.5 La TFD en pratique

Hormis le choix d'une base pour ramener la résolution de l'équation de Kohn-Sham à un problème séculaire, une autre approximation est nécessaire. Il s'agit du choix d'une modélisation adaptée pour l'énergie d'échange-corrélation. On renvoie aux références pour plus de détails [25]-[39].

7.5.1 Fonctionnelles locales

L'approche la plus simple et immédiate est l'Approximation de Densité Locale (ADL ou LDA en anglais). Rappelons que dans l'approximation de Thomas-Fermi, l'énergie cinétique par unité de volume est donnée pour un système homogène, c'est à dire à densité constante, par

$$t_{s,hom}(\rho) = \frac{3\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}}{10m_e} \quad (7.50)$$

Pour un système inhomogène l'approximation LDA va simplement consister en

$$t_s(\vec{r})^{LDA} \equiv t_s(\vec{r}) \simeq t_{s,hom}(\rho(\vec{r})) = \frac{3\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}\rho^{5/3}(\vec{r})}{10m_e} \quad (7.51)$$

On retrouve l'énergie cinétique par simple intégration

$$T_s^{LDA}[\rho] = \int d^3\vec{r} t_s^{LDA}(\vec{r}) = \frac{3\hbar^2(3\pi^2)^{2/3}}{10m_e} \int \rho^{5/3}(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (7.52)$$

Il s'avère que cette approximation rend l'énergie cinétique d'un système non interagissant T_s inférieure à l'énergie cinétique réelle, c'est à dire celle obtenue par la résolution des équations de Kohn-Sham. Cependant, l'approximation LDA va aussi permettre de modéliser l'énergie d'échange-corrélation $E_{xc}[\rho]$.

Commençons par l'énergie d'échange. On sait que pour un système homogène [25, 26] la densité de l'énergie d'échange est donné par

$$e_{x,hom}(\rho) = -\frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \rho^{4/3} \quad (7.53)$$

Par intégration sur tout l'espace

$$E_x^{LDA}[\rho] = -\frac{3e^2}{4} \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \int d^3\vec{r} \rho^{4/3}(\vec{r}) \quad (7.54)$$

Par contre, il est beaucoup plus délicat d'essayer de répéter la démarche pour approcher l'énergie de corrélation. En effet, l'énergie de corrélation n'est pas du tout connu pour un système quand bien même homogène. C'est un problème à N-corps très ardu et faisant encore l'objet de nombreuses recherches. Plusieurs méthodes issues de la Théorie Quantique des Champs et de la Théorie Statistique des Champs ont fait leur apparition ces dernières années

- Approche par perturbations (RPA)[59, 60]
- Approche par Monte-Carlo Quantique (QMC) pour les liquides d'électrons [61, 62, 63, 64]

7.5.2 Fonctionnelles semi-locales

Pour tenir compte des variations de densité d'un gaz inhomogène on effectue un développement en gradient en introduisant $|\nabla\rho(\vec{r})|$, $|\nabla\rho(\vec{r})|^2$, $\nabla^2\rho(\vec{r})$, \dots

Prenons pour exemple la correction de Weizsacker au premier ordre de l'approximation de Thomas-Fermi [25, 26]

$$T_s[\rho] \simeq T_s^{LDA}[\rho] + \frac{\hbar^2}{8m_e} \int d^3\vec{r} \frac{|\nabla\rho(\vec{r})|^2}{\rho(\vec{r})} \quad (7.55)$$

De la même manière on obtient pour l'énergie d'échange

$$E_x[\rho] \equiv E_x[\rho]^{GEA} \simeq E_x^{LDA}[\rho] - \frac{10e^2}{432\pi^3\pi^{1/3}} \int d^3\vec{r} \frac{|\nabla\rho(\vec{r})|^2}{\rho(\vec{r})^{4/3}} \quad (7.56)$$

Des expansions du gradient à des ordres supérieurs n'apportent pas en général d'améliorations significatives à l'approximation LDA pour le terme d'échange. Bien au contraire, elles ont pour effet de l'affaiblir. C'est pour cela, qu'une autre voie est possible, qui consiste à utiliser une fonction de la densité et de son gradient pour l'énergie d'échange-corrélation

$$E_{xc}[\rho]^{GGA} = \int d^3\vec{r} e(\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r})) \quad (7.57)$$

Cette modélisation est dénommée Approximation du Gradient Généralisé [59, 60, 62, 63, 64] (GGA en anglais). On voit tout de suite que les approximations GGA seront différentes selon la nature de la fonction $e(\rho(\vec{r}), \nabla\rho(\vec{r}))$. Citons simplement qu'en physique l'approximation GGA la plus utilisée est celle de Perdew, Burke et Ernzerhof (PBE) [66] et qu'en chimie c'est celle dénommée BLYP, qui est un mélange de la

fonctionnelle d'échange de Becke de 1988, ainsi que de la fonctionnelle de corrélation de Lee, Yang et Parr (LYP)[67]. L'expérience montre que l'approximation GGA fournit d'excellents résultats pour le calcul des liaisons chimiques, qu'elles soient covalentes, ioniques, métalliques ou de type hydrogène. Elle achoppe toutefois lors de l'évaluation des forces de Van der Waals, sauf peut-être PBE. En effet il est délicat de calculer ces quantités car celles-ci restent extrêmement faibles.

De nombreuses tentatives "post-GGA" ont permis d'améliorer les fonctionnelles [35, 36, 68, 69]. La plus usitée en chimie quantique est sûrement B3LYP. Cette dernière est une combinaison de LYP et de B3, la fonctionnelle hybride de Becke à 3 paramètres. A l'instar de B3LYP, un grand nombre de fonctionnelles hybrides font un mixage de l'énergie d'échange de Hartree-Fock et d'une fonctionnelle d'échange de la DFT. C'est une démarche complètement empirique qui oblige les chimistes à changer de fonctionnelles dès lors que les résultats ne sont pas satisfaisants.

Chapitre 8

Extensions de la TFD

Jusqu'à présent la TFD n'a été exprimée qu'en fonction de la densité de charge ou de particules (puisqu'elles sont toutes identiques), ce qui fait de cette dernière une grandeur fondamentale de la physique à N-corps que nous souhaitons modéliser. Toutefois, cette formulation n'est pas la plus utilisée dans les applications et en particulier dans les codes de calcul.

8.1 Théorie de la Fonctionnelle de Densité de Spin (TFDS)

La TFDS, ou SDFT en anglais, consiste simplement à introduire une densité pour chaque spin : $n_{\uparrow}(\vec{r})$ et $n_{\downarrow}(\vec{r})$ [25, 26, 60, 62]. On a ainsi deux variables fondamentales et on retrouve la densité totale par

$$\rho(\vec{r}) = n_{\uparrow}(\vec{r}) + n_{\downarrow}(\vec{r}) \quad (8.1)$$

ainsi que la magnétisation totale comme

$$m(\vec{r}) = \mu_0(n_{\uparrow}(\vec{r}) - n_{\downarrow}(\vec{r})) \quad (8.2)$$

où $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_e c}$ est le magnéton de Bohr. Remarquons que les variables fondamentales pourraient être de manière complètement équivalentes la densité de charge ainsi que la magnétisation.

On peut reformuler le théorème de Hohenberg-Kohn ainsi que les deux premiers corollaires en fonction des densités de spins.

En présence d'un champ magnétique $B(\vec{r})$ qui couple les spins au travers du terme de Zeeman $\int d^3\vec{r} m(\vec{r})\vec{B}(\vec{r})$, la fonction d'onde de l'état fondamental ainsi que les observables dans cet état là, ne sont des fonctionnelles uniques des densités de spins, ou alors de ρ et m . A certaines exceptions près, on pourra donc reprendre les notations utilisées pour presque la totalité des résultats de la TFD, théorème de Hohenberg-Kohn et équations de Kohn-Sham, en rajoutant un index pour le spin. Parmi les exceptions mentionnées, le calcul de l'énergie d'échange

$$E_x^{TFDS}[n_\uparrow(\vec{r}), n_\downarrow(\vec{r})] = \frac{1}{2}(E_x^{TFD}[2n_\uparrow(\vec{r})] + E_x^{TFD}[2n_\downarrow(\vec{r})]) \quad (8.3)$$

8.1.1 Equations de Kohn-Sham en TFDS

Elles s'écrivent simplement

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} + v_{s,\sigma}(\vec{r}) \right] \phi_{i,\sigma}(\vec{r}) = \epsilon_{i,\sigma} \phi_{i,\sigma}(\vec{r}) \quad (8.4)$$

où $v_{s,\sigma}(\vec{r}) = v_\sigma(\vec{r}) + v_H(\vec{r}) + v_{xc,\sigma}(\vec{r})$, σ étant l'indice de spin. En physique quantique non-relativiste, v_H ne dépend pas du spin, mais en présence d'un champ magnétique, on a $v_{s,\sigma}(\vec{r}) = v(\vec{r}) - \epsilon \mu_0 B$ où $\epsilon = \pm 1$ suivant le spin. Enfin on a l'expression du potentiel d'échange-corrélation

$$v_{xc,\sigma}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}^{TFDS}[n_\uparrow(\vec{r}), n_\downarrow(\vec{r})]}{\delta \rho_\sigma} \quad (8.5)$$

Remarquons qu'en présence d'un champ magnétique interne B_{xc} , comme dans le cas de systèmes à spins polarisés, on peut montrer simplement que

$$B_{xc} = \frac{v_{xc,\uparrow} - v_{xc,\downarrow}}{\mu_0} \quad (8.6)$$

Ce champ est en particulier responsable du ferromagnétisme dans les métaux de transition. Il existe de nombreuses tentatives de construction de fonctionnelles d'échange-corrélation en TFDS, comme celles par exemple de Kurth et Perdew [35, 36].

8.2 TFDR

Si les directions des spins ne sont pas colinéaires dans l'espace, comme dans les terres rares où leur lieu géométrique sont des hélices, ou dans certains matériaux ferromagnétiques, on utilise un vecteur magnétisation et non plus un scalaire comme précédemment. Cette non-colinéarité des spins tire son origine du couplage spin-orbite, qui est comme nous le savons tous un effet relativiste. La TFDS ne pouvant donc inclure les phénomènes relativistes, il est nécessaire de construire d'autres théories basées non plus sur les densités scalaires mais sur le quadri-vecteur de densité de courant relativiste afin de pouvoir traiter les couplages spin-orbite. On a vu ainsi apparaître la Théorie de la Fonctionnelle de Densité Relativiste (TFDR ou RDFT en anglais) [70, 71]. Les équations de Kohn-Sham y sont remplacées par des équations de type Dirac à une particule et non plus de type Schrödinger à une particule. Cependant de nombreux problèmes subsistent encore [31, 38, 39], notamment la renormalisabilité de la théorie, la définition d'un principe variationnel pour les états d'énergie négatives.

8.3 TFDC

Certaines recherches sur la Résonance Magnétique Nucléaire (RMN), ou l'effet Hall quantique par exemple nécessitent d'étudier les propriétés magnétiques des matériaux et entre autres de connaître l'état des courants dans le système ainsi que leurs couplages avec des champs extérieurs. La TFDS ne peut être le cadre formel pour obtenir de telles informations. En théorie la TFDR le pourrait, mais la complexité intrinsèque de son formalisme ne permet de l'exploiter que dans une version appauvrie où on ne tient compte que des spins.

Une avancée considérable a été rendu possible par Vignale et Rasolt [72, 73], au travers de la construction de la Théorie de la Fonctionnelle de Densité de Courant (TFDC ou CDFT en anglais) non-relativiste. Ils ont put formulé la théorie à partir de la densité de spins et du vecteur densité de courant paramagnétique, non-relativiste bien entendu [74, 75, 76, 77] .

Un résultat particulièrement intéressant du à Gross et Kappelle [78] montre que l'existence de courants de spins implique un lien entre les fonctionnelles d'échange corrélation de la TFDS et celles de la TFDC, *grosso modo* de manière analogue à celui qui existe entre les fonctionnelles de la TFDS et celles de la TFD.

Nous retrouverons le formalisme de la TDFC lors de l'étude d'un modèle de liquide quantique afin de retrouver aisément les équations effectives du mouvement d'un fluide.

8.4 TFDDT

Il existe un grand nombre d'approches pour essayer d'évaluer les états excités. Certains physiciens comme Gunnarsson et Lundqvist [60] proposèrent l'utilisation d'une fonctionnelle d'échange-corrélation dépendante des symétries du système pour calculer les états excités les plus bas pour chaque classe de symétrie.

Une autre approche pour les états excités est constituée par la TFD dépendante du temps (TFDDT ou TDDFT en anglais) [79, 142, 81]. Le théorème de Hohenberg-Kohn est alors remplacé par celui de Runge-Gross. Cette approche a permis d'extraire facilement les états excités et est désormais implémentée dans la plupart des codes de calcul.

La TFDDT permet aussi l'étude de système couplés à des champs extérieurs comme des systèmes atomiques soumis à des lasers intenses.

Quatrième partie

Groupe de Renormalisation et
Théorie de la Fonctionnelle de
Densité pour le calcul *ab initio*

Chapitre 9

Simulations *ab initio* rapides

On se placera désormais toujours dans le cadre de la TFD, voire de la TFDS puisque fondamentalement cette dernière ne fait que découpler le problème avec des spins en deux problèmes de type TFD.

Les progrès récents de l'informatique et de l'analyse numérique, couplés aux avancées de la physique et de la chimie théorique, ont permis d'envisager de simuler des systèmes matériels de plus en plus complexes sur la base de la TFD. Les applications et les ouvertures sont innombrables, puisqu'elles vont de la physico-chimie du solide, à la biologie moléculaire, à la géologie, etc.

Il ne faut toutefois pas négliger la mise en oeuvre algorithmique de la résolution des équations de Kohn-Sham, qui comme on le verra exhibe des problèmes de précision et de temps de calcul sur ordinateur. On définit en général la complexité algorithmique à l'aide de la puissance exprimée dans le temps de calcul $T_{CPU} = K \cdot N^\alpha \equiv \mathcal{O}(N^\alpha)$. On développera l'algorithmique type d'un traitement TFD ainsi que sa complexité. Enfin, de nouvelles méthodes à temps de calcul linéaire par rapport à la taille des systèmes seront présentées.

9.1 Algorithmes SCF

Comme il a déjà été remarqué, les équations de Kohn-Sham ou même celles de Hartree-Fock sont self-consistantes. On espère tout de même qu'une procédure itérative permettra de converger vers un point fixe. Considérons donc à présent une équation de la forme

$$\mathcal{F}_\psi \psi = \epsilon \psi \tag{9.1}$$

Les méthodes de résolution usuelles de telles équations sont des méthodes itératives reposant sur l'algorithme de Roothan et dénommés algorithmes SCF ("Self-Consistent Fields" en anglais).

9.1.1 Algorithme de Roothan

A partir de maintenant nous raisonnerons sur la matrice de densité discrétisée dans une base adéquate. Les équations de Fock peuvent s'écrire aussi en fonction de la matrice de densité. Nous pouvons alors décrire l'algorithme de Roothan de la manière suivante :

$$(\rho_0) \longrightarrow \cdots \longrightarrow (\rho_n) \longrightarrow \mathcal{F}_n \longrightarrow \rho_{n+1} \longrightarrow \cdots \longrightarrow \rho_\infty$$

1. Nous initialisons notre itération à partir d'une matrice de densité arbitrairement choisie : ρ_0
2. Une fois connue la matrice de densité ρ_n nous créons l'opérateur \mathcal{F}_n correspondant à cette densité.
3. Nous résolvons l'équation aux valeurs propres :

$$\mathcal{F}_{\rho_n} \psi = \epsilon \psi \tag{9.2}$$

Les solutions de cette équation nous donnent des vecteurs propres $(\psi_i)_{i=1..m}$.

4. Nous ne conservons que les vecteurs propres correspondant aux valeurs propres les plus petites pour construire la matrice densité ρ_{n+1} . Nous appliquons ici le principe aufbau qui consiste à remarquer que les particules occupent, dans l'état fondamental, les états d'énergie les plus faibles. Nous recalculons l'opérateur grâce à cette dernière matrice densité et recommençons le processus à l'étape (2) jusqu'à la convergence du problème.

Nous touchons ici un point délicat puisque cet algorithme ne converge pas toujours convenablement. D'autres méthodes ont été développées pour palier cette difficulté.

9.1.2 Algorithme de Level-Shifting

Il ne s'agit en fait que de corriger le défaut de convergence en introduisant un paramètre b réel tel que

$$\tilde{\mathcal{F}}_n = \mathcal{F}(\rho_n) + b\rho_n \tag{9.3}$$

Le reste du schéma est semblable

$$(\rho_0) \longrightarrow \cdots \longrightarrow (\rho_n) \longrightarrow \tilde{\mathcal{F}}_n = \mathcal{F}(\rho_n) + b\rho_n \longrightarrow \rho_{n+1} \longrightarrow \cdots \longrightarrow \rho_\infty$$

Cet algorithme permet de résoudre les problèmes de convergence, mais laisse en suspend le choix judicieux du paramètre b . Ce choix, loin d'être simple permet toutefois de résoudre les lacunes de convergence des algorithmes de Roothan ou de la méthode DIIS que nous expliquons ce dessous.

9.1.3 Méthode DIIS

DIIS signifie Direct Inversion in the Iteration Space et concrétise l'idée de supprimer le caractère "Markovien" de l'algorithme de Roothan en utilisant toutes (ou seulement les dernières) matrices de densités calculées pour construire l'opérateur (de Fock ou de Kohn-Sham) à chaque étape. Plus exactement

$$\tilde{\mathcal{F}}_n = \sum_{k=0}^n c_k^n \mathcal{F}(\rho_k) \quad (9.4)$$

Les coefficients c_k^n sont calculés en minimisant par moindres carrés la quantité

$$\left\| \sum_{k=0}^n c_k^n e_k \right\|_0^2 \quad (9.5)$$

avec

$$e_k = \mathcal{F}(\rho_k)\rho_k - \rho_k, \mathcal{F}(\rho_k) \quad (9.6)$$

sous la contrainte $\sum_{k=0}^n c_k^n = 1$. Indiquons aussi que la norme $\|\cdot\|_0$ désigne la norme de Hilbert-Schmidt définie par :

$$\|u\|_0 = (\text{Tr}(u^*u))^{1/2} \quad (9.7)$$

La densité est ensuite calculée par le principe aufbau. Ceci se traduit en prenant pour ρ_{n+1} un minimiseur de

$$\inf\{\text{Tr}(\tilde{\mathcal{F}}_n \rho), \rho \in \mathcal{P}_n\}, \quad (9.8)$$

où \mathcal{P}_n est l'espace des projecteurs de l'espace de dimension n . La méthode se résume donc dans le schéma

$$(DIIS) (\rho_k)_{0 \leq k \leq n} \longrightarrow \begin{cases} \tilde{\mathcal{F}}_n = \sum_{k=1}^n c_k^n \mathcal{F}(\rho_k) \\ (c_k^n) \text{ optimisés} \end{cases} \longrightarrow \rho_{n+1} \quad (9.9)$$

Remarque 9.1.1 *On a montré des exemples d'algorithmes convenant aussi bien pour la DFT que pour Hartree-Fock, il convient maintenant de préciser si leur convergence est satisfaisante. Pour l'algorithme de Roothan sous la version DIIS, la plupart du temps, il converge rapidement, ce qui explique qu'il soit le plus souvent utilisé dans les codes de chimie quantique. Cependant il ne converge pas toujours et nous devons alors revenir à l'algorithme de level-shifting avec le choix judicieux du paramètre en suspens.*

9.2 Complexité algorithmique et taille des systèmes

Pour les méthodes de Hartree-Fock, l'étape limitante réside dans l'assemblage de la pseudo-matrice de Fock à chaque itération. On peut choisir ou bien de calculer une fois

pour toutes les $\frac{n^2}{12}$ intégrales biélectroniques, n étant le nombre d'orbitales atomiques et de les stocker sur disque, ou bien de ne pas les stocker et de les calculer chaque fois que cela est nécessaire. On parle dans ce dernier cas de méthodes directes. Dès que la taille du système est assez importante, c'est à dire pour quelques dizaines d'atomes, il est plus efficace d'utiliser une méthode directe, car le gain en temps de calcul est réel. En effet, il est plus rapide de calculer une intégrale biélectronique pour des gaussiennes-polynômes que d'effectuer une lecture sur le disque. La diagonalisation de la pseudo-matrice de Fock s'effectue en général avec une méthode de Jacobi, mais dans le cas où $n \gg N$, les méthodes de puissance inverse s'avèrent bien plus efficaces. La complexité algorithmique d'un calcul Hartree-Fock est donc $N_I \cdot n^4$, où N_I est le nombre d'itérations self-consistantes. Il est à noter que les méthodes dites post Hartree-Fock, comme par exemple les méthodes de perturbation de Moller-Plesset (MP2, MP3, MP4) qui ont des complexités algorithmiques respectives en $\mathcal{O}(n^5)$, $\mathcal{O}(n^6)$, $\mathcal{O}(n^7)$, d'interactions de configurations (CI) ou de multidéterminants qui ont des temps de l'ordre $\mathcal{O}(n^7)$.

Les méthodes issues de la TFD ainsi que les méthodes dites de tight-binding ont l'avantage de n'être limitées que par l'étape de diagonalisation. Ce qui ramène la complexité à $\mathcal{O}(N^3)$. Bien évidemment les constantes de temps peuvent jouer un rôle non-négligeable.

9.3 Méthodes d'ordre N

On se placera désormais dans le cadre de la Théorie de la Fonctionnelle de Densité et de son formalisme.

9.3.1 Formalisme des matrices de densité

La plupart des algorithmes *ab initio* sont basés sur le calcul de la matrice de densité réduite à un corps. D'après le principe dit *auf bau* qui consiste à occuper les états énergétiques les plus bas, cette dernière est un projecteur sur le sous-espace des états de plus basse énergie.

$$\rho = \sum_i f_{\infty, \mu}(\epsilon_i) |\psi_i\rangle \langle \psi_i| = \sum_{i=1}^{N/2} |\psi_i\rangle \langle \psi_i| \quad (9.10)$$

où N est le nombre d'électrons, $(\epsilon_i, |\psi_i\rangle)$ est un mode propre de l'hamiltonien de Kohn-Sham H et f_{β} est défini comme la fonction de distribution de Fermi-Dirac à la température inverse β ,

$$f_{\beta, \mu}(\epsilon) = \frac{1}{1 + e^{\beta(\epsilon - \mu)}}. \quad (9.11)$$

La relation $H = \sum_i \epsilon_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$ nous permet de récrire la matrice de densité réduite comme

$$\rho = f_{\infty, \epsilon_F}(H) = \Theta(\epsilon_F - H), \quad (9.12)$$

Θ étant la fonction de Heaviside. L'énergie moyenne et le nombre de particule peuvent être écrit comme

$$E = 2 \sum_{i,j} \rho_{ij} H_{ji} \quad (9.13)$$

et

$$N = 2 \sum_{i,j} \rho_{ij} S_{ji} \quad (9.14)$$

où la matrice densité est exprimée dans une base d'orbitales localisées

$$\rho = \sum_{ij} \rho_{ij} |\psi_i\rangle\langle\psi_j| \quad (9.15)$$

avec $H_{ij} = \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle$, $S_{ij} = \langle \psi_i | \psi_j \rangle$.

9.3.2 Classes de méthodes

Dans le cadre de la TFD [88, 89, 90], et plus particulièrement pour la résolution des équations de Kohn-Sham [89], des méthodes de calcul rapides ont été développées récemment [91, 92]. On peut les classer en trois catégories

- Développement polynomial de la fonction de distribution de Fermi-Dirac, comme Fermi Operator Expansion (FOE) [93, 95, 94] et Fermi Operator Projection (FOP) [96, 97, 98]
- Méthodes variationnelles comme Density-Matrix Minimization (DMM) [99], Orbital Minimization (OM) [100, 101, 102, 103, 104, 105, 106] et Optimal Basis Density-Matrix Minimization (OBDMM) [107, 108]
- Décomposition de domaine avec la méthode divide-and-conquer (D&C) [109, 110, 111].

On pourrait également rajouter une méthode de point fixe, comme la purification de Mac-Weeny, mais son seul intérêt réside dans le fait qu'elle peut générer un bon initial-guess pour une autre méthode. On développera plus bas une méthode typique de chacune de ces classes afin de montrer leur intérêts.

9.3.3 Comparaisons numériques

On se propose de comparer ces méthodes du point de vue de la précision sur un modèle jouet, le modèle tight-binding à une dimension. On considère un réseau de $2N$ sites avec interactions au plus proche voisin. L'avantage de ce modèle est que l'on connaît l'expression analytique de la matrice densité. En effet l'hamiltonien de ce modèle est donné par [130]

$$H = 2 \sum_i a_i^+ a_i - \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^+ a_j \quad (9.16)$$

On considérera le remplissage des niveaux occupés en half-filling, c'est-à-dire que ce sont les états les plus bas de la moitié du spectre d'énergie qui sont occupés. La matrice des vecteurs propres peut être calculée comme

$$C_{\mu\nu} = \frac{1}{\sqrt{N + \frac{1}{2}}} \sin\left(\frac{\pi\mu\nu}{2N + 1}\right). \quad (9.17)$$

pour $1 \leq \mu \leq 2N$, et $1 \leq \nu \leq N$. La matrice densité réduite

$$\rho = CC^* \quad (9.18)$$

est un projecteur dont les éléments diagonaux valent

$$\rho_{\mu\mu} = \frac{1}{2}. \quad (9.19)$$

Si μ et ν ont la même parité, i.e $\mu - \nu$ est pair, alors $\rho_{\mu\nu} = 0$. Pour $\nu = \mu + 2k + 1$

$$\rho_{\mu\nu} = \frac{1}{4N + 2} \left[\frac{(-1)^k}{\sin \frac{\pi}{2} \frac{2k+1}{2N+1}} - \frac{(-1)^{\mu+k}}{\sin \frac{\pi}{2} \frac{\mu+k+\frac{1}{2}}{2N+1}} \right]. \quad (9.20)$$

Afin de calculer la décroissance de $\rho_{\mu\nu}$, on considère la limite $N \rightarrow \infty$ tout en gardant $\nu - \mu = 2k$ fixé,

$$\rho_{\mu, \mu+2k} \approx \frac{(-1)^k}{2k\pi}. \quad (9.21)$$

Selon la définition proposée par Kohn [114], ce système est un métal. On s'attend donc à ce qu'il exhibe certains problèmes de temps de calcul et de précision. On va tout de même comparer les erreurs relatives des méthodes FOE, DMM et de point fixe en fonction de la taille des systèmes afin de montrer les caractéristiques évidentes de ces méthodes.

Les programmes permettant de simuler toutes les méthodes présentées ci-dessous ont été écrit en langage C (norme ANSI).

9.3.4 Principe de "myopie"

Ce principe énonce [112, 113, 114] que les éléments de la matrice de densité réduite sont négligeables au delà d'une distance ca où a est le pas du réseau,

$$|i - j| > c \Rightarrow \rho_{ij} \simeq 0, \quad (9.22)$$

Ce qui donne

$$E \simeq 2 \sum_i \sum_{\max(0, i-c) < j < \min(N, i+c)} \rho_{ij} H_{ji}. \quad (9.23)$$

La décroissance des éléments de la matrice ρ dans l'espace réel dépend du type de matériaux étudié. Pour les systèmes avec gap, la décroissance est exponentielle [112, 113, 114, 115, 116]

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = e^{-\alpha|\vec{r}-\vec{r}'|} \quad (9.24)$$

où $\alpha \sim \sqrt{\Delta\epsilon_{gap}}$ pour la limite de liaison forte (dite tight-binding) et $\alpha \sim a_{lattice} \cdot \Delta\epsilon_{gap}$ pour la limite de liaison faible (dite weak-binding). Pour les systèmes sans gap, la décroissance de ρ est zéro à température nulle[116, 117]

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = k_F \frac{\cos(k_F |\vec{r} - \vec{r}'|)}{|\vec{r} - \vec{r}'|^2} \quad (9.25)$$

Une telle décroissance caractérise l'existence de corrélations à longue portée et empêchera comme on le verra plus loin de développer des algorithmes rapides. Par contre, dans le cas de systèmes désordonnés, les éléments de matrice décroissent bien plus vite avec la distance [118, 119].

On va donc mettre à profit ce principe de myopie en définissant une nouvelle multiplication de matrices qui n'opère que sur les éléments de matrice non négligeables.

Remarque 9.3.1 *Pour que ces multiplications tronquées aboutissent à une certaine précision près à la matrice densité, on se doit de représenter l'hamiltonien dans une base localisée afin qu'il soit représenté par une matrice creuse.*

9.3.5 Expansion polynômiale

La relation (9.12) entre la matrice de densité réduite et l'hamiltonien est fonctionnelle. On peut donc essayer de développer la fonction de distribution de Fermi-Dirac sur une base de polynôme. La méthode FOE utilise les polynômes de Chebychev [93, 94, 95] et reste une des méthodes les plus efficaces et les mieux contrôlés pour aboutir à des temps de calcul raisonnables. Les polynômes de Chebychev sont définis par une formule récursive

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_{n+2}(x) &= 2xT_{n+1}(x) - T_n(x) \end{aligned} \quad (9.26)$$

pour $-1 \leq x \leq 1$. On montre facilement que $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$. On utilise la forme fonctionnelle (9.12) pour fitter ρ à l'aide d'un polynôme de Chebychev d'ordre p ,

$$\rho_\beta = f_{\beta,\mu}(H) \simeq \sum_{i=0}^p a_i(\beta_s, \mu_s) T_i(H_s) \quad (9.27)$$

où H_s est l'hamiltonien adimensionné, rescalé et shifté sur $[-1, 1]$,

$$\begin{aligned} H_s &= \frac{H - \bar{E}}{\Delta E} \\ \bar{E} &= \frac{1}{2}[\min(\text{spec}(H)) + \max(\text{spec}(H))] \\ \Delta E &= \frac{1}{2}[\max(\text{spec}(H)) - \min(\text{spec}(H))] \end{aligned} \quad (9.28)$$

et $\beta_s = \beta \Delta E$, $\mu_s = (\mu - \bar{E})/\Delta E$.

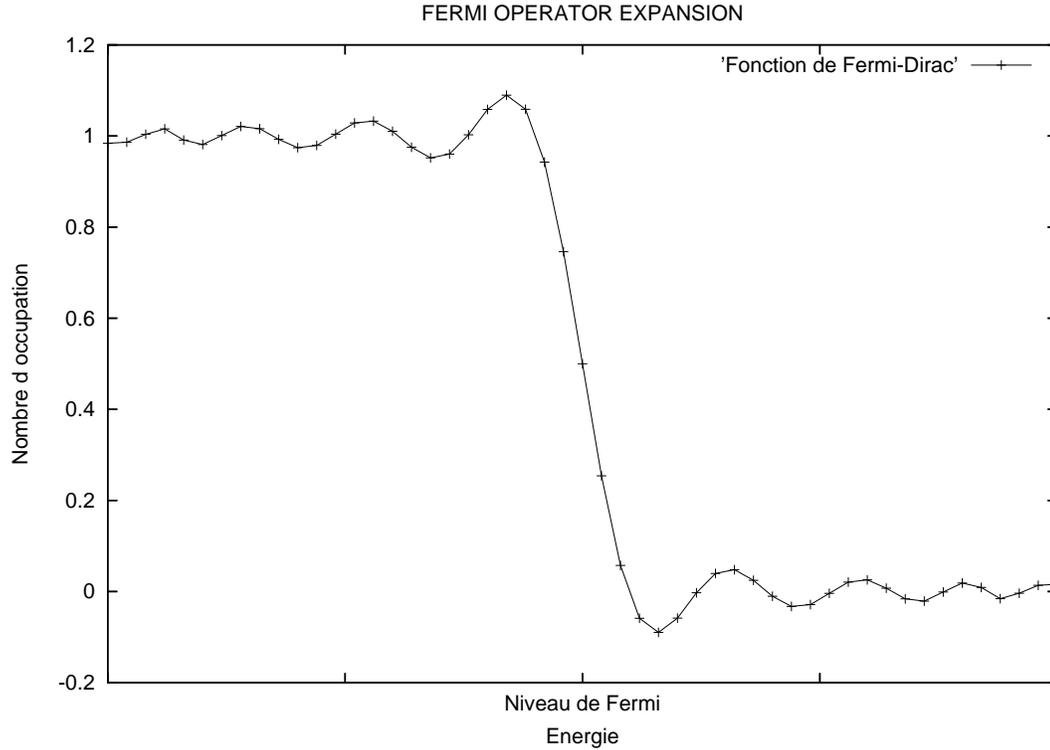


FIG. 9.1 – Oscillations de Gibbs lors de l’approximation de la distribution de Fermi-Dirac à température nulle par une approximation de type FOE

La plus petite et la plus grande valeur propre de H peuvent être calculées à l’aide d’une méthode de Lanczos, laquelle méthode nécessite un temps de calcul linéaire avec la taille de la matrice. Les coefficients de la projection sur les polynômes sont

$$a_n(\beta_s, \mu_s) = \frac{2 - \delta_{n0}}{\pi} \int_0^\pi \cos(n\theta) \frac{1}{1 + e^{\beta_s(\cos \theta - \mu_s)}} d\theta \quad (9.29)$$

Hormis à température nulle où la distribution de Fermi-Dirac est une fonction de type Heaviside et où l’on dispose d’une expression analytique exacte [122], les a_n sont déterminés numériquement à l’aide d’une transformée de Fourier rapide. La conservation du nombre de particules fixe la valeur de l’énergie du niveau de Fermi ϵ_F par résolution de l’équation (9.14).

Remarque 9.3.2 Notons que la méthode FOE a l’énorme avantage d’être intrinsèquement parallélisable. En effet, le calcul récursif des polynômes peut s’effectuer sur les vecteurs de la base canonique qui composent la matrice identité. Ainsi chaque processeur pourrait traiter un des vecteurs colonnes de la matrice $T_n(H_s)$.

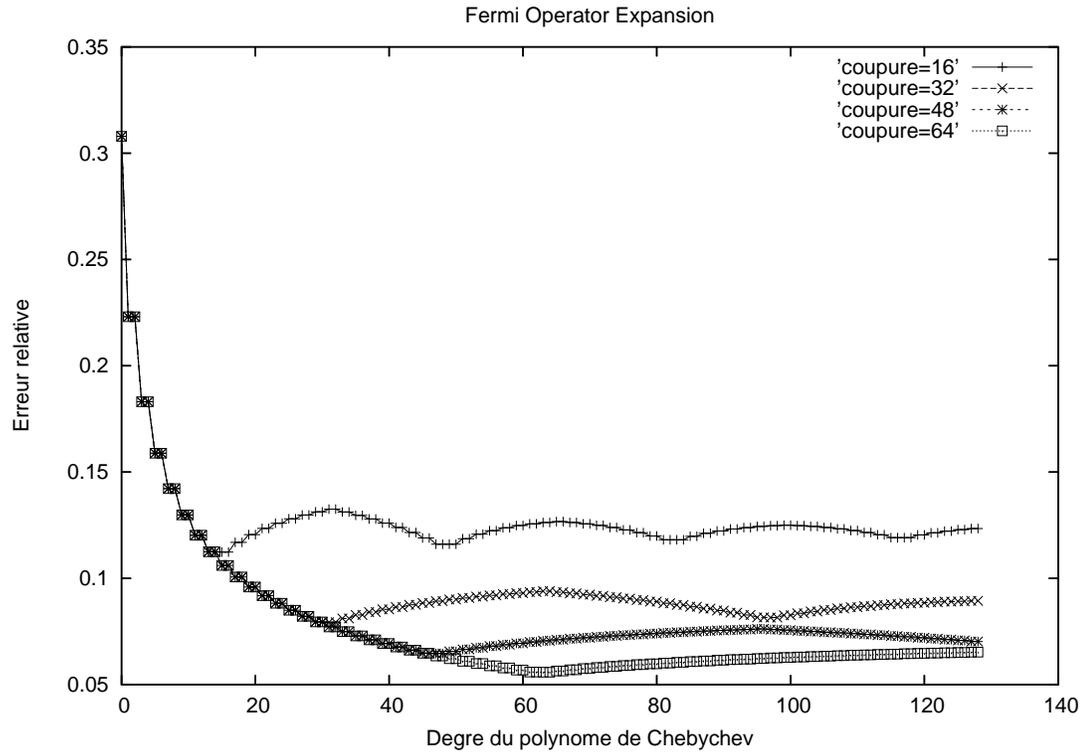


FIG. 9.2 – Erreurs relatives en fonction du degré polynomial de la méthode FOE appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64.

La précision du développement polynômial peut être appréciée si l'on se rappelle que la troncature des T_n de (9.26) doit se faire de telle manière à ce que seuls les éléments de matrice $(T_n(H))_{ij}$ avec $|i - j| \leq c$ soient retenus lors des multiplications matricielles. Le temps de calcul sera alors de l'ordre $pc^2N = \mathcal{O}(N)$. La précision du calcul peut souffrir d'un problème récurrent et bien connu en traitement du signal : les oscillations de Gibbs. Ces dernières sont représentées sur la figure (9.1) et résultent du fitting par des polynômes de la fonction de Heaviside. Ces oscillations ont malheureusement pour effet de créer des nombres d'occupation erronés. On peut éventuellement amortir ces oscillations. On renvoie à l'excellent article [122] pour plus de détails.

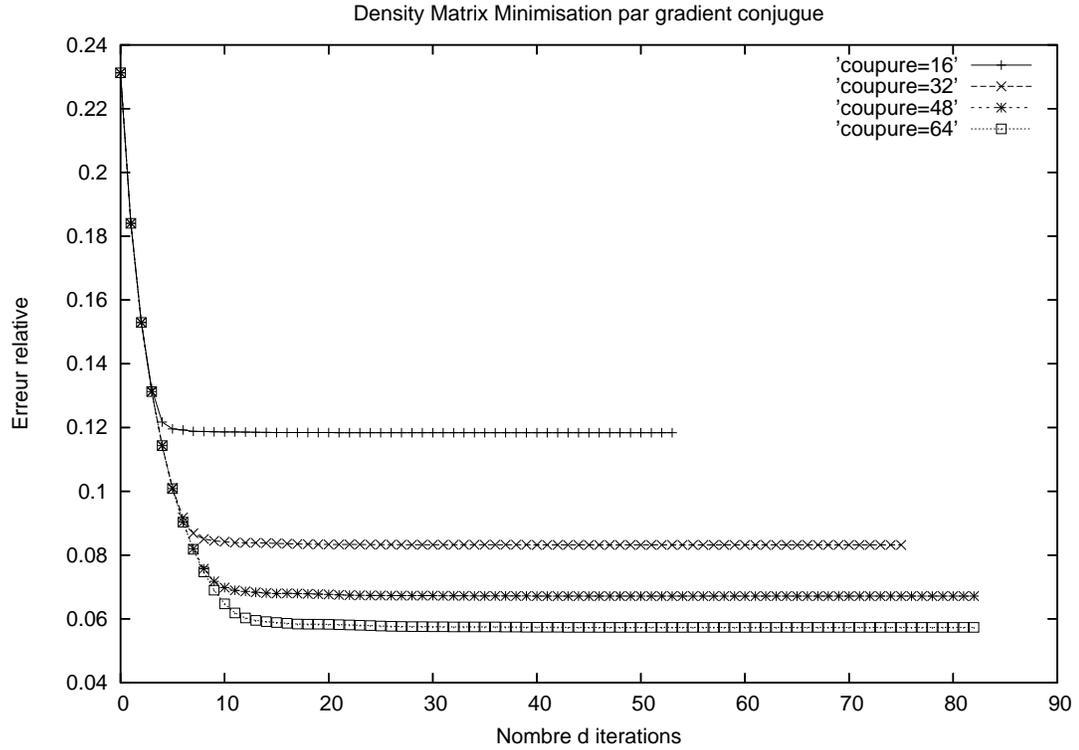


FIG. 9.3 – Erreurs relatives en fonction des itérations de la méthode DMM par gradient conjugué appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64. L'optimisation s'achève pour une norme du gradient inférieure à $\epsilon = 10^{-3}$.

9.3.6 Minimisation d'une fonctionnelle de la matrice de densité

La matrice densité peut être évaluée en tant que solution d'un problème de minimisation d'une fonctionnelle. Cependant ce problème est contraint par le fait que la matrice densité est un projecteur dont le rang est égal au nombre de particules. On a ainsi deux contraintes fortes : l'idempotence et le rang. Un exemple d'une telle procédure est la technique dite Density-Matrix Minimization (DMM) développée par Li, Nunes et Vanderbilt [99]. Dans cette approche la fonctionnelle choisie est la fonction $\Omega = E - \mu N$. On peut aussi l'écrire comme une fonctionnelle de la densité

$$\Omega(\rho) = E - \mu N = \text{Tr} \rho (H - \mu) \quad (9.30)$$

La condition d'idempotence peut s'écrire comme $\rho = \rho^2$, ce qui implique que

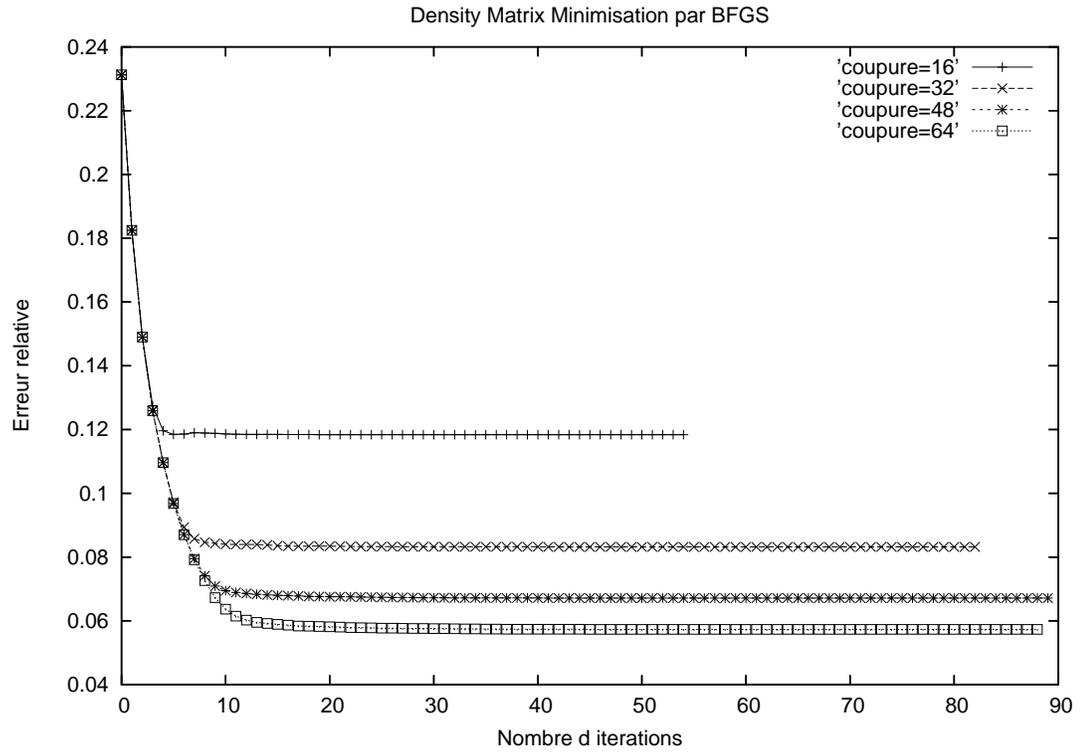


FIG. 9.4 – Erreurs relatives en fonction des itérations de la méthode DMM par quasi-newton (BFGS à mémoire limitée) appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64. L'optimisation s'achève pour une norme du gradient inférieure à $\epsilon = 10^{-3}$.

$$\rho = 3\rho^2 - 2\rho^3 \quad (9.31)$$

On écrit finalement

$$\Omega(\rho) = \text{Tr}[(3\rho^2 - 2\rho^3)(H - \mu)] \quad (9.32)$$

On arrive ainsi à un problème de minimisation sans contraintes, puisqu'elles ont été incluses dans la fonctionnelle. On va donc la minimiser sur l'espace des matrices hermitiennes de taille N . Le gradient de cette fonctionnelle peut être calculé directement en prenant pour métrique celle induite par le produit scalaire de Hilbert-Schmidt $\langle A|B \rangle_{HS} = \text{Tr}(A^*B)$ où A et B sont des matrices

$$\nabla\Omega(\rho) \cdot h = \text{Tr}\{[(3(\rho \cdot h + h \cdot \rho) - 2(\rho \cdot h \cdot \rho + \rho^2 \cdot h + h \cdot \rho^2))(H - \mu)]\} \quad (9.33)$$

Puisqu'une topologie métrique a été définie au travers du produit scalaire, on peut envisager de minimiser la fonctionnelle à l'aide d'une méthode de descente soit du premier ordre comme un gradient conjugué [127, 128], soit une méthode du second ordre du type quasi-newton [128]. Dans le cas d'un gradient conjugué on utilise une direction de type Polak-Ribière. On se donne donc un initial-guess ρ_0 , éventuellement calculé par une méthode de type purification de Mac-Weeny. A partir de là on détermine le gradient en ce point

$$D_0 = \nabla\Omega(\rho_0) \quad (9.34)$$

La fonctionnelle n'étant pas quadratique il est préférable de calculer les directions de descente à l'aide de la formule de Polak-Ribière

$$D_k = \nabla\Omega(\rho_k) + \frac{\langle \nabla\Omega(\rho_k) | \nabla\Omega(\rho_k) - \nabla\Omega(\rho_{k-1}) \rangle_{HS}}{\|\nabla\Omega(\rho_{k-1})\|^2} D_{k-1} \quad (9.35)$$

Observons que les multiplications apparaissant dans le produit scalaire doivent être des multiplications tronquées si l'on a un temps de calcul raisonnable. L'itérée suivante de la matrice de densité est donnée par

$$\rho_{k+1} = \rho_k - r_k D_k \quad (9.36)$$

Le coefficient de descente faisant lui-même l'objet d'une minimisation

$$r_k = \arg \min_{r \in \mathbb{R}} \{\Omega(\rho_k - r D_k)\} \quad (9.37)$$

Mais en réalité on l'obtient en résolvant une équation du troisième degré. Dans le cas d'une méthode d'ordre deux, comme une méthode de quasi-newton, on a besoin de connaître le hessien de la fonctionnelle. Le gradient étant déjà un tenseur d'ordre deux, le hessien est donc un tenseur d'ordre quatre. Si l'on veut simuler de grands systèmes, il faudra beaucoup de mémoire pour stocker les éléments du hessien. On va donc plutôt utiliser un algorithme qui ne retient pas tout le hessien mais qui est capable à chaque itération de le reconstituer rapidement. Il s'agit de l'algorithme BFGS à mémoire limitée [128].

Remarque 9.3.3 *On peut aussi construire d'autres fonctionnelles, mais dépendant plutôt d'orbitales. C'est le cas dans la méthode OM (Orbitals Minimization) [100, 101, 102, 103, 104, 105, 106] implémentée dans le code SIESTA (Spanish Initiative for Electronic Simulation with Thousands Atoms).*

9.3.7 Méthode Divide & Conquer

C'est une adaptation naïve des méthodes de décomposition de domaine très utilisées en mécanique des milieux continus [109, 110, 111]. On ne s'attardera pas sur cet algorithme car il est difficile de maîtriser et d'estimer les erreurs *a priori*. Disons simplement que l'idée première est de définir une partition de l'unité indexé par un ensemble dénombrable I , permettant ainsi de diviser le système dans l'espace réel en sous-système disjoint

$$\sum_I P_{i,j}^I = 1 = \sum_I (q_i^I + q_j^I) \quad (9.38)$$

avec $q_i^I = \frac{1}{2}$ si $i \in I$ et $q_i^I = 0$ si $i \notin I$. On peut donc écrire les éléments de la matrice densité totale comme

$$\rho_{i,j} = \left(\sum_I P_{i,j}^I \right) \rho_{i,j} \equiv \sum_I \rho_{i,j}^I \quad (9.39)$$

avec $\rho_{i,j}^I = 0$ lorsque $i \notin I$ et $j \notin I$.

Les matrices densités locales ρ^I sont obtenues par diagonalisation des hamiltoniens locaux H^I .

9.3.8 Méthode de point fixe

Il s'agit simplement d'utiliser la propriété d'idempotence pour développer un algorithme de point fixe.

$$\rho_{k+1} = 3\rho_k^2 - 2\rho_k^3, \quad k \geq 0 \quad (9.40)$$

avec un choix adapté pour l'initial-guess

$$\rho_0 = \rho_0(H, \mu) \quad (9.41)$$

La contrainte de conservation du nombre de particules créer des instabilités numériques notables. En effet l'algorithme calcule la quantité

$$\frac{\text{Tr}(\rho - \rho^2)}{\text{Tr}(\rho^2 - \rho^3)} \quad (9.42)$$

et on voit bien qu'au voisinage du point fixe, le quotient n'a plus de sens arithmétique, puisqu'un de point de vue informatique, le quotient de nombres très petits peut engendrer un résultat complètement faux. Cette méthode n'est donc utilisable que pour fournir un initial-guess à une méthode variationnelle par exemple. On visualise sur la figure (9.5) les résultats de la méthode. Dès l'apparition d'instabilités, le programme s'arrête.

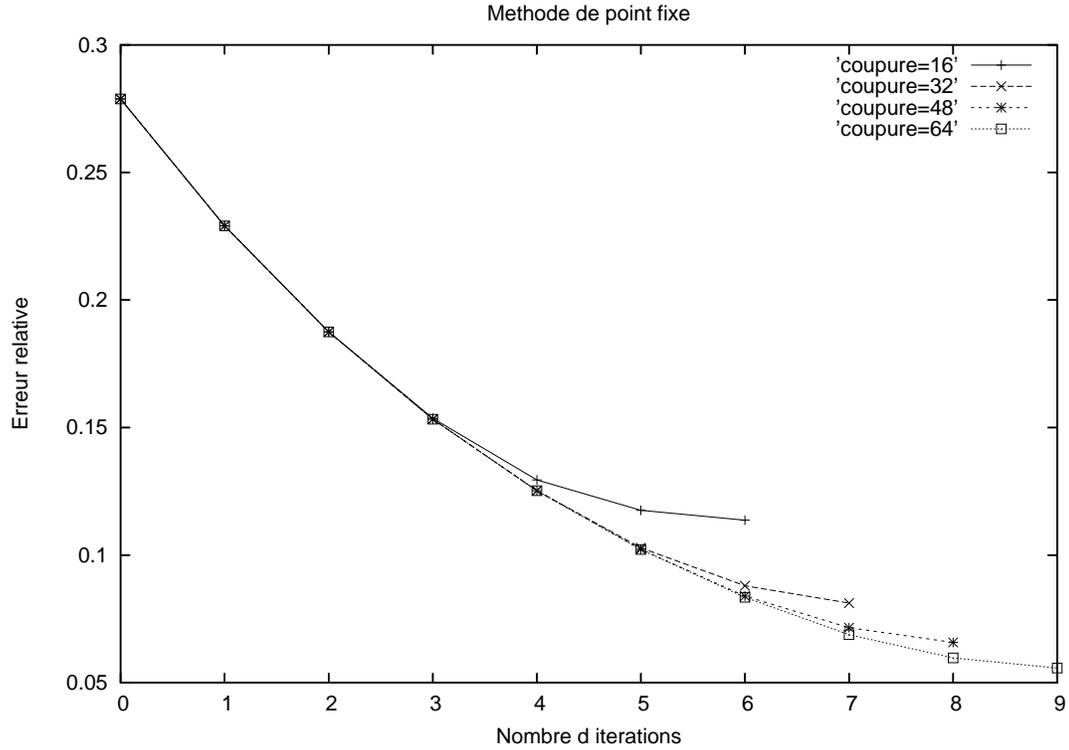


FIG. 9.5 – Erreurs relatives des itérations de la méthode de point fixe appliquée à un modèle tight-binding avec 512 atomes pour différentes coupures allant de 16 à 64.

9.3.9 Propriétés de convergence des algorithmes $\mathcal{O}(N)$

On peut montrer que les propriétés de convergence et de robustesse numérique des deux premières classes d'algorithmes sont liés singulièrement à l'inverse du gap :

- Pour FOE par exemple, le degré du polynôme de Chebychev est

$$p \simeq \frac{E_{max} - E_{min}}{\Delta E_{gap}} \quad (9.43)$$

De plus, il a été montré [120, 121] que l'ordre du développement sur les polynômes de Chebychev doit être

$$p \simeq \frac{2}{3}(D-1)\beta_s = \frac{2}{3}(D-1)\beta\Delta E \quad (9.44)$$

pour une précision de 10^{-D} sur les coefficients du développement $\{a_i\}$. Si le

système possède un gap de type HOMO-LUMO ΔE_{gap} et

$$\beta \geq \frac{2 \log_{10} D}{\Delta E_{gap}} \quad (9.45)$$

alors

$$p \geq \frac{4(d-1)\Delta E \log_{10} D}{3\Delta E_{gap}} \quad (9.46)$$

Puisque le rang de la matrice densité est borné

$$rang(\rho) \leq p \cdot c \simeq \frac{2}{3}c(D-1)\beta\Delta E \quad (9.47)$$

les corrélations croissent comme l'inverse de la température pour un système sans gap, et il n'est donc pas possible de développer un algorithme à complexité linéaire.

- Pour DMM et OM, le nombre d'itérations qui est lié au conditionnement de la matrice densité $\kappa(\rho)$ est de l'ordre

$$n_{iter} \sim \kappa(\rho) = \sqrt{\frac{E_{max} - E_{min}}{\Delta E_{gap}}} \quad (9.48)$$

On voit bien que pour un système à faible gap, ces méthodes seront inefficaces, et c'est pourquoi on se propose dans le chapitre suivant de développer une méthode utilisant le Groupe de Renormalisation d'Énergie afin d'arriver à élaborer un algorithme dont la complexité algorithmique est presque linéaire pour les systèmes à faible gap.

Chapitre 10

Contributions du GR à la simulation *ab initio*

Comme on l'a vu dans le chapitre (9), le point clef dans l'élaboration de méthodes numériques rapides est l'existence d'un gap dans le spectre d'excitation au-dessus de l'état fondamental, rendant ainsi à courte portée les corrélations dans la matrice densité réduite à une particule. Les systèmes sans gap exhibent par contre des singularités infrarouges, c'est à dire des corrélations qui ralentissent la convergence des algorithmes. Il semble donc naturel d'essayer différentes stratégies afin de traiter les fluctuations quantiques à courte et à longue portée. On pourrait, en particulier, traiter les fluctuations à courte portée à l'aide de méthodes rapides et utiliser des méthodes moins sophistiquées, plus lentes, pour les fluctuations à longue portée. On développe dans ce chapitre un algorithme de ce type [131].

10.1 Traitements *ab initio* rapide des systèmes à faible gap d'énergie

La stratégie du groupe de renormalisation [1] est un candidat naturel pour la construction d'un tel algorithme. La mise en oeuvre habituelle de cette méthode consiste en l'application d'une procédure à trois étapes. La première consiste en l'élimination de certains degrés de liberté du système. C'est la phase dite de "blocking". On la réalise dans l'espace de Fourier par l'abaissement de la coupure ultraviolette, c'est à dire l'énergie la plus élevée auquel le système peut accéder. Son pendant est une décimation des degrés de liberté dans l'espace réel. La deuxième étape est la construction d'une théorie effective pour les modes restants. Enfin, dans la troisième étape qui donne son nom à la méthode, on "rescale" l'énergie et les autres observables pertinentes ou d'autres échelles de la théorie effective afin de récupérer le cut-off ultraviolet initial. Cette dernière procédure n'est pas toujours nécessaire. Ainsi, le groupe de renormalisation est une méthode systématique d'élimination d'un certain nombre de degrés de liberté ou de modes de fluctuations de telle manière que leur impact sur la dynamique est accumulé dans la théorie effective construite pour les degrés de liberté restants. L'algorithme proposé se décrit en deux étapes.

D'abord, une méthode numérique rapide est appliquée afin d'éliminer les fluctuations à courte portée. Ce qui subsiste, ce sont des fluctuations à longue portée décrites par l'hamiltonien effectif. On les traite dans la deuxième étape qui consiste à diagonaliser l'hamiltonien effectif.

Il y a déjà eu plusieurs tentatives d'implémenter cette idée, telles que le Groupe de Renormalisation d'énergie (ERG), [83, 84], qui effectue le blocking et le scaling tel que décrit plus haut. Mais si l'on veut rendre ce schéma plus systématique, on ne peut se contenter d'une élimination naïve des modes non désirés, c'est à dire qu'il ne suffit pas de construire le nouvel hamiltonien, c'est à dire l'hamiltonien effectif, par simple restriction à un sous-espace. On se doit donc dans un second temps de retenir les effets des directions exclues et ce, au sein du nouvel espace de Hilbert. Pour ce faire, on va utiliser une méthode de projection développée en physique nucléaire [85, 86, 87].

10.2 Groupe de Renormalisation d'Énergie

On présente maintenant une méthode de groupe de renormalisation dans l'espace d'énergie permettant de traiter les systèmes à faible gap. Dans sa version originale [83, 84], cette méthode utilise un développement en série télescopique de matrices densités ρ_n à température inverse de plus en plus grande. Les matrices densités sont ensuite construites dans des espaces de Hilbert décroissant au sens de l'inclusion $\mathcal{H}_n \supset \mathcal{H}_{n+1}$ où \mathcal{H}_{n+1} est engendré par les vecteurs propres de l'opérateur $\rho_{n+1} - \rho_n$. Cet algorithme est modifié afin d'implémenter le "blockling" dans l'espace d'énergie, ce qui correspond à une décimation dans l'espace réel, donc dans notre cas à un zoom autour du niveau de Fermi dans l'espace de Fourier. Tout d'abord, un potentiel chimique est introduit pour chaque température et est ajusté de telle manière à ce qu'on retrouve le nombre de particules désirés. En effet, la fonction de partition du système doit rester constante et il est donc important de maintenir le nombre de particules fixé à chacune des itérations du groupe de renormalisation. La méthode originale ne fait que tronquer les hamiltoniens en les restreignant à ces sous-espaces. Pour pouvoir prendre en compte la dynamique exclue par la procédure d'élimination, on propose une amélioration de la méthode originale en adaptant une méthode développée en physique nucléaire [85].

L'idée de base du groupe de renormalisation [1] exprimée dans le formalisme des intégrales de chemin est la décroissance graduelle du nombre de degrés de liberté. Ceci est réalisé habituellement en abaissant l'échelle d'énergie de la coupure ultraviolette. Cette coupure est implémentée de manière dure ou molle selon que la dépendance de l'énergie des modes éliminés est respectivement continue ou discontinue.

Dans l'espace de Hilbert, l'espace d'énergie, l'application d'un opérateur de renormalisation a pour effet de diminuer la dimension de l'espace de Hilbert effectif. La coupure dure permet d'obtenir une expression simple pour l'hamiltonien effectif dans l'espace restreint ou effectif. Mais le prix à payer pour une expression analytique simple est l'apparition de non-localités fortes. En fait, plus la coupure dépend de l'énergie ou de manière équivalente de l'impulsion, plus la dynamique est influencée aux grandes

distances par la coupure et ce, de manière cohérente avec le principe d'incertitude d'Heisenberg.

10.2.1 Coupure molle

L'abaissement de la température dans la version originale de ERG correspond à une procédure bien définie du point de vue de la physique, où on élimine à l'aide d'une coupure molle les états dont l'énergie est élevée. On concrétise cette démarche en définissant une suite croissante pour l'inverse de la température β_n qui endosse ainsi le rôle de constante de couplage. On définit les matrices densité correspondantes $\rho_{n,\mu} = f_{\beta_n,\mu}(H)$. La valeur moyenne d'une observable A à température nulle s'écrit comme

$$\langle A \rangle = \text{Tr}(\rho_{\infty,\mu} A) = \sum_n \text{Tr}(\Delta_{n,\mu} A), \quad (10.1)$$

où $\Delta_{n,\mu} = \rho_{n,\mu} - \rho_{n-1,\mu}$ lorsque $n > 1$ et $\Delta_{0,\mu} = \rho_{0,\mu}$ sont représentées sur la figure (10.1).

Chaque terme dans cette équation correspond à une valeur moyenne où la contribution dominante provient des énergies proches de l'énergie du niveau de Fermi au fur et à mesure que n augmente. La localisation dans l'espace de Fourier correspond comme il a déjà été mentionné à une délocalisation dans l'espace réel tant que le système n'est pas un système désordonné. L'état fondamental est approché par une série télescopique en zoomant autour du niveau de Fermi.

L'ordre du développement sur des polynômes de Chebychev est indépendant de n et les coefficients obtenus par Transformée de Fourier Rapide (FFT) sont

$$a'_m(\beta_n, \mu) = \langle \Delta_{n,\mu}, T_m \rangle \quad (10.2)$$

où

$$\Delta_{n,\mu} = f_{\beta_n,\mu}(H_n) - f_{\beta_{n-1},\mu}(H_n). \quad (10.3)$$

10.2.2 Point fixe

On montre ici que si la suite des constantes de couplage, en l'occurrence $(\beta_n)_n$ est géométrique pour l'inverse de la température $\beta_n = q^n \beta_0$ avec $q > 1$, alors le groupe de renormalisation ainsi construit admet un point fixe.

La convergence de la série télescopique peut être prouvée par l'existence d'un point fixe lors de la procédure de "blocking" dans l'espace d'énergie pour des opérateurs dépendant de l'énergie, c'est à dire commutant avec l'hamiltonien. Supposons que A est un opérateur continu commutant avec l'hamiltonien H . On peut donc diagonaliser A dans une base de vecteurs propres communs à H , permettant ainsi d'avoir une représentation spectrale de A dans l'espace d'énergie. On peut exprimer sa valeur moyenne à partir des matrices $\Delta_{n,\mu}$

$$\begin{aligned}
\text{Tr}(\Delta_{n+1,\mu}A) &= \int d\epsilon A(\epsilon)\Delta_{n+1,\mu}(\epsilon) \\
&= \frac{\beta_n}{\beta_{n+1}} \int d\epsilon A\left(\epsilon\frac{\beta_n}{\beta_{n+1}}\right)\Delta_{n,\mu}(\epsilon) \\
&= \frac{1}{q}\text{Tr}\left(\Delta_{n,\mu}A\left(\frac{\cdot}{q}\right)\right). \tag{10.4}
\end{aligned}$$

Cette expression nous permet de zoomer l'opérateur A autour du niveau de Fermi par le facteur $\frac{\beta_{n+1}}{\beta_n} = q > 1$ et de garder $\Delta_{n,\mu}$ inchangé. Puisque A est un opérateur continu, l'application de cette démarche conduit à un point fixe lorsque $n \rightarrow \infty$

$$\text{Tr}(\Delta_{n+1,\mu}A) - \text{Tr}(\Delta_{n,\mu}A) \rightarrow 0 \tag{10.5}$$

10.2.3 Coupure dure

Afin d'obtenir une relation récursive simple pour exprimer les hamiltoniens effectifs, on se doit de remplacer la procédure de coupure molle, présentée précédemment quelque peu simpliste, par une procédure de coupure dure qui peut être réalisée à l'aide de projecteurs sur des espaces de Hilbert décroissants au sens de l'inclusion $P_n : \mathcal{H}_n \rightarrow \mathcal{H}_{n+1}$. On introduit d'abord une suite de pseudo-projecteurs, des filtres en quelque sorte, à l'aide d'un développement sur les polynômes de Chebychev

$$G_n = \frac{\partial \rho_{n,\mu}}{\partial \mu} = \beta_n \rho_{n,\mu} (1 - \rho_{n,\mu}). \tag{10.6}$$

G_n n'est rien d'autre que l'opérateur densité d'état au niveau de Fermi. On a représenté graphiquement dans l'espace d'énergie ces opérateurs? Dès que G_n est calculé, une autre matrice $\{C_n\}$ est déterminé. Les colonnes de C_n sont les vecteurs de base de \mathcal{H}_{n+1} sont calculées à l'aide d'une version heuristique de la décomposition en valeur singulière avec permutation de colonnes [83, 84, 123]. On construit à l'étape suivante les matrices de recouvrement $S_n = C_n^* C_n$. Finalement, les projecteurs sont donnés par $P_i = C_i S_i^{-1} C_i^*$. La matrice S_i^{-1} peut être obtenue par $S_i^{-1/2} = \lim_{k \rightarrow \infty} A_k$ à l'aide de [124]

$$\begin{aligned}
A_k &= \frac{1}{2}(3A_k - A_k B_k A_k) \\
B_k &= \frac{1}{2}(3B_k - B_k A_k B_k) \tag{10.7}
\end{aligned}$$

avec $A_0 = -\sqrt{\alpha} \cdot \mathbb{I}$, $B_0 = -\sqrt{\alpha} \cdot S_i$ et $\alpha = 1/\max_{j,k} |(S_i)_{jk}|$. L'hamiltonien projeté est donné par [83, 84]

$$H_{n+1}^{ERG} = S_n^{-\frac{1}{2}} C_n^* H_n C_n S_n^{-\frac{1}{2}}. \tag{10.8}$$

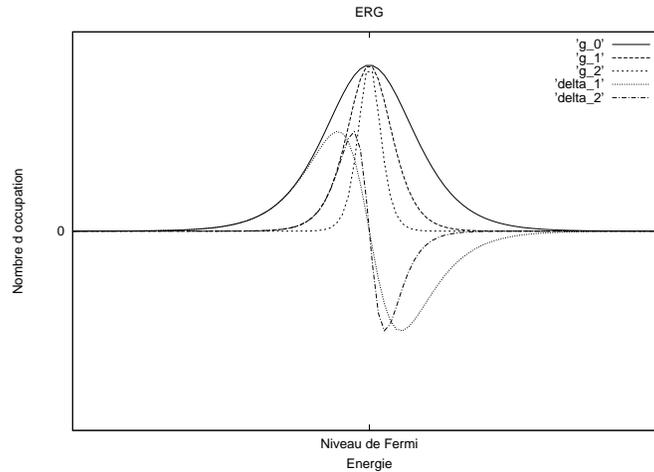


FIG. 10.1 – Représentation spectrale des G_i pour $i = 0, 1, 2$ et des Δ_i pour $i = 1, 2$. Les supports des fonctions Δ_{i+n} avec $n \geq 1$ sont inclus dans ceux des fonctions G_i et se concentrent autour du niveau de Fermi.

10.2.4 Blocking dans l'espace d'énergie

Jusqu'à présent, nous avons éliminé certaines directions dans l'espace de Hilbert, car elles avaient moins d'importance pour la dynamique de l'état fondamental. Mais cela n'est pas suffisant, on doit de plus s'assurer que l'influence des états éliminés sur les états restants est pris en compte d'une manière analogue au blocking de Kadanoff-Wilson [85, 86]. Un problème similaire a été étudié en physique nucléaire lors de la diffusion élastique de noyaux. Le cadre usuel pour la description de tel phénomène est le sous-espace correspondant au canal élastique. Mais il peut arriver que le noyau se retrouve dans des états intermédiaires en dehors de l'espace considéré, ou bien qu'il reste dans le même état juste après la collision. Ce dernier cas peut être pris en compte grâce à un potentiel optique qui paramétrise la perte de l'état dans le sous-espace et de la non-unitarité de l'évolution en temps de la dynamique effective. Nous n'avons pas ce problème avec des états stationnaires, mais il se peut que le système quitte le sous-espace et y revienne juste après un certain temps. Ce qui nous oblige à prendre en compte l'influence des états éliminés sur la dynamique des états dans le sous-espace de projection. Pour cela, on écrit l'équation aux valeurs propres $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ comme

$$\begin{pmatrix} H_{PP} & H_{PQ} \\ H_{QP} & H_{QQ} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_P\rangle \\ |\Psi_Q\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |\Psi_P\rangle \\ |\Psi_Q\rangle \end{pmatrix} \quad (10.9)$$

avec $|\Psi_A\rangle = A|\Psi\rangle$, $H_{AB} = AHB$ où A et B représentent les projecteurs P ou

$Q = \mathbb{I} - P$. On élimine $|\Psi_Q\rangle$ à l'aide de la relation

$$|\Psi_Q\rangle = (E - H_{QQ})^{-1} H_{QP} |\Psi_P\rangle. \quad (10.10)$$

Le résultat est un problème aux valeurs propres effectif dans l'espace de projection $H_{eff} |\Psi_P\rangle = E |\Psi_P\rangle$ avec

$$H_{eff} = H_{PP} + H_{PQ} (E - H_{QQ})^{-1} H_{QP}. \quad (10.11)$$

Remarque 10.2.1 *Remarquons que la dépendance de cette équation par rapport à la valeur propre E est non-linéaire et cela en raison du couplage entre les états $|\Psi_P\rangle$ et $|\Psi_Q\rangle$. Le terme de correction devant H_{PP} dans (10.11) est important si le bloc de la matrice dans (10.9) est constitué de beaucoup d'éléments de matrice, ce qui est le cas lorsque la dynamique des directions à éliminer est fortement couplée à ceux de H_{PP} .*

L'équation aux valeurs propres non-linéaires est implémentée comme un blocking au voisinage du niveau de Fermi, ce qui autorise le remplacement de $E \rightarrow \mu$ dans le dénominateur du membre de droite de (10.11). L'équation récursive finale pour l'hamiltonien effectif est donc

$$H_{n+1} = H_{n+1}^{ERG} + S_n^{-\frac{1}{2}} C_n^* H_n Q_n (\mu - H_n)^{-1} Q_n H_n C_n S_n^{-\frac{1}{2}}. \quad (10.12)$$

Afin d'obtenir un algorithme presque-linéaire, l'inverse du côté droit de l'équation (10.12) peut être calculé à l'aide de l'algorithme de *Schultz* aussi connu sous le nom de méthode de *Hotelling* [125, 126, 129] comme $(\mu - H_n)^{-1} = \lim_{j \rightarrow \infty} X_j$ où

$$X_j = X_{j-1} [2\mathbb{I} - (\mu - H_n) X_{j-1}] \quad (10.13)$$

avec l'initial-guess [129] $X_0 = \frac{(\mu - H_n)^*}{\sum_{j,k} (\mu - H_n)_{jk}^2}$.

La matrice X_j de (10.13) converge quadratiquement en à peu près une trentaine d'itérations, une valeur indépendante de la taille du système et suffisante en précision dans nos tests numériques. Les calculs s'arrêtent lorsque la dimension du sous-espace est suffisamment petite pour que l'on effectue une diagonalisation explicite de l'hamiltonien effectif.

10.2.5 Tests numériques

On applique les résultats théoriques obtenus en développant l'algorithme présenté ci-dessus à l'aide de scripts MATLAB [132], et en l'appliquant au calcul de l'énergie du modèle de liaisons fortes présenté précédemment en 9.3.3. Ce modèle représente une difficulté notable pour ERG. En fait, c'est le modèle le plus simple pour les électrons de la bande de conduction et le gap est d'ordre $\mathcal{O}(N^{-1})$. D'autres modèles contenant des interactions non-triviales ont habituellement des gaps au moins aussi grand que celui-ci. La seconde difficulté pour la version améliorée de ERG dans son application à ce modèle est que le "mélangeur" H_{PQ} entre les directions éliminées et les directions retenues est d'autant plus fort que les éléments de matrice de H_{PP} sont grands. En

N	E_{Exact}	$Error_{ERG}$	$Error_B$	$Error_{ERG} - Error_B$
256	186.78	4.40	3.88	0.52
384	279.80	4.36	1.16	3.20
512	372.82	4.36	0.20	4.14
640	465.86	4.34	1.02	3.32
768	558.88	4.34	1.58	2.76
896	651.90	4.34	1.96	2.38
1024	744.94	4.32	2.26	2.08
1152	837.96	4.32	2.48	1.84
1280	930.98	4.32	2.66	1.66
1408	1024.00	4.32	2.82	1.50
1536	1117.04	4.32	2.94	1.38
1664	1210.06	4.32	3.04	1.28
1792	1303.08	4.32	3.14	1.18
1920	1396.10	4.32	3.20	1.10
2048	1489.14	4.32	3.28	1.04

TAB. 10.1 – Erreurs sur l'énergie du fondamental avec $\beta_0 = 5$, $q = 10$ et pour un ordre de développement de Chebychev $p = 10$. N est la taille du système, E_{Exact} est la valeur exacte de l'énergie du fondamental, $Error_{ERG} = E_{ERG} - E_{Exact}$, $Error_B = E_B - E_{Exact}$, où E_{ERG} et E_B sont les énergies des états fondamentaux respectivement des équations (10.8) et (10.12). Les résultats ont été arrondis à 10^{-2} .

N	E_{Exact}	$Error_{ERG}$	$Error_B$	$ Error_{ERG} - Error_B $
256	511.580476	0.173630	0.173680	$0.51 \cdot 10^{-4}$
512	1023.580476	0.142011	0.141964	$0.47 \cdot 10^{-4}$
768	1535.580476	0.130979	0.130979	$< 10^{-6}$
1024	2047.580476	0.125242	0.125242	$< 10^{-6}$
1280	2559.580476	0.121839	0.121839	$< 10^{-6}$
1536	3071.580476	0.118306	0.118306	$< 10^{-6}$
1792	3583.580476	0.117901	0.117901	$< 10^{-6}$
2048	4095.580476	0.116669	0.116669	$< 10^{-6}$

TAB. 10.2 – Erreurs sur l'énergie du fondamental d'un système avec un gap $\Delta E_{gap} = 1$ pour $\beta_0 = 5$, $q = 10$ et pour un ordre de développement de Chebychev $p = 10$. N est la taille du système, E_{Exact} est la valeur exacte de l'énergie du fondamental, $Error_{ERG} = E_{ERG} - E_{Exact}$, $Error_B = E_B - E_{Exact}$, où E_{ERG} et E_B sont les énergies des états fondamentaux respectivement des équations (10.8) et (10.12)

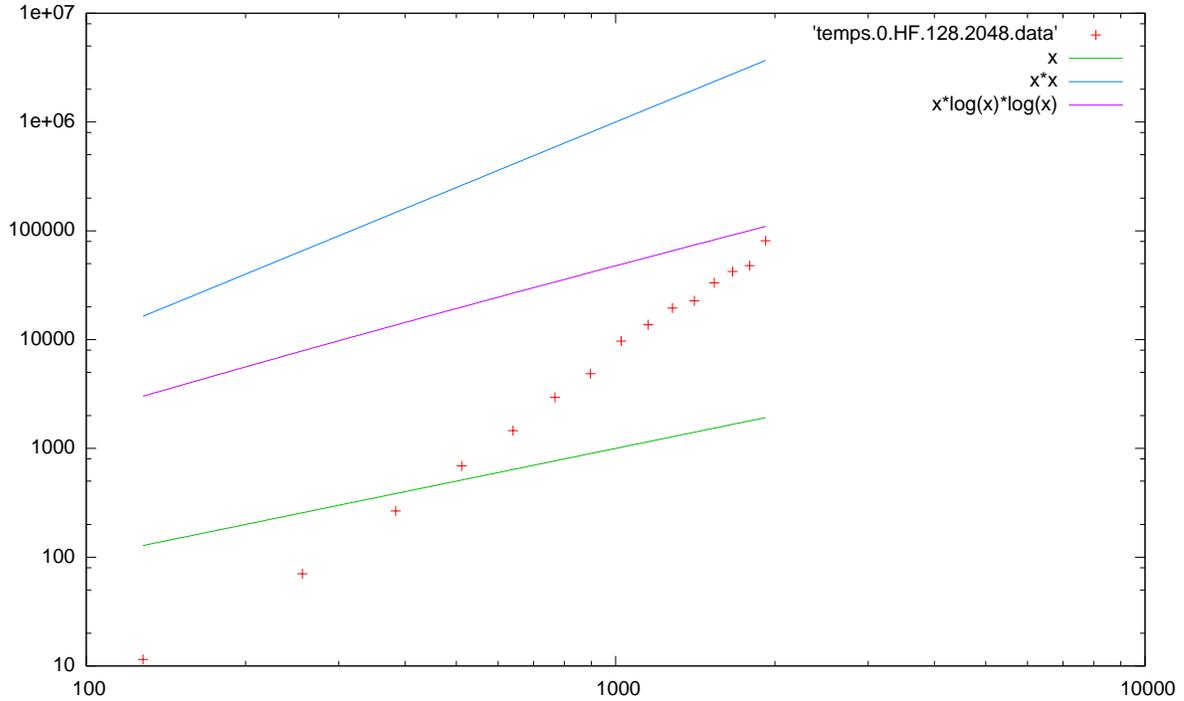


FIG. 10.2 – Comparaison de la complexité algorithmique de la méthode ERG améliorée.

fait, H_{PQ} a des contributions du "hopping", c'est à dire le second terme du membre de droite dans (9.16), car les éléments de matrice de l'hamiltonien sont exprimés dans l'espace des coordonnées.

Le tableau (10.1) exhibe l'énergie de l'état fondamental en fonction de la taille des systèmes obtenue à l'aide de la version originale de ERG et de la version améliorée. On voit clairement que cette dernière rend le calcul plus précis et proche de la valeur exacte. Les approximations communes aux deux méthodes sont la troncature de la série télescopique, l'utilisation de pseudo-projecteurs $P_i \neq P_i^2$ et le remplacement de $E \rightarrow \mu$ dans (10.11). Ce dernier remplacement est d'importance moindre que les deux premiers. Puisque la méthode de *Schultz* ne contient que des multiplications de matrices, le temps CPU de la méthode améliorée aura la même complexité algorithmique que la méthode ERG originel. Cet argument est toutefois quelque peu naïf, car il ignore le fait que la nature creuse des matrices H_n se détériore au fil des itérations. Ce travail confirme cet argument et montre que l'équation (10.12) représente une augmentation de 60% du temps CPU dans l'intervalle des N considérés dans le tableau 10.1. La sparsité décroît suffisamment lentement au fil des itérations pour préserver la complexité algorithmique de la méthode. On remarque sur la figure (10.2) que le temps de calcul est presque linéaire. Pour pouvoir déterminer correctement la complexité algorithmique de la méthode proposée, il serait nécessaire de la paralléliser.

Afin de confirmer l'impact de l'amélioration proposée par l'équation (10.12) sur un système à faible gap, voire sans gap, on a effectué un calcul similaire mais sur

un système simple avec un gap au dessus du niveau de Fermi. On considère deux bandes, chacune décrite par un hamiltonien de type (9.16) mis à part que le spectre de la seconde est shifté par une constante $U = 5$ par rapport à la première. Le niveau de Fermi a été placé au milieu de la bande, créant ainsi un gap $\Delta E_{gap} = 1$. Les résultats, présentés dans le tableau 10.2 montre clairement que le couplage entre les directions éliminées et celles retenues est fort lorsqu'il n'y a pas de gap rendant ainsi l'amélioration proposée dans ce travail d'autant plus importante dans ce genre de cas.

10.3 Conclusion

Une nouvelle application du groupe de renormalisation a été présentée dans ce travail. La méthode a été conçu pour prendre en compte la dynamique des modes exclus du calcul et a été développée à l'origine pour l'intégrale de chemin. Mais elle est un outil idéal pour améliorer systématiquement la troncature effectuée dans l'espace de Hilbert. Comme exemple, on a présenté une amélioration du Groupe de Renormalisation d'Énergie. Le blocking de Kadanoff-Wilson a été effectué dans l'espace d'énergie, et les directions perdues de l'espace de Hilbert ont été prises en compte. Ainsi, la dimension de l'espace est réduite mais la physique décrite par les états reste la même. Tant que l'état fondamental et les premiers états excités sont dans les mêmes sous-espaces d'énergie, les caractéristiques marquantes du modèle peuvent être décrites d'une manière systématique et plus économique. L'élimination des dimensions rend le problème aux valeurs propres non-linéaires par rapport aux valeurs propres. Cet effet est bien connu en théorie des problèmes à N-corps. En fait la self-énergie d'une particule reçoit une contribution non-triviale dépendant de l'énergie de processus virtuels où le nombre de particules peut changer, ces dernières pouvant aller et venir d'un secteur à une particule de l'espace de Fock. On a testé notre méthode dans le cas d'un modèle tight-binding à une dimension. L'énergie de l'état fondamental a été améliorée de près de 25% par rapport à l'algorithme original [83, 84] pour $N = 2048$. Le couplage entre les modes éliminés et retenus, ainsi que l'amélioration proposée peuvent être considérés comme important lors de l'absence de gap dans le spectre d'excitation.

Cinquième partie

Groupe de Renormalisation et Théorie de la Fonctionnelle de Densité pour la turbulence développée

Chapitre 11

Théories sur la turbulence développée

11.1 Introduction

La turbulence développée est définie comme l'étude des mouvements fluides dans la limite des grands nombres de Reynolds. Ces derniers se définissent comme le rapport entre le transport moyen du fluide, proportionnel à la vitesse, et le frottement moyen dû à la viscosité du fluide, c'est à dire la part de l'énergie cinétique qui est dissipée en chaleur sous l'effet du frottement des couches fluides entre elles ou au contact des obstacles solides. Les ordres de grandeur du nombre de Reynolds sont de 10^3 à 10^9 pour les écoulements aérodynamiques, de 10^9 à 10^{12} pour les écoulements atmosphériques, et de 10^{12} à 10^{20} pour les écoulements astrophysiques.

Les méthodes utilisées pour le traitement ainsi que les valeurs du nombre de Reynolds rendent la turbulence développée très distincte de l'étude de la transition à la turbulence et de la turbulence faible. En effet, cette dernière est caractérisée par une excitation d'un petit nombre de degrés de liberté dont le comportement chaotique est temporel. La dimension de l'attracteur caractérisant leur dynamique non-linéaire est en général inférieur à 10 et permet un traitement par la théorie des systèmes dynamiques. Par contre dans le cas de la turbulence développée, un très grand nombre de degrés de liberté interagissent et créent un comportement chaotique temporel mais aussi spatial. La dimension de l'attracteur associé, bien que borné par les effets de dissipation, devient infinie quand le nombre de Reynolds l'est aussi.

Il n'existe à ce jour aucune théorie complète de la turbulence développée. L'étude de cette dernière reste un problème mal posé au sens mathématique et mal formalisé au sens physique du terme. Les outils de la mécanique hamiltonienne ne traitent souvent que des phénomènes conservatifs donc réversibles, et où les états sont stables, ou au voisinage de l'équilibre. La turbulence quant à elle est instable et hautement dissipative, donc irréversible.

De plus, la dynamique classique ne traite que les systèmes à petit nombre de composants. Elle n'est donc pas du tout apte à traiter la turbulence développée qui fait intervenir un grand nombre de degrés de liberté.

En mathématiques, les choses se présentent différemment. En analyse fonctionnelle, la Théorie des Equations aux Dérivées Partielles (EDP) est largement maîtrisée, l'existence, l'unicité et la régularité des solutions au sens des distributions étant prouvées pour de nombreux problèmes linéaires. L'analyse numérique consécutive permet de développer des algorithmes adaptés et robustes pour simuler les solutions. Il n'en n'est pas de même pour les EDP non-linéaires telles que l'équation de Navier-Stokes. Cela tient en partie au fait que l'approche usuelle est surtout réductionniste et locale. Dans le cas des phénomènes critiques, cette approche n'est plus possible car les échelles sont couplées et il faut en tenir compte au travers d'une démarche plus globale.

Une caractéristique majeure de la turbulence développée est la non-prédictibilité de l'écoulement. Si le régime est laminaire, l'erreur commise sur les conditions initiales restera constante ou augmentera lentement car la dynamique de l'écoulement est stable. Par contre, dans le cas de la turbulence développée, l'évolution du système est très sensible aux conditions initiales, ce qui se caractérise par une amplification exponentielle de l'erreur sur les conditions initiales.

11.2 Un peu d'histoire

Les grands noms de l'histoire de la turbulence ont souvent été des ingénieurs [138] car ceux-ci ont été directement confrontés à des problèmes concrets : comment peut-on endiguer un fleuve, construire des ponts ou une étrave qui ne crée pas trop de remous ?

La turbulence a aussi permis à des philosophes et des métaphysiciens de fonder des courants de pensées tels que le Taoïsme en Orient, pour lequel le chaos est l'essence de la nature, ou celle de Lucrèce dont la théorie au premier siècle de notre ère se base sur la rencontre désordonnée des atomes. L'étude de la turbulence devint à la Renaissance plutôt un problème d'artiste comme pour Brunelleschi [138]. Mais les croquis de Léonard de Vinci nous révèlent maintenant l'intérêt qu'il portait à l'art et à l'ingénierie mécanique des fluides. Descartes au XVII^{ème} siècle, décrit sa cosmologie d'un univers plein (*plenum*) dans son célèbre ouvrage *Le Monde ou un Traité sur la Lumière*. L'univers y est décrit par frottements perpétuels entre particules, et l'ensemble de leur mouvement et collision donneraient naissance à des tourbillons qui entraîneraient les planètes dans leur course et créeraient dans leurs rotations très rapides la lumière des étoiles. Au XVIII^{ème} siècle, l'étude des écoulements devint un problème de mécanicien. Les physiciens-mathématiciens tels que Jean et Daniel Bernoulli, Euler, d'Alembert, Lagrange et Laplace, s'appliquèrent à généraliser les idées newtoniennes au cas des fluides mais sans tenir compte de leur viscosité. Le domaine de la mécanique des fluides visqueux ne fut introduit qu'au XIX^{ème} siècle par Navier et Saint-Venant en France, von Helmholtz en Allemagne, Sir Stokes et Maxwell en Angleterre. A cette génération de théoriciens devait succéder la première génération d'expérimentateurs parmi lesquels Poiseuille, Reynolds, puis au début du XX^{ème} siècle Bénard, Prandtl, Taylor, von Karman et Lord Rayleigh. Ces derniers étudièrent intensivement la transition laminaire-turbulent ainsi que de nombreuses instabilités hydrodynamiques. Le terme de turbulence a été introduit pour la première fois par

Taylor et von Karman et proposèrent dans la foulée les premières théories de la turbulence homogène et isotrope [138]. L'apport des mathématiciens a été considérable au travers de la Théorie des Equations aux Dérivées Partielles, de la Théorie des Systèmes Dynamiques et de la Théorie des Processus Stochastiques. L'école russe a joué un rôle illustre grâce à des chercheurs de renom tels Lyapounov, Pontryaguin, Landau, Kolmogorov, et Arnold. L'école française n'est pas en reste puisqu'on peut citer Poincaré, Hadamard, Leray, Lévy et Ruelle.

11.3 Analyse mathématique de l'équation de Navier-Stokes

11.3.1 Description de l'équation de Navier-Stokes

L'évolution d'un fluide de masse volumique constante au cours du temps (fluide incompressible), et où les déformations sont proportionnelles aux gradients de vitesse (fluide newtonien), est gouvernée par l'équation de Navier-Stokes. Elle décrit la conservation de la quantité de mouvement d'une particule fluide :

$$\partial_t \vec{v}(\vec{x}, t) + (\vec{v}(\vec{x}, t) \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla} p(\vec{x}, t) + \nu \Delta \vec{v}(\vec{x}, t) \quad (11.1)$$

On a pris une densité égale à l'unité car le fluide est incompressible. La condition d'incompressibilité est tirée de l'équation de conservation du mouvement :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{v}(\vec{x}, t) = 0 \quad (11.2)$$

Les deux premiers termes du membre de gauche de (11.1) décrivent le transport des particules fluides par l'écoulement. Le second terme du membre de droite modélise la diffusion, c'est la transformation de l'énergie cinétique en énergie thermique par frottement visqueux. Ainsi le nombre de Reynolds caractérisant le taux de turbulence est-il obtenu en faisant le rapport entre le terme non-linéaire $(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}$ et le terme de diffusion de la quantité de mouvement $\nu \Delta \vec{v}$. Il mesure ainsi le taux de non-linéarité de l'écoulement.

L'équation (11.2) exprime l'incompressibilité du fluide. Dans le cas de fluides compressibles, il faut remplacer cette équation par une équation de conservation de la masse et une autre par une équation d'état décrivant la variation de la masse volumique au cours du temps.

11.3.2 Difficulté mathématique de l'équation de Navier-Stokes

La difficulté majeure de l'équation de Navier-Stokes provient de ce que le nombre de Reynolds augmente ou de manière équivalente que la viscosité ν tend vers 0 lorsque, lors d'écoulements très turbulents. De plus, il se trouve devant le terme d'ordre de dérivation le plus élevé. A la limite inviscide, l'équation change de nature, elle devient alors l'équation d'Euler, et c'est le terme d'advection non-linéaire qui domine. Ce

dernier n'est plus contrôlé par la diffusion. Ainsi l'équation de Navier-Stokes dissipe l'énergie et est donc irréversible en temps alors que l'équation d'Euler la conserve et est réversible.

Le premier à avoir lancé l'analyse fonctionnelle des équations de Navier-Stokes fut le français Leray dans sa thèse en 1933 [140]. Il émit l'hypothèse que la turbulence est dû à l'apparition de singularités des solutions, le vecteur rotationnel devenant infini en module en certains points de l'espace-temps. Cette hypothèse n'a toujours pas été infirmée ou confirmée. Leray a aussi étudié le comportement asymptotique des solutions, et particulièrement, la stabilité et l'unicité de la solution laminaire pour laquelle le terme de diffusion l'emporte sur le terme de transport. Au dessus du nombre de Reynolds critique, plusieurs solutions turbulentes sont possibles et leur comportement n'est accessible que d'un point de vue statistique.

On interprète ceci en élaborant deux types de théories de la turbulence :

- les théories étudiant la stabilité de la solution linéaire faiblement perturbée ainsi que la transition entre le régime laminaire et le régime turbulent pour de faibles nombres de Reynolds.
- les théories appliquant un traitement statistique des solutions turbulentes pleinement développées, autrement dit, pour de grands nombres de Reynolds. Cette approche est la plus riche des deux.

11.3.3 Les théories étudiant la stabilité

En 1924, Heisenberg étudia dans sa thèse de doctorat la stabilité d'un écoulement de Poiseuille plan et calcula la valeur du nombre de Reynolds critique. Ce type de démarche a été très largement développé entre les années 1887 et 1940 avec entre autres les travaux de Lord Kelvin, Lord Rayleigh, Taylor et Hopf. Toutefois, elle se montrait toujours en désaccord avec les faits expérimentaux. Dans la majorité des situations, sauf couches limites, solitons, chocs, les états quasi-stationnaires ne sont pas définis dans le cas de la turbulence développée, rendant ainsi le traitement linéaire inapproprié.

11.3.4 Les théories statistiques

Reynolds fut le premier à tenter de telles approches, en supposant que les écoulements turbulents pouvaient être décrit uniquement par leur comportement moyen. Pour ce faire, il suffisait de décomposer les moyennes d'ensemble des champs turbulents en une partie moyenne et une partie fluctuante. L'équation obtenue pour la partie moyenne du champ de vitesse est l'équation dite de Reynolds. Cependant, il se pose un problème de fermeture de cette équation, car les moments des incréments de vitesse à un ordre donné dépendent des moments à l'ordre supérieur. On retrouve d'ailleurs ce problème dans bien d'autres théories physiques (théories cinétiques des gaz, théorie quantique et statistique des champs). On obtient ainsi une hiérarchie d'équations dont le nombre est toujours inférieur au nombre d'inconnues.

Pour résoudre les équations de Reynolds, Prandtl proposa en 1925 une fermeture

simple en remplaçant les moments du second ordre par un terme de viscosité turbulente construit à partir d'une longueur de mélange caractéristique de l'échelle des fluctuations des vitesses tout comme en mécanique statistique. Par analogie avec le fait que la diffusion moléculaire régularise les gradients de vitesse aux échelles de l'ordre du libre parcours moyen et reprenant les idées de Boussinesq, Prandtl proposa l'existence d'une diffusion turbulente qui régulariserait les gradients de vitesse moyenne aux échelles de la longueur de mélange. On pourrait ainsi définir un coefficient de transport associé à la diffusion turbulente, en l'occurrence la viscosité turbulente. Le nombre de Reynolds n'étant alors rien d'autre que le rapport de la viscosité turbulente par la viscosité moléculaire.

Durant les années 1920, Taylor proposa de caractériser les écoulements turbulents par les fonctions de corrélation et non plus par les valeurs des champs. Cette approche permet de tenir compte des différentes échelles spatio-temporelles. Les travaux de Taylor ont directement aidés Wiener à élaborer sa théorie des processus aléatoires à la fin des années 1930. Mais Taylor ne savait pas comment associer ces fonctions de corrélation à des grandeurs mesurables. Ce n'est que dans les années 1940, que Taylor parvint à résoudre ce problème en reliant le spectre d'énergie à la fonction de corrélation à deux points, la première étant liée à la transformée de Fourier de la seconde. Ce qui permit d'établir un lien entre les théories statistiques et les expériences, notamment les siennes ou celles de von Karman. La théorie statistique était déjà reprise en 1935 par Gebelein qui appliqua la théorie des probabilités de Kolmogorov, à l'hydrodynamique, puis dans les années 1940 par Kolmogorov lui-même et Obukhov en URSS, Onsager aux Etats-Unis, von Weizsäcker et Heisenberg en Allemagne.

Kolmogorov s'intéressa en 1941 à la répartition de l'énergie entre les différents degrés de liberté pour l'équation de Navier-Stokes en dimension trois dans le cas d'un écoulement turbulent développé. Contrairement à la mécanique statistique où ce type d'approche est parfaitement maîtrisé, la difficulté en théorie de la turbulence provient du fait qu'un écoulement est un système thermodynamique ouvert, ceci pouvant être soit à grande échelle (forces extérieures), soit à petite échelle (forces de frottements visqueuses). En supposant que le transfert d'énergie se fait de façon conservative entre les différents degrés de liberté du système qu'il identifie aux échelles de l'écoulement, Kolmogorov montra que les prédictions de la théorie statistique de la turbulence se limitent à une gamme d'échelle intermédiaire entre les grandes et les petites qu'on appelle zone inertielle. Kolmogorov suppose de plus, que dans cette gamme, le système est thermodynamiquement isolé, car selon lui, la zone inertielle ne prend en compte ni la très grande échelle où l'énergie est injectée afin d'entretenir la turbulence, ni la plus petite échelle où l'énergie est extraite par dissipation visqueuse. De plus, l'existence de cette gamme d'échelle n'est possible qu'en turbulence développée, c'est à dire pour un nombre de Reynolds très grand. Ce dernier pourrait être redéfini comme le rapport de la plus grande échelle de la zone inertielle à la plus petite.

L'approche statistique nécessite que l'hypothèse d'ergodicité du système soit vérifiée, c'est à dire que tous les points de l'espace des phases soient visités. Rappelons qu'on appelle ici espace des phases, l'espace des positions et des vitesses compatibles avec les invariances du système. Le lien entre mécanique statistique et mécanique des fluides n'est que mathématique et est indépendant du fait que les fluides sont décrits

à l'échelle microscopique par la mécanique statistique. Ainsi, la théorie statistique de la turbulence est bien distincte de la mécanique statistique des fluides.

Donc en partant de moyennes d'ensemble et en traitant les composantes des vitesses comme des variables aléatoires, Kolmogorov énonça en 1941 (théorie K41) que dans la zone inertielle, les fonctions de corrélations de vitesse en deux points varient comme $(\eta l)^{2/3}$, η étant le taux de transfert d'énergie et l la distance entre deux points caractérisant l'échelle. Cette théorie repose sur deux hypothèses fondamentales :

- la turbulence doit être homogène et isotrope au sens statistique, auto-similaire et stationnaire.
- les propriétés statistiques ne dépendent que de l'énergie dissipée.
- dans la zone inertielle l'énergie est transférée sans dissipation et à un taux constant η .

La première hypothèse avait déjà été mise en avant par les travaux de Taylor et von Karman, tandis que l'auto-similarité remonte aux idées de Léonard de Vinci et reprise en 1922 par le météorologue anglais Richardson.

Sans connaître la théorie K41, Heisenberg et von Weizsäcker, lors de leur mise en résidence surveillée à Cambridge en 1945, décidèrent de s'attaquer au problème de la turbulence. Ils reprirent alors l'idée de viscosité turbulente émise par Prandtl pour fermer la hiérarchie des équations de Reynolds mais en les écrivant dans l'espace de Fourier. A l'aide de l'analyse dimensionnelle, ils montrèrent que l'énergie turbulente cascade selon un spectre en loi de puissance de la forme $\eta^{2/3} k^{-5/3}$, résultat conforme à K41 puisque le spectre d'énergie est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation de vitesse en deux points.

Cette loi est bien vérifiée expérimentalement, et ce, dans des conditions bien moins restrictives que celles imposées par les hypothèses de Kolmogorov. Cependant, en 1949, les premières expériences de Townsend et Batchelor mirent en évidence le phénomène d'intermittence : le support spatial des régions actives de l'écoulement, où s'effectuent les transferts décroît avec l'échelle. Cette observation avait déjà été formulée par Landau lors d'un séminaire de Kolmogorov à Kazan. Landau avait fait remarquer que les tourbillons ne pouvaient pas remplir l'espace de manière dense à toutes les échelles, mais que leur support doit diminuer avec elles.

C'est cette remarque de Landau qui poussa Kolmogorov lors d'un congrès à Marseille en 1961 à reconsidérer les hypothèses d'auto-similarité et de la constance du taux de transfert d'énergie dans la zone inertielle de la théorie K41 pour les remplacer par une hypothèse de distribution log-normale des fluctuations du taux de dissipation d'énergie η variant avec l'échelle afin de tenir compte du fait que le support spatial des transferts décroît lorsque les échelles décroissent elles aussi.

Reprenant les travaux de Wilson en Théorie des Champs dans les années 1970, Forster, Nelson et Stephen essayèrent en 1976 de systématiser l'application de la théorie du Groupe de Renormalisation (GR) à la turbulence développée. En effet celle-ci est avant tout une transition de phase, et l'existence de lois d'échelle donne un qualificatif de critique à ce phénomène. Il semblait donc tout à fait justifié d'essayer d'utiliser la théorie de Wilson, concrétisée par Ma en 1975, à ce type de problème critique. Très rapidement cette idée a suscité un engouement certain dans le domaine de la turbu-

lence hydrodynamique ou de la magnéto-hydrodynamique. Mais ce n'est qu'autour des années 1986, 1987, que l'utilisation du groupe de renormalisation pour la turbulence hydrodynamique s'est accentuée. Toutefois, et c'est là l'objet de cette partie de la thèse, il apparaît clairement de nombreuses incohérences dans l'application du groupe de renormalisation à l'équation de Navier-Stokes et on se propose très rapidement de les mettre en évidence afin de proposer une démarche plus "orthodoxe" au sens de la Théorie Quantique et Statistique des Champs. Malgré cela, ces applications ont permis de proposer des modèles analytiques de viscosité turbulente qui nourrissent actuellement de nombreux codes de calcul.

11.3.5 Analyse des dernières théories de la turbulence

Plusieurs remarques peuvent être faites sur l'analyse physico-mathématique de la turbulence. L'objectif de la démarche étant d'introduire une autre approche, plus orthodoxe pour la physique théorique.

Tout d'abord il faut noter qu'après plus d'un siècle d'étude de la turbulence par les physiciens et les ingénieurs, aucune théorie prédictive satisfaisante n'a été proposée. On peut reprendre Frisch et Orszag qui énonçaient en 1990 qu'on en sait plus sur la structure de l'atome que sur la turbulence. Un grand nombre de théories dites phénoménologiques ont été élaborées et sont très largement utilisées pour les applications de l'industrie et de l'ingénierie. Malheureusement elles utilisent des paramètres non prédits par la théorie et doivent donc être mesurés par des expériences sur des maquettes réduites. De plus on n'a toujours pas répondu à la question de savoir si la turbulence est véritablement universelle dans la limite des nombres de Reynolds infiniment grand et à échelle infiniment petite. On entend ici par universel, le fait que la turbulence développée ne dépende pas des conditions initiales et des conditions aux limites.

A l'heure actuelle, il est très sensé de penser que nous n'avons pas encore su dégager les bonnes questions, celles qui permettraient de définir ou d'identifier les structures et les interactions élémentaires à partir desquelles on pourra construire une théorie statistique plus satisfaisante. On dispose en effet d'une théorie statistique de la turbulence développée, mais non d'une mécanique statistique de la turbulence. C'est ce qui empêche clairement l'élaboration d'une théorie prédictive bien assise. On comprend d'ores et déjà qu'il faudra à un moment ou un autre faire un détour par la Théorie Statistique et la Théorie Quantique des Champs.

La Théorie Cinétique des Fluides qui est l'archétype de la mécanique statistique des fluides dilués est basée sur deux hypothèses assez bien vérifiées expérimentalement et s'exprimant par le fait que les molécules peuvent être considérées comme des sphères dures et que les interactions entre elles sont élastiques. Ainsi, cette théorie est fondée sur un modèle mécanique élémentaire. S'ajoute une troisième hypothèse qui n'est vérifiée ou démontrée que dans certains cas, le théorème KAM. Il suppose une ergodicité du système qui n'est de loin pas vérifiée ou démontrée et établit que l'état d'équilibre du système correspond aux configurations les plus probables. Dans le cas de la turbulence développée, ces trois hypothèses ne sont pas clairement posées faute de modèle mécanique sous-jacent. Les modèles implicites sous-jacents à

la théorie statistique de la turbulence développée voit l'écoulement comme une superposition d'ondes interagissant entre nombres d'ondes voisins, c'est à dire de façon complètement délocalisées dans l'espace physique. A l'instar du modèle mécanique de la théorie cinétique des fluides, et de manière analogue formellement, l'équivalent des sphères dures serait pour la turbulence les échelles de l'écoulement ou les modes Fourier correspondant et les interactions entre ces modes seraient locales en espace de Fourier et non locales dans l'espace physique. De plus, l'hypothèse d'ergodicité utilisée pour remplacer les moyennes d'ensemble par des moyennes temporelles n'a pas été démontrée jusqu'à présent.

La notion de viscosité turbulente introduite par analogie avec la mécanique statistique ne peut se justifier que si l'on suppose le découplage des mouvements à grandes échelles et à petites échelles pour la dynamique turbulente, ce qui est contraire aux faits expérimentaux où les mouvements turbulents existent à toutes les échelles de la zone inertielle sans qu'il y ait possibilité de les séparer, ce qui empêche par ailleurs toute modélisation mathématique sérieuse de la turbulence. Malgré tout, la notion de viscosité turbulente est très amplement utilisée pour l'étude des applications industrielles de la turbulence mais aussi dans des théories analytiques comme les techniques du groupe de renormalisation.

Chapitre 12

Analyse fonctionnelle de l'équation de Navier-Stokes

Rappelons que les premières équations avoir été présentées en tant que modèle de description de l'écoulement d'un fluide parfait incompressible dans un domaine \mathcal{D} de \mathbb{R}^3 sont les équations d'Euler. Elles ont été écrites en 1755 et figurent parmi les premières équations de la physique mathématique (après l'équation des ondes).

$$\begin{cases} \partial_t \vec{v}(\vec{x}, t) + (\vec{v}(\vec{x}, t) \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla} p(\vec{x}, t) & \text{dans } \mathcal{D} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{v}(\vec{x}, t) = 0 \\ \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial \mathcal{D} \end{cases} \quad (12.1)$$

où \vec{n} désigne le vecteur normal unitaire sortant du bord du domaine \mathcal{D} . Il faut en plus fixer une condition initiale $\vec{v}(\cdot, 0) = \vec{v}_0(\cdot)$ et résoudre le problème de Cauchy correspondant.

Ce n'est qu'après avoir su définir et modéliser la viscosité que Navier proposa en 1824 la célèbre équation qui porte son nom ainsi que celle de Stokes :

$$\begin{cases} \partial_t \vec{v}(\vec{x}, t) + (\vec{v}(\vec{x}, t) \cdot \vec{\nabla}) \vec{v}(\vec{x}, t) = -\vec{\nabla} p(\vec{x}, t) + \nu \Delta \vec{v}(\vec{x}, t) & \text{dans } \mathcal{D} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 \\ \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial \mathcal{D} \end{cases} \quad (12.2)$$

Ces deux systèmes d'équations sont bien entendus définis au sens des distributions. On se propose dans ce chapitre de faire un tour d'horizon des méthodes étudiant la stabilité asymptotique des solutions des deux systèmes d'équations et essayant de comprendre si la solution d'un des deux systèmes se retrouve par passage à la limite dans la solution de l'autre.

12.1 Solution forte de l'équation de Navier-Stokes

Leray a établi en 1933 [140] le résultat suivant sur le problème de Cauchy pour l'équation de Navier-Stokes. Si $\vec{v}_0 \in H_0^{\text{grad}}(\mathcal{D})$ et vérifie $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ sur $\partial \mathcal{D}$, il existe

alors une solution régulière (forte) unique pendant un intervalle de temps $[0, T^*]$. Au delà de T^* , qui dépend de \vec{v}_0 , il existe une solution faible dont on ne sait pas montrer l'unicité.

Le temps $T^* > 0$ est d'autant plus petit que $|\vec{v}_0|$ est élevé. Selon Leray, la turbulence apparaît dès que la solution régulière laisse place à une solution faible qui peut avoir de la vortacité infinie en certains points.

Une question intéressante se pose toutefois et fait l'objet du prix Clay : "la solution de l'équation de Navier-Stokes cesse-t-elle d'être régulière au bout d'un temps fini ?". On voit que le théorème de Leray régie complètement le comportement des écoulements laminaires (\vec{v}_0 petit), mais le cas turbulent (\vec{v}_0 ou T^* grand) lui échappe totalement car la seule existence sans unicité d'une solution faible n'est pas physiquement consistante.

12.2 Solution forte de l'équation d'Euler

A l'instar du théorème de Leray, on a un résultat pour l'équation d'Euler proposé par Kato en 1972 : si \vec{v}_0 vérifie une condition de Hölder pour ses dérivées, et si $\vec{v}_0 \cdot \vec{n} = 0$ sur $\partial\mathcal{D}$, il existe un temps fini $T^* > 0$ et une solution classique unique sur l'intervalle $[0, T^*[$.

On ne sait pourtant rien de ce qui passe après T^* . Remarquons aussi que l'équation d'Euler conserve l'énergie cinétique $\frac{1}{2} \int_{\mathcal{D}} \vec{v}^2$.

12.3 Degrés de liberté

En toute rigueur, la description d'un écoulement en termes de champ de vitesse fait intervenir un nombre infini de degrés de liberté. Mais par chance, un raisonnement simple dû à Kolmogorov ramène ce nombre à une quantité finie de l'ordre de $Re^{\frac{9}{4}}$ où Re est le nombre de Reynolds. Malgré cette simplification, le problème ne peut se simuler de manière efficace sur ordinateur que dans certains cas. Prenons l'exemple des phénomènes en météorologie où $Re \sim 10^{12}$. Avec la réduction de Kolmogorov, on arrive à un nombre de degrés de liberté de l'ordre de 10^{27} .

Notons que le raisonnement de Kolmogorov supposait que la solution de l'équation de Navier-Stokes est suffisamment régulière pour qu'à petite échelle elle puisse être considérée comme sensiblement constante, ce qui dérange bien évidemment les mathématiciens.

On sait que les écoulements bidimensionnels possèdent des propriétés physiques différentes des écoulements tri-dimensionnels. Dans le premier cas, l'énergie cinétique est conservée ainsi que l'enstrophie. On peut ainsi démontrer plus facilement l'existence, l'unicité et la régularité des équations d'Euler et de Navier-Stokes, permettant par là de chercher si les deux solutions correspondent lors du passage à la limite inviscide, c'est à dire le passage de l'équation de Navier-Stokes à celle d'Euler. En trois dimensions, il y a une forte dissipation d'énergie cinétique et on n'observe pas l'apparition

de structures dites cohérentes dans les écoulements turbulents comme dans le cas bidimensionnel.

12.4 Turbulence bidimensionnelle

L'approximation bidimensionnelle qui consiste à considérer que l'écoulement a lieu dans un plan ou une surface, est justifiée lorsque le fluide est confiné dans une couche de faible épaisseur par rapport aux échelles horizontales du dit écoulement. C'est la situation pratique des modèles atmosphériques ou océaniques.

12.4.1 Résultats d'unicité

Onsager fut le premier à remarquer qu'il fallait d'abord expliquer la conservation de l'énergie cinétique et l'apparition de structures cohérentes. Selon lui, l'équation d'Euler est la meilleure candidate.

Les solutions des équations d'Euler et de Navier-Stokes en dimension deux permettent d'éviter les inconvénients du théorème de Leray. En effet pour \vec{v}_0 régulier, la solution régulière de l'équation de Navier-Stokes existe en tout temps. De plus, même si \vec{v}_0 est peu régulier, l'unicité de la solution est assurée. De même, pour l'équation d'Euler écrite pour la vorticité $\omega = \vec{\nabla} \wedge \vec{v}$, qui est un scalaire en dimension deux, on dispose d'un résultat important dû à Youdovitch en 1963.

$$\begin{cases} \partial_t \omega + \vec{\nabla}(\omega \vec{v}) = 0 & \text{dans } \mathcal{D} \\ \omega = \vec{\nabla} \wedge \vec{v} & \text{dans } \mathcal{D} \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0 & \text{dans } \mathcal{D} \\ \vec{v} \cdot \vec{n} = 0 & \text{sur } \partial \mathcal{D} \end{cases} \quad (12.3)$$

Ce dernier énonce que pour toute fonction mesurable bornée ω_0 il existe une unique solution faible mesurable et bornée ω admettant ω_0 comme condition initiale. Le résultat de Youdovitch n'est plus du tout valide si l'on s'autorise à prendre pour la condition initiale ω_0 une mesure, comme par exemple dans le cas d'une vitesse initiale discontinue.

12.4.2 Passage à la limite turbulente

Lors du passage aux grands nombres de Reynolds (ou aux faibles viscosités), i.e le passage de l'équation de Navier-Stokes à l'équation d'Euler et sous des hypothèses raisonnables, la solution de l'équation de Navier-Stokes correspondant à une condition initiale \vec{v}_0 donnée tend vers une solution de l'équation d'Euler ayant la même condition initiale. On entend par hypothèses raisonnables, soit des conditions aux limites périodiques (écoulements sur le tore), soit que l'on remplace la condition d'arrêt aux

bords $\vec{v} \equiv \vec{0}$ sur $\partial\mathcal{D}$ par une condition de friction de bord, celle-la même qui avait été proposé initialement par Navier et qui semble dans beaucoup de situations plus réaliste.

Ainsi, à l'instar d'Onsager, la turbulence bidimensionnelle peut s'étudier simplement à partir de l'équation d'Euler. L'énergie cinétique est conservée par la solution de Youdovitch.

Mais qu'en est il de l'apparition de structures cohérentes ? La formation de ces structures peut être étudiée par simulation numérique. Comme la vorticit  est transport e par un champ de vitesse incompressible, et qu'elle est conserv e, il est ais e de suivre l' volution d'un tourbillon num rique o  la vorticit  est constante sur une r gion et nulle en dehors. La surface de cette t che de vorticit  se conserve globalement mais va se d former localement et on verra appara tre des oscillations de la vorticit . Si on ne se pr occupe que de la valeur moyenne de la vorticit , on constate qu'elle converge. Autrement dit, la vorticit  converge faiblement vers une certaine fonction ω^* . Puisque le rel vement $\omega \mapsto \vec{v}$ est compact, on en d duit que \vec{v} converge pour la norme L^2 vers le champ de vitesse correspondant \vec{v}^* qui est le champ de vitesse d crivant la structure organis e.

Malheureusement, on ne sait pas g n raliser ce r sultat   la solution de l' quation d'Euler. Par contre, pour un ω_0 donn , on peut exhiber ω^* . Pour ce faire, on peut mettre en oeuvre le programme d'Onsager qui revient    tendre   l' quation d'Euler la m canique statistique de Boltzmann. On construit dans un premier temps, et au moyen de la th orie des grandes d viations, la fonctionnelle d'entropie qui doit mesurer la notion de d sordre associ e   un  coulement turbulent. Puis on maximise cette entropie sous les contraintes associ es aux invariants de l' quation d'Euler, la solution de ce probl me variationnel  tant justement ω^* . Le dernier obstacle se trouve dans la difficult  de prouver l'ergodicit  du syst me dynamique form  par les  quations d'Euler bidimensionnelle, qui est un syst me hamiltonien infini, emp chant ainsi de montrer que ω converge bien vers ω^* . On peut cependant essayer une d marche heuristique consistant   coupler les simulations num riques aux exp riences en laboratoire.

12.5 Turbulence tridimensionnelle

Elle se distingue de la turbulence bidimensionnelle par le fait que l'on observe pas de structures coh rentes. Elle se distingue aussi par le fait qu'on ne peut pas comme en dimension deux, se concentrer sur l' tude de l' quation d'Euler, ce qui  tait une grande simplification du probl me. Le fait que la dissipation d' nergie soit importante en dimension trois, m me en r gime turbulent conduit   penser que la viscosit  m me faible joue un r le important.

12.5.1 Point de vue de Leray (1933-1934)

Pour Leray [140, 142], il faut donc  tudier l' quation de Navier-Stokes et passer   la limite inviscide ensuite. Il s'est toujours m fi  de l' quation d'Euler et pensait que cette derni re contenait en elle un certain nombre d'avatars dont le paradoxe de

d'Alembert et la non-unicité du problème de Cauchy formaient la partie visible de l'iceberg.

12.5.2 Point de vue d'Onsager (1949)

Un autre point de vue, celui d'Onsager [141, 142] peut aussi apporter un éclairage sur la genèse de la turbulence en dimension trois. Pour Onsager par contre, la viscosité n'intervient pas dans la loi des $4/5$; la dissipation est simplement reliée à la non régularité du champ de vitesse. On peut donc supposer $\nu = 0$ et travailler avec l'équation d'Euler. Mais cette dernière est un système hamiltonien sensé conserver l'énergie. Mais pour le montrer on utilise une formulation variationnelle, il est donc nécessaire d'avoir certaines régularités minimales du champ des vitesses. Onsager imagine alors que les solutions turbulentes sont modélisées à l'aide de solutions de l'équation d'Euler, peu régulière et par conséquent n'assurant pas la conservation de l'énergie. Ces solutions sont exactement les solutions faibles définies précédemment. Shnirelman a exhibé récemment une solution faible dissipant l'énergie. On dispose ainsi de candidats potentiels pour représenter le champ de vitesse d'un écoulement turbulent : ce sont les solutions faibles de l'équation d'Euler et dissipant l'énergie cinétique. Malheureusement on ne dispose toujours pas à ce stade là de résultats d'existence à partir d'une solution initiale peu régulière, et encore moins de résultat d'unicité. En s'appuyant sur la loi des $4/5$, Onsager conjectura en 1949 que les solutions faibles de l'équation d'Euler qui vérifient une condition de Hölder d'ordre strictement plus grand que $1/3$ doivent conserver l'énergie. Une version plus faible de cet énoncé a pu être démontré en 1992 par Eyink, et deux ans plus tard en 1994, Constantin, E et Titi donnèrent une preuve complète de la conjecture.

12.5.3 Théorème de Duchon et Robert

En 2000, Duchon et Robert explicitèrent et clarifièrent la notion de dissipation d'énergie dû à une perte de régularité à partir d'une version régularisée de l'équation d'Euler [139].

Théorème 12.5.1 *Soit une solution faible \vec{v} de l'équation d'Euler sur le tore Π^3 , telle que \vec{v} soit intégrable sur $]0, T[\times \Pi^3$, et prenant une distribution ϕ de \mathbb{R}^3 , positive, d'intégrale unitaire et symétrique. Pour $\epsilon > 0$, on pose*

$$\phi_\epsilon(x) = \frac{1}{\epsilon^3} \phi\left(\frac{x}{\epsilon}\right) \quad (12.4)$$

ainsi que

$$D_\epsilon(\vec{v}) = \frac{1}{4} \int \vec{\nabla} \phi_\epsilon(\xi) \cdot \delta \vec{v} (\delta \vec{v})^2 d\xi \quad (12.5)$$

Alors à la limite $\epsilon \rightarrow 0$, $D_\epsilon(\vec{v})$ converge au sens des distributions vers une distribution $D(\vec{v})$ indépendante de ϕ et on a le bilan local d'énergie

$$\partial_t \left(\frac{1}{2} \bar{v}^2 \right) + \vec{\nabla} \cdot \left(\left(\frac{1}{2} \bar{v}^2 + p \right) \bar{v} \right) + D(\bar{v}) = 0 \quad (12.6)$$

Corollaire 12.5.2 *En faisant une hypothèse de régularité du champ de vitesse du type*

$$\int \|\bar{v}(\bar{x} + \vec{\xi}, t) - \bar{v}(\bar{x}, t)\|^3 dx \leq c(t) \|\vec{\xi}\| \sigma(\|\vec{\xi}\|) \quad (12.7)$$

où $\lim_{r \rightarrow 0} \sigma(r) = 0$, et $\int_0^T c(t) dt < \infty$, et en intégrant cette équation de bilan sur tout le domaine, on en déduit immédiatement une preuve de la conjecture d'Onsager. On peut aussi avec des hypothèses de régularité raisonnablement faibles montrer que l'on retrouve bien la loi dite des 4/5. On doit cependant prescrire que l'énergie ne peut être que dissipée et non créée dans un fluide turbulent, ce qui impose clairement que $D(\bar{v})$ est une distribution positive, donc une mesure. Cette condition est analogue aux conditions entropiques choisies pour l'étude des EDP hyperboliques afin de se restreindre parmi toutes les solutions ayant la même condition à celle qui vérifie la condition d'entropie de Lax, laquelle vérifie aussi une relation du type $D(\bar{v}) \geq 0$.

12.6 Conclusion

En analyse fonctionnelle, rien pour l'instant n'interdit de penser que les bons objets décrivant un écoulement turbulent soient les solutions faibles de l'équation d'Euler. Il est aussi possible que l'équation d'Euler ne soit pas le modèle de la turbulence, puisqu'elle ne prend pas en compte les fluctuations locales du champ de vitesse. Ainsi pour la turbulence tridimensionnelle, les approches mathématiques sur l'équation de Navier-Stokes ne semblent pas du tout prometteuse, et c'est pourquoi les chapitres suivants vont expliciter une plus approche statistique et dynamique de l'étude de cette difficile équation, qu'est Navier-Stokes.

Chapitre 13

Description physique de la turbulence

On se propose dans ce chapitre de présenter de manière simple les résultats phénoménologiques et expérimentaux complètement admis pour la description de la turbulence hydrodynamique [144, 145, 146, 147, 148]. Commençons tout d'abord par détailler un peu plus la ou les équations du mouvement en hydrodynamique, les célèbres équations de Navier-Stokes (Navier, 1824).

13.1 Etude des symétries et bilan énergétique

13.1.1 Conditions aux bords périodiques

Revenons à l'équation de Navier-Stokes. Comme le montrent de nombreuses expériences et suivant un argument justifié à *posteriori* au travers d'hypothèses phénoménologiques, on n'étudie la turbulence que loin des bords de l'écoulement. On peut de manière équivalente considérer que le milieu de l'écoulement est \mathbb{R}^3 . Il est cependant plus simple de ne considérer qu'un milieu fini mais avec des conditions aux bords périodiques sur le champ de vitesse. On prend donc une boîte B_L de volume L^3 et on postule que

$$\vec{v}(x + aL, y + bL, z + cL, t) = \vec{v}(x, y, z, t), \quad \forall (x, y, z) \in [0, L]^3, \quad \forall (a, b, c) \in \mathbb{Z}^3 \quad (13.1)$$

On retrouve le domaine infini en passant à la limite $L \rightarrow \infty$. On définit \mathcal{H} comme l'espace des champs de vitesse L -périodique et à divergence nulle. En notant la valeur moyenne d'une fonction f de \mathcal{H} sur B_L par

$$\langle f \rangle = \frac{1}{L^3} \int_{B_L} f(\vec{r}) d^3\vec{r} \quad (13.2)$$

on peut donner une série de quatre propriétés caractéristiques des fonctions de \mathcal{H} qui seront utilisées pour exhiber certaines lois de conservation :

1. $\langle \partial_i f \rangle = 0$
 2. $\langle f \partial_i g \rangle = - \langle (\partial_i f) g \rangle$
 3. $\langle \vec{u} \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{v}) \rangle = \langle (\vec{\nabla} \wedge \vec{u}) \cdot \vec{v} \rangle$
 4. $\langle \vec{u} \cdot \Delta \vec{v} \rangle = - \langle (\vec{\nabla} \wedge \vec{u}) \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{v}) \rangle$ si $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$
- où $\partial_i \equiv \frac{\partial}{\partial x_i}$ avec $i = 1, 2, 3$.

13.1.2 Elimination de la pression

Un intérêt majeur de l'utilisation des conditions aux bord périodiques est la possibilité d'éliminer la pression de l'équation de Navier-Stokes non-forcée en prenant simplement sa divergence et en se servant de la condition d'incompressibilité. Ce qui donne une équation de Laplace pour la pression

$$\Delta p(\vec{x}, t) = -\partial_{ij} v_i(\vec{x}, t) v_j(\vec{x}, t) \quad (13.3)$$

Posons $\sigma(\vec{x}, t) = -\partial_{ij} v_i(\vec{x}, t) v_j(\vec{x}, t)$.

Puisque σ est une fonction des dérivées spatiales de fonctions périodiques, elle est donc à valeur moyenne nulle

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{L^3} \int_{B_L} \sigma(\vec{r}) d^3 \vec{r} = 0 \quad (13.4)$$

On cherche la pression sous la forme elle-aussi d'une fonction L-périodique sachant que la physique ne change pas si l'on rajoute une constante à la pression. Une décomposition des champs en série de Fourier nous donne immédiatement la solution de cette équation :

$$p(\vec{r}, t) \equiv \Delta^{-2} \sigma(\vec{r}, t) = - \sum_{\vec{k} \in \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}^{*3}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \frac{\hat{\sigma}_{\vec{k}}}{k^2} \quad (13.5)$$

L'opérateur Δ^{-2} n'est pas local puisqu'il fait intervenir des convolutions. On peut donc réécrire l'équation de Navier-Stokes sous la forme

$$\partial_t v_i + (\delta_{il} - \partial_{il} \Delta^{-2}) \partial_j (v_j v_l) = \nu \Delta v_i \quad (13.6)$$

On voit donc que cette équation fait intervenir des opérateurs locaux et non-locaux. Si la condition d'incompressibilité est assurée à $t = 0$ elle se propagera infiniment en temps. La pression est en quelque sorte un multiplicateur de Lagrange permettant de tenir compte de la condition d'incompressibilité. On pourrait de la même manière prendre le rotationnel de l'équation de Navier-Stokes et arriver à une équation du même type pour la vorticit  $\vec{\omega} = \vec{\nabla} \wedge \vec{v}$ avec le m me op rateur non local

$$\partial_t \vec{\omega} = \vec{\nabla} \wedge (\vec{v} \wedge \vec{\omega}) + \nu \Delta \vec{\omega} \quad (13.7)$$

13.1.3 Symétries de l'équation de Navier-Stokes

On fera un abus de langage en qualifiant de symétrie un groupe d'invariance discret ou continu d'une théorie dynamique. On notera \mathbf{G} un groupe de transformation agissant sur \mathcal{H} , l'espace des fonctions L-périodiques et sans divergence. On dira que \mathbf{G} est un groupe de symétrie de l'équation de Navier-Stokes si $\forall \vec{v} \in \mathcal{H}$ solution de l'équation de Navier-Stokes, et $\forall \mathbf{g} \in \mathbf{G}$, $\mathbf{g}\vec{v}$ est encore une solution de la même équation. On donne ci-dessous une liste répertoriant les symétries connues de l'équation de Navier-Stokes qui mis à part le changement d'échelle, ne sont que des conséquences des symétries de l'équation du mouvement de Newton appliquée à une particule fluide.

Translation en espace

Soit $\mathbf{g}_{\vec{\rho}}^{\text{espace}} : (t, \vec{r}, \vec{v}) \mapsto (t, \vec{r} + \vec{\rho}, \vec{v})$ avec $\vec{\rho} \in \mathbb{R}^3$. L'invariance est triviale puisque $\vec{\nabla}_{\vec{r}} \equiv \vec{\nabla}_{\vec{r} + \vec{\rho}}$.

Translation en temps

Soit $\mathbf{g}_{\tau}^{\text{temps}} : (t, \vec{r}, \vec{v}) \mapsto (t + \tau, \vec{r}, \vec{v})$ avec $\tau \in \mathbb{R}$. L'invariance est là aussi triviale puisque $\partial_t \equiv \partial_{t + \tau}$.

Transformation galiléenne

$\mathbf{g}_{\vec{V}}^{\text{galiléen}} : (t, \vec{r}, \vec{v}) \mapsto (t, \vec{r} + \vec{V}t, \vec{v} + \vec{V})$ avec $\vec{V} \in \mathbb{R}^3$. Pour la transformation galiléenne, il faut remarquer que seul le terme non-linéaire permet de conserver l'invariance galiléenne en annulant l'effet de la dérivation en temps. Il est ainsi le terme possible susceptible de conserver cette invariance dans une équation d'évolution de la vitesse.

Parité

Soit $\mathbf{g}^{\text{parité}} : (t, \vec{r}, \vec{v}) \mapsto (t, -\vec{r}, -\vec{v})$. On se place à la limite où le terme non-linéaire est négligeable.

Rotation

Soit $\mathbf{g}_A^{\text{rotation}} : (t, \vec{r}, \vec{v}) \mapsto (t, A\vec{r}, A\vec{v})$ avec $A \in SO(\mathbb{R}^3)$ et à la limite $L \rightarrow \infty$. En fait toutes les rotations ne sont pas compatibles avec les conditions aux limites, lesquelles éliminent certaines rotations possibles. Il faut donc prendre garde au fait qu'on se restreint à un sous-groupe discret du groupe des rotations.

Changement d'échelle

Soit $\mathbf{g}_{\lambda}^{\text{scaling}} : (t, \vec{r}, \vec{v}) \mapsto (\lambda^{1-h}t, \lambda\vec{r}, \lambda^h\vec{v})$ avec $\lambda \in \mathbb{R}^+$, $h \in \mathbb{R}$ et uniquement à la limite inviscide ($\nu = 0$). Lors de cette transformation tous les termes de l'équation de Navier-Stokes sont multipliés par la même quantité λ^{2h-1} à l'exception de λ^{h-2} .

A viscosité finie, si on veut la cohérence de cette équation il suffit que $h = -1$. On retrouve dans ce cas le principe d'auto-similarité bien connu des mécaniciens des fluides puisque le nombre de Reynolds y est conservé. A la limite inviscide il existe par contre une infinité de groupes de transformations d'échelle dont le paramètre est $h \in \mathbb{R}$.

13.1.4 Lois de conservation

Puisque l'équation de Navier-Stokes n'est pas conservative (elle est dissipative en général), il n'est pas possible de trouver pour chaque symétrie une quantité physique conservée comme le stipule le théorème de Noether en mécanique analytique. On peut cependant exhiber certaines lois de conservation au sens des moyennes, c'est à dire des lois de conservation globales et non locales. Cependant, les champs de pression et de vitesse doivent être supposés suffisamment réguliers afin permettre les opérations de dérivation et d'intégration. Ces hypothèses sont justifiées lorsque la viscosité est strictement positive, par contre à la limite inviscide, Onsager a montré en 1949 [141, 142] que les solutions de l'équation d'Euler ne sont plus du tout régulières et que l'énergie ne se conservait pas. Un affaiblissement des hypothèses de régularité permet toutefois de récupérer la conservation de l'énergie pour les solutions de l'équation d'Euler (Frisch et Sulem en 1975, Eyink en 1994, Constantin and Titi en 1994).

Conservation de la quantité de mouvement

En utilisant la condition d'incompressibilité $\partial_j v_j = 0$, on peut écrire le terme d'advection de la manière suivante $v_j \partial_j v_i = \partial_j (v_j v_i)$. Prenons la valeur moyenne de l'équation de Navier-Stokes. Les dérivées spatiales de fonctions périodiques étant toutes nulles en moyenne, seul le terme de dérivation en temps contribue notablement à la valeur moyenne

$$\left\langle \frac{d}{dt} \vec{v} \right\rangle = \frac{d}{dt} \langle \vec{v} \rangle = \vec{0} \quad (13.8)$$

Ce qui s'interprète comme la conservation de la quantité de mouvement puisque le fluide étant incompressible, la densité est constante.

Conservation de l'énergie

Multiplions l'équation de Navier-Stokes incompressible $\partial_t v_i + \partial_j v_j v_i = -\partial_i p + \nu \partial_{jj} v_i$ par v_i . On obtient ainsi

$$v_i \partial_t v_i + v_i \partial_j v_j v_i = -v_i \partial_i p + \nu v_i \partial_{jj} v_i \quad (13.9)$$

Ce qui s'écrit aussi

$$\frac{1}{2} \partial_t v_i v_i + \frac{1}{2} \partial_j v_j v_i v_i = -v_i \partial_i p + \nu v_i \partial_{jj} v_i \quad (13.10)$$

En prenant la moyenne spatiale et en utilisant à nouveau le fait que les dérivées spatiales de fonctions périodiques sont à valeur moyenne nulle, on écrit que

$$\begin{aligned}\partial_t \langle \frac{1}{2} \vec{v}^2 \rangle &= \langle p \partial_i v_i \rangle - \nu \langle (\partial_j v_i)(\partial_j v_i) \rangle \\ &= -\nu \langle (\partial_j v_i)(\partial_j v_i) \rangle \\ &= -\nu \langle (\vec{\nabla} \wedge \vec{v})^2 \rangle\end{aligned}\quad (13.11)$$

En posant $E = \langle \frac{1}{2} \vec{v}^2 \rangle$ pour l'énergie par unité de masse, on obtient le bilan d'énergie suivant

$$\partial_t E = -\nu \langle \omega^2 \rangle \quad (13.12)$$

Conservation de l'hélicité

En prenant le produit scalaire entre la vitesse et l'équation (13.7), on obtient après moyenne spatiale et utilisation du fait que $\langle \vec{u} \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{v}) \rangle = \langle (\vec{\nabla} \wedge \vec{u}) \cdot \vec{v} \rangle$

$$\frac{d}{dt} \langle \vec{v} \cdot \vec{\omega} \rangle = 2 \langle \vec{v} \cdot \partial_t \vec{\omega} \rangle \quad (13.13)$$

En utilisant à nouveau le fait que $\langle \vec{u} \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{v}) \rangle = \langle (\vec{\nabla} \wedge \vec{u}) \cdot \vec{v} \rangle$ et que $\langle \vec{u} \cdot \Delta \vec{v} \rangle = - \langle (\vec{\nabla} \wedge \vec{u}) \cdot (\vec{\nabla} \wedge \vec{v}) \rangle$ si $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ on aboutit à

$$\frac{d}{dt} \langle \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{\omega} \rangle = \langle \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \wedge (\vec{r} \wedge \vec{\omega}) \rangle + \nu \langle \vec{v} \cdot \Delta \vec{\omega} \rangle \quad (13.14)$$

Si on nomme l'hélicité moyenne et l'hélicité vorticale moyenne respectivement $H = \langle \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{\omega} \rangle$, et $H_{\vec{\omega}} = \langle \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \vec{\nabla} \wedge \vec{\omega} \rangle$, la conservation de l'hélicité s'écrit alors

$$\frac{d}{dt} H = -2\nu H_{\vec{\omega}} \quad (13.15)$$

Remarque Le bilan d'énergie est très important pour essayer de montrer l'unicité de la solution de l'équation de Navier-Stokes à trois dimensions et asymptotiquement en temps. En fait, l'unicité n'est prouvée qu'en dimension deux, car à cette dimension une deuxième loi de conservation apparaît et peut être utilisée. Il s'agit de la conservation de l'énstrophie moyenne $\Omega = \langle \frac{1}{2} \omega^2 \rangle$

$$\frac{d}{dt} \Omega = -2\nu P \quad (13.16)$$

où $P = \langle \frac{1}{2} \| \vec{\nabla} \wedge \vec{\omega} \|^2 \rangle$ est appelée palénstrophie moyenne.

13.1.5 Transfert d'énergie

On remarque que le bilan d'énergie (13.12) ne contient pas de contribution du terme non-linéaire de l'équation de Navier-Stokes. On peut alors se demander quel est le rôle du terme non linéaire. On va maintenant montrer qu'il ne fait que redistribuer l'énergie entre les échelles.

Posons $l = k^{-1}$ l'échelle du filtrage et introduisons dans l'équation de Navier-Stokes un terme de force d'excitation périodique en espace \vec{f} dont le rôle est de modéliser l'injection à grande échelle d'énergie dans le fluide et de tenir compte des perturbations et bruits extérieurs. On définit un filtre passe-bas \mathcal{P}_k par rapport à la fréquence k . Puis on décompose les champs en mode rapide et lent par rapport à k ,

$$\begin{cases} \vec{v} = \vec{v}_k^< + \vec{v}_k^> \\ \vec{f} = \vec{f}_k^< + \vec{f}_k^> \end{cases} \quad (13.17)$$

et on applique l'opérateur de filtrage, qui est aussi un opérateur de projection et qui commute avec les opérateurs de dérivation spatiale, à l'équation de Navier-Stokes

$$\begin{cases} \partial_t \vec{v}^< + \mathcal{P}_k(\vec{v}_k^< + \vec{v}_k^>) \cdot \vec{\nabla}(\vec{v}_k^< + \vec{v}_k^>) = -\vec{\nabla} p_k^< + \nu \Delta \vec{v}_k^< + \vec{f}_k^< \\ \vec{\nabla} \cdot \vec{v}_k^< = 0 \end{cases} \quad (13.18)$$

En prenant le produit scalaire de la première équation par $\vec{v}_k^<$ et en passant à la moyenne spatiale on aboutit à

$$\begin{aligned} \partial_t \langle \frac{1}{2} \|\vec{v}_k^<\|^2 \rangle + \langle \vec{v}_k^< \cdot [(\vec{v}_k^< + \vec{v}_k^>) \cdot \vec{\nabla}(\vec{v}_k^< + \vec{v}_k^>)] \rangle &= - \langle \vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} p_k^< \rangle + \nu \langle \vec{v}_k^< \cdot \Delta \vec{v}_k^< \rangle \\ &+ \langle \vec{v}_k^< \cdot \vec{f}_k^< \rangle \end{aligned} \quad (13.19)$$

Cette équation peut encore être simplifiée car

$$\begin{aligned} \langle \vec{v}_k^< \cdot [(\vec{v}_k^< + \vec{v}_k^>) \cdot \vec{\nabla}(\vec{v}_k^< + \vec{v}_k^>)] \rangle &= \langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^<] \rangle + \langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^> \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^<] \rangle \\ &+ \langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \rangle + \langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^> \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \rangle \\ &= \langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \rangle + \langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^> \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \rangle \end{aligned} \quad (13.20)$$

En effet

$$\langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \rangle = \langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^> \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \rangle = 0 \quad (13.21)$$

Ce qui traduit le fait que les interactions aux petites échelles ne peuvent pas contribuer à l'énergie des petites échelles. De même, l'advection des petites échelles par les grandes échelles ne contribuent pas non plus à l'énergie des petites échelles.

Ainsi

$$\begin{aligned} \partial_t \left\langle \frac{1}{2} \|\vec{v}_k^<\|^2 \right\rangle + \left\langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \right\rangle + \left\langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^> \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \right\rangle = - \left\langle \vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} p_k^< \right\rangle \\ + \nu \left\langle \vec{v}_k^< \cdot \Delta \vec{v}_k^< \right\rangle + \left\langle \vec{v}_k^< \cdot \vec{f}_k^< \right\rangle \end{aligned} \quad (13.22)$$

Définissons quelques grandeurs :

– L'énergie cumulée entre le nombre d'onde 0 et k ,

$$\mathcal{E}_k = \frac{1}{2} \left\langle \|\vec{v}_k^<\|^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_{k' \in \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}^{*3}, k' \leq k} \|\hat{v}_k\|^2 \quad (13.23)$$

– L'enstrophie cumulée,

$$\Omega_k = \frac{1}{2} \left\langle \|\vec{\omega}_k^<\|^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \sum_{k' \in \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}^{*3}, k' \leq k} k'^2 \|\hat{v}_k\|^2 \quad (13.24)$$

– L'énergie cumulée injectée par la force,

$$\mathcal{F}_k = \frac{1}{2} \left\langle \vec{f}_k^< \cdot \vec{v}_k^< \right\rangle = \sum_{k' \in \frac{2\pi}{L} \mathbb{Z}^{*3}, k' \leq k} \hat{f}_k \cdot \hat{v}_{-k} \quad (13.25)$$

– Le flux d'énergie au nombre d'onde k

$$\Pi_k = \left\langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^< \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \right\rangle + \left\langle \vec{v}_k^< \cdot [\vec{v}_k^> \cdot \vec{\nabla} \vec{v}_k^>] \right\rangle \quad (13.26)$$

Ce qui permet finalement d'écrire le bilan d'énergie par échelle (13.22) comme

$$\partial_t \mathcal{E}_k + \Pi_k = -2\nu \Omega_k + \mathcal{F}_k \quad (13.27)$$

On voit donc que le taux de variation de l'énergie à l'échelle $l = k^{-1}$ est égal à l'énergie injectée par la force à cette échelle diminuée de l'énergie dissipée en raison de l'hélicité moins le flux d'énergie vers les petites échelles dues au terme non-linéaire de l'équation de Navier-Stokes. Ce dernier a donc pour rôle de redistribuer l'énergie aux différentes échelles de l'écoulement.

13.2 Phénoménologie de la turbulence

On classe les différents régimes d'écoulements en trois catégories : le régime laminaire, le régime turbulent (transitoire) et enfin le régime turbulent pleinement développé. Ce dernier est un phénomène critique où le désordre existe dans une large gamme d'échelles spatiales et temporelles. Les grandes échelles, c'est à dire celles où l'énergie est injectée (pales d'un navire, dénivellation du lit d'une rivière, ...), sont les plus importantes car elles contiennent outre l'énergie, l'essentiel de la quantité

de mouvement, de la masse et de la chaleur. Les petites échelles spatiales, c'est à dire celles où dominent les phénomènes dissipatifs et inertiels sont sûrement les plus intéressantes du point de vue fondamental puisqu'elles présentent des propriétés universelles vis à vis du mécanisme de forçage et de la configuration de l'écoulement.

On considère souvent la turbulence pleinement développée comme un phénomène critique, caractérisé par une invariance d'échelle bien plus complexe que dans les autres phénomènes critiques. En effet, dans le cas de la turbulence, l'invariance d'échelle fait intervenir un continuum d'exposants critiques, ce que l'on dénomme par invariance multifractale.

13.2.1 Nombre de Reynolds

Les équations de Navier-Stokes sont invariantes d'échelle et l'on montre aisément que le nombre de Reynolds $R_e = \frac{[(\vec{v} \cdot \vec{\nabla})\vec{v}]}{[\nu \Delta \vec{v}]} = \frac{UL}{\nu}$, où U et L sont respectivement les vitesses et longueurs caractéristiques de l'écoulement, est le seul paramètre de cette équation et que lui seul contrôle la dynamique du fluide. Puisqu'il caractérise le combat entre un terme non-linéaire $\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \vec{v}$, qui tend à amplifier les fluctuations locales du champ de vitesse, et le terme linéaire de dissipation visqueuse $\Delta \vec{v}$ qui lui tend à lisser le champ des vitesses et ainsi amortir ses fluctuations locales. On comprend donc que la turbulence apparaisse au delà d'un certain seuil d'instabilité que nous noterons R_e^* . A faible nombre de Reynolds, c'est à dire $R_e \ll R_e^*$, les non-linéarités jouent un rôle négligeable, l'écoulement est laminaire et il possède physiquement toutes les symétries mathématiques de l'équation de Navier-Stokes. Lorsque le nombre de Reynolds augmente, le terme non-linéaire l'emporte et a pour effet d'amplifier les fluctuations locales du champ de vitesse par rapport au mécanisme d'amortissement. L'écoulement devient alors instable. De manière plus précise, l'expérience montre l'existence d'une série de bifurcations, c'est à dire de seuils à partir desquels les symétries de l'équation de Navier-Stokes pour le champ de vitesse sont brisées les unes après les autres. Au delà du dernier, les effets non-linéaires dominent totalement. En général, on peut considérer que ce seuil est autour de $R_e^* = 100$.

Remarque 13.2.1 *Il faut se rappeler que la turbulence ne naît que dans des systèmes thermodynamiquement ouverts, c'est à dire que l'on alimente continuellement en énergie.*

Les propriétés d'échelle ne sont pas clairement à partir de ce seuil, c'est pourquoi il faut atteindre des seuils plus élevés pour commencer à les observer. C'est pour cela que l'on distingue la turbulence de la turbulence pleinement développée qui apparaît aux alentours de $10 \cdot R_e^* = 1000$ et qui du point de vue des phénomènes critiques est bien plus intéressante.

La turbulence développée couple un grand nombre de modes instables, c'est à dire du point de vue de la Théorie des Champs, un grand nombre de degré de liberté. Une description statistique s'impose au travers du champ des incréments de vitesse

$$\delta \vec{v}(\vec{x}, \vec{l}, t) = \vec{v}(\vec{x} + \vec{l}, t) - \vec{v}(\vec{x}, t) \quad (13.28)$$

Ses moments sont définis par

$$S_p(\vec{l}) := \langle [\delta\vec{v}(\vec{x}, \vec{l}, t) \cdot \frac{\vec{l}}{l}]^p \rangle \quad (13.29)$$

Les fonctions ou facteurs de structure sont définies par

$$\Sigma_p(\vec{l}, \tau) := \langle [\delta\vec{v}(l, \vec{r}, \vec{u}, t + \tau) \cdot \delta\vec{v}(l, \vec{r}, \vec{u}, t)]^{\frac{p}{2}} \rangle \quad (13.30)$$

Les moments ainsi que les facteurs de structure sont le pendant respectifs des fonctions de corrélation ou fonctions de Green statiques et dynamiques en Théorie Quantique des Champs pour décrire les phénomènes critiques.

Le champ des incréments de vitesse, ses moments ainsi que les fonctions de structure vont être les quantités permettant de faire le lien entre les prédictions théoriques et expérimentales. On doit cependant faire une hypothèse forte d'ergodicité du système afin de remplacer les moyennes d'ensemble par des moyennes en espace et en temps. Les symétries seront traitées désormais en loi de probabilité. Rappelons brièvement leurs caractéristiques pour le champ des incréments de vitesse

– Translation

$$\delta\vec{v}(\vec{x} + \vec{r}, \vec{l}, t) = \delta\vec{v}(\vec{x}, \vec{l}, t) \text{ en loi} \quad (13.31)$$

– Rotation

$$\delta\vec{v}(A\vec{x} + \vec{r}, A\vec{l}, t) = \delta\vec{v}(\vec{x}, \vec{l}, t) \text{ en loi, avec } A \in SO_3 \quad (13.32)$$

– Scaling

$$\delta\vec{v}(\vec{x}, \lambda\vec{l}, t) = \lambda^h \delta\vec{v}(\vec{x}, \vec{l}, t) \text{ en loi, avec } R_e \gg 1 \quad (13.33)$$

13.3 Lois expérimentales

Les propriétés statistiques d'un écoulement turbulent sont intéressantes loin des bords et aux petites échelles. Ce qui nous facilite grandement l'analyse, puisqu'il suffit de prendre pour domaine d'écoulement un cube de taille L avec des conditions aux bords périodiques. On rajoutera aussi l'hypothèse que la turbulence est homogène et isotrope.

13.3.1 Cascades de Richardson

Une première tentative d'expliquer empiriquement la turbulence, a été tentée dans les années 1920 par le météorologue anglais Richardson. Ce dernier tenta de relier la turbulence au transfert d'énergie au travers des échelles spatiales. L'énergie est introduite à l'échelle de l'écoulement L , qui développe des tourbillons en cascade et

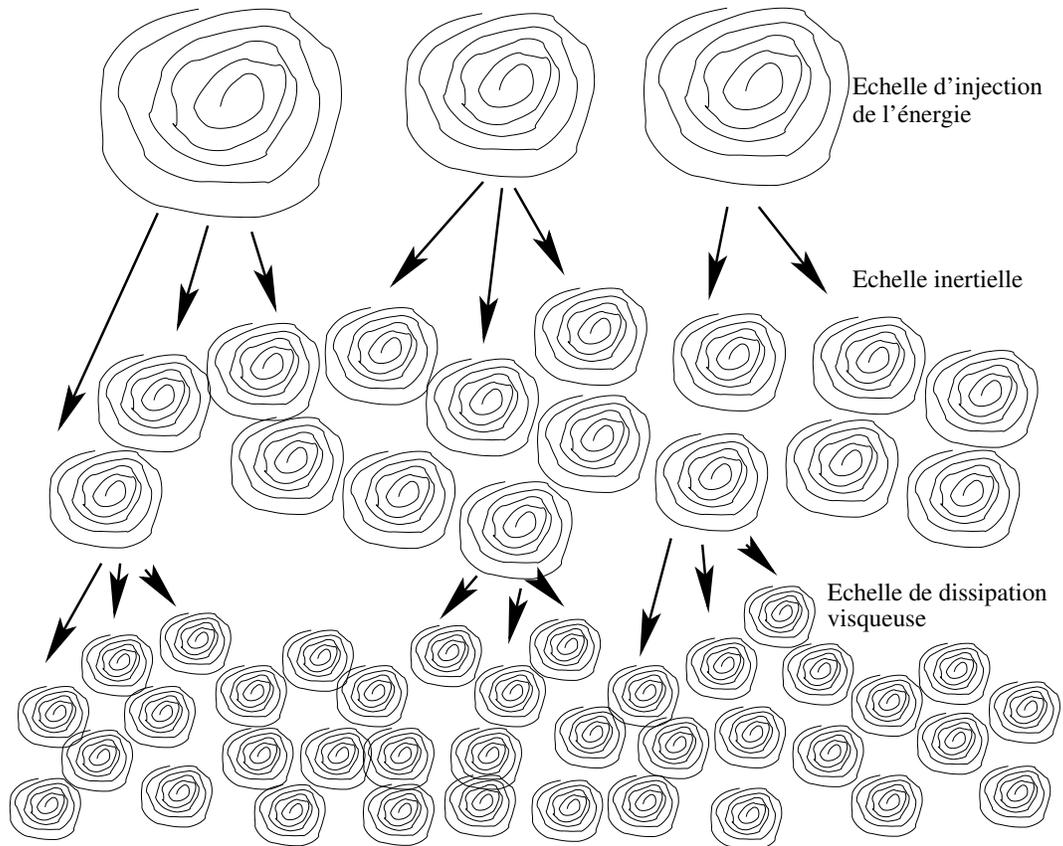


FIG. 13.1 – Cascades de Richardson

ce, à toutes les échelles. Chacun de ces tourbillons alimente des tourbillons relatifs et à des échelles inférieures jusqu'à l'échelle de la dissipation visqueuse que nous noterons l^* . La gamme d'échelles intermédiaires est qualifiée d'inertielle et est l'ensemble des échelles entre l'échelle d'injection de l'énergie que nous noterons L et l'échelle où a lieu la dissipation visqueuse que nous noterons l^* . L'énergie lorsqu'elle est introduite dans l'écoulement est de nature potentielle (confère figure (13.1)). Elle se dégrade en énergie cinétique en donnant naissance à des tourbillons plus petits. Dans la gamme inertielle, l'énergie subsiste sous forme cinétique, mais se transforme en chaleur lors de la création de tourbillons à l'échelle dissipative. Cette approche qualitative se retrouvera dans les théories de Kolmogorov K41.

13.3.2 Loi de dissipation d'énergie

On montre aisément que dans la limite inviscide $\nu \rightarrow 0$, les équations de Navier-Stokes conservent l'énergie cinétique $E = \langle \frac{1}{2} \vec{v}^2 \rangle = \frac{1}{V} \int_V \vec{v}^2(\vec{x}, t) d^3\vec{x}$ où les crochets désignent une moyenne spatiale dans le domaine de volume $V = L^3$. En effet, à partir de l'équation de Navier-Stokes et en la multipliant au sens du produit scalaire par la vitesse et après moyenne on obtient

$$\frac{dE}{dt} = - \langle \frac{1}{2} \sum_{i,j} \nu (\partial_i v_j + \partial_j v_i)^2 \rangle \quad (13.34)$$

Ce qui tend vers 0 à la limite inviscide, et montre que l'énergie cinétique est conservée à cette limite.

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{dE}{dt} = 0 \quad (13.35)$$

On définit l'énergie moyenne dissipée comme

$$\epsilon = - \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{dE}{dt} \quad (13.36)$$

En fait, on constate expérimentalement loin des bords et des couches limites présentant une dépendance au nombre de Reynolds que pour les grands valeurs de ce dernier, ce qui est équivalent à la limite inviscide, que ϵ tend vers une valeur finie non-nulle, ce qui est en contradiction avec (13.35).

$$- \epsilon = \lim_{\nu \rightarrow 0} \frac{dE}{dt} \neq \frac{dE}{dt} |_{\nu=0} \sim \frac{V^3}{L} \quad (13.37)$$

Ce phénomène que l'on dénomme anomalie dissipative et qui caractérise le fait que l'énergie cinétique est dissipée asymptotiquement à un taux constant a pour conséquence que le fluide développe des structures à petites échelles pour compenser la perte de viscosité $\nu \rightarrow 0$.

13.3.3 Loi de puissance $\frac{2}{3}$

La deuxième loi expérimentale est la loi dite des $\frac{2}{3}$. Le second moment de la variation des vitesses longitudinales est indépendant du point et du temps si la turbulence est homogène, isotrope et stationnaire et pour des échelles dans la gamme inertielle.

$$S_2(\vec{l}) := \langle [\delta \vec{v}(\vec{x}, \vec{l}, t) \cdot \frac{\vec{l}}{l}]^2 \rangle \equiv \langle \{[\vec{v}(\vec{x} + \vec{l}, t) - \vec{v}(\vec{x}, t)] \cdot \frac{\vec{l}}{l}\}^2 \rangle \sim l^{\frac{2}{3}} \quad (13.38)$$

La puissance $\frac{2}{3}$ est remplacé par un carré aux échelles de dissipation visqueuse, i.e $l < l^*$. La loi de puissance $\frac{2}{3}$ montre clairement que la dérivée spatiale du champ de vitesses n'est pas uniformément bornée sinon on aurait un carré à toutes les échelles et pas uniquement dans la gamme de dissipation visqueuse. Il existe donc des anomalies dans le champ des vitesses dans le régime turbulent, lesquelles anomalies sont suffisamment nombreuses et importantes pour affecter le comportement moyen de l'écoulement.

13.4 Loi des $\frac{5}{3}$

Cette loi est le pendant dans l'espace de Fourier de la loi des $\frac{2}{3}$. On décrit souvent le régime turbulent par son spectre de puissance $E(k)$ défini par

$$\int_0^\infty E(k) dk = \frac{1}{2} \langle \vec{v}^2 \rangle \quad (13.39)$$

Le théorème de Wiener-Kinchine, bien connu en traitement du signal permet de relier le spectre de puissance à la fonction de corrélation spatiale des vitesses

$$E(k) = \int_0^\infty kr \sin(kr) \langle \vec{v}(\vec{r} + \vec{r}_0) \vec{v}(\vec{r}_0) \rangle \frac{dr}{\pi} \quad (13.40)$$

où $\langle \vec{v}(\vec{r} + \vec{r}_0) \vec{v}(\vec{r}_0) \rangle$ ne dépend que de r par isotropie et homogénéité statistique de la turbulence.

A l'aide de ce théorème on montre aisément que si $E(k)$ suit une loi d'échelle du type $E(k) \sim k^{-\alpha}$ alors $S_2(l) \sim l^{\alpha-1}$, toujours en régime statistiquement stationnaire, homogène et isotrope.

Dans une fenêtre de vecteurs d'ondes limités par la taille finie du système et par l'échelle de dissipation visqueuse, c'est à dire dans le régime inertiel, on observe expérimentalement $E(k) \sim k^{-\frac{5}{3}}$. Ce qui est cohérent avec la loi des $\frac{2}{3}$.

13.5 Théorie K41

Richardson avait formulé une approche qualitative de la turbulence au travers de son concept de cascades d'énergie. Il faudra attendre 1941, pour qu'une approche

quantitative de la turbulence voit le jour grâce aux travaux du mathématicien soviétique A.N Kolmogorov, qui reprenant l'idée des cascades de Richardson propose de plus une description statistique des fluctuations aux petites échelles. La théorie élaborée par Kolmogorov en 1941 et qu'on dénommera K41 est construite sur trois hypothèses raisonnables et relativement bien vérifiées par les fluides turbulents

- Constance du transfert d'énergie.
- Stationnarité, isotropie, et homogénéité des propriétés statistiques.
- Forme universelle de $\langle \delta v(l)^2 \rangle$.

13.5.1 Constance du transfert d'énergie

Cette hypothèse a été déduite de l'expérience et peut être comprise au travers du fait que l'énergie n'est dissipée qu'à partir des petites échelles de l'ordre de l^* , l'échelle où la dissipation visqueuse devient efficace. Si on considère une suite d'échelle de référence $l_n = Lb^{-n}$ dans le domaine inertiel, avec un rapport inter-échelle b en général égal à 2, le taux d'énergie dissipée ϵ , et le taux de masse cédée par les tourbillons d'échelle l_i à ceux d'échelle l_{i+1} est indépendant de i . La cascade s'arrête aux tourbillons de taille l^* et de vitesse relative v^* donnant un nombre de Reynolds de l'ordre de l'unité. L'énergie de ces tourbillons est dissipée par viscosité et ne peut plus animer d'autres tourbillons. Ce qui permet de déduire que

$$l^* \sim LRe^{\frac{-3}{4}} \quad (13.41)$$

On peut aussi retrouver ce résultat en considérant qu'il existe deux processus de destructions des tourbillons. Le premier qui est dominant dans la cascade est la distorsion du tourbillon. L'échelle de temps typique d'un tel phénomène est de l'ordre de $t_d = \frac{l}{\sqrt{E(l)}}$. Le temps t_d est le rapport de l'échelle du tourbillon l à sa vitesse caractéristique $\sqrt{E(l)}$ (pour un fluide incompressible). Le second processus est la dissipation visqueuse dont le temps caractéristique est $t_\nu = \frac{l^2}{\nu}$. On l'obtient en montrant qu'une fluctuation soumise à une dissipation visqueuse décroît comme $e^{-\nu k^2 t} \simeq e^{-\frac{\nu t}{l^2}}$. Lorsque $t_d \ll t_\nu$ les tourbillons n'ont pas le temps d'être dissipés et la distorsion mécanique domine, ayant pour effet de créer des tourbillons plus petits. Les effets de la viscosité deviennent négligeables lorsque les deux temps sont du même ordre. Ce qui donne (13.41).

Une conséquence notable de ce résultat est que l'échelle de dissipation dépend fortement de la viscosité.

13.5.2 Propriétés statistiques

La seconde hypothèse est extrêmement forte. Elle consiste à supposer que dans le domaine inertiel, les propriétés statistiques de la turbulence sont homogènes, isotropes, indépendantes de l'injection d'énergie ou de matière qui crée la turbulence à

l'échelle L et de la viscosité dont le seul rôle est de fixer l'échelle de dissipation l^* . Kolomogrov suggéra donc que les symétries de l'équation de Navier-Stokes, brisées lorsque le nombre de Reynolds dépasse le seuil de la turbulence, sont rétablies mais dans un sens statistique aux grandes valeurs du nombre de Reynolds, c'est à dire dans le régime de la turbulence pleinement développée. Ainsi, en prenant la moyenne statistique, les moments S_p ne dépendent que l .

13.5.3 Forme universelle de $\langle \delta v(l)^2 \rangle$

La dernière hypothèse est de supposer une forme universelle pour $\langle \delta v(l)^2 \rangle$. On peut établir par analyse dimensionnelle et en s'aidant du fait que le taux de dissipation d'énergie est constant que

$$\langle \delta v(l)^2 \rangle \sim \epsilon^{\frac{2}{3}} l^{\frac{2}{3}} \quad (13.42)$$

L'idée sous-jacente à cette hypothèse est que dans le domaine inertiel le champ des incréments de vitesse ne dépend pas de la viscosité, mais uniquement de l'échelle et du taux de transfert d'énergie.

13.6 Lois de Kolmogorov

La première loi est une conséquence de la dernière hypothèse et nous donne une forme pour le spectre d'énergie

$$E(k) \sim \epsilon^{\frac{2}{3}} k^{-\frac{5}{3}} \quad (13.43)$$

En utilisant la seconde hypothèse, et en y rajoutant une hypothèse d'autosimilarité, l'analyse dimensionnelle montre une loi de puissance pour les fonctions de structure dans le domaine inertiel

$$S_p(l) = C_p \epsilon^{\frac{p}{3}} l^{\frac{p}{3}} \quad (13.44)$$

où les préfacteurs C_p sont adimensionnés, universels et constants.

Remarque 13.6.1 *On peut montrer analytiquement à partir de l'équation de Navier-Stokes et en utilisant la relation de Karman-Howarth-Monin [143] que $S_3(l) = -\frac{4}{5}\epsilon l$. On remarque que la formule de Kolmogorov (13.44) dans le cas $p = 3$ nous donne le même résultat.*

On sait toutefois et notamment au travers de l'étude des phénomènes d'intermittence que la théorie K41 n'est pas exacte car les fonctions de structure d'ordre supérieur à 3 montrent clairement une déviation des exposants d'échelle

$$S_p(l) = C_p \epsilon^{\frac{p}{3}} l^{\xi(p)} \quad (13.45)$$

avec $\xi(p) \neq \frac{p}{3}$. Malgré cela, la théorie K41 constitue à ce jour la meilleure théorie phénoménologique pour explorer le monde complexe de la turbulence.

Chapitre 14

Stratégies des théories récentes

On a vu dans le chapitre précédent que les écoulements turbulents sont caractérisés par des lois d'échelle. Il est donc tout à fait naturel d'essayer d'utiliser la stratégie du groupe de renormalisation pour essayer de retrouver les dites lois d'échelle. On se propose donc dans ce chapitre de présenter d'un point de vue synthétique et historique les grandes théories actuelles utilisant le groupe de renormalisation et permettant de prédire tout ou partie des propriétés d'un écoulement turbulent. Mais commençons tout d'abord par les théories classiques de la turbulence qui ont eu et ont encore le plus de succès. On laissera de côté les modèles prétendant expliquer les déviations au spectre de Kolmogorov lors des phénomènes d'intermittence.

14.1 Théories classiques de la turbulence

14.1.1 DIA

La théorie DIA (Direct Interaction Approximation) a été proposée par Kraichnan en 1959 [156, 157, 161]. Elle constitue une approximation de fermeture et est basée sur un développement considérant les non-linéarités comme faible dans l'équation pour les corrélations triples. Ces dernières étant alors reliées aux corrélations doubles, on obtient ainsi des équations fermées qui ne sont pas invariantes sous les transformations de Galilée. Un autre inconvénient majeur est qu'on trouve un spectre d'énergie en $k^{-\frac{3}{2}}$ et non celui de Kolmogorov. La théorie LDIA (Lagrangian Direct Interaction Approximation) est une amélioration de Kraichnan proposée pour la première fois en 1971 [158, 159] pour la théorie DIA et permet de remédier aux deux inconvénients de la DIA.

14.1.2 Approximation EDQNM

L'approximation EDQNM (Eddy Damped quasi Normal Markovian) a été proposée par Orszag en 1970 [152]. Elle constitue une approximation similaire aux théories galiléennes de Kraichnan. En 1987, Dannevik, Yakhot et Orszag [154, 155] ont montré que cette approximation était cohérente avec l'approche du Groupe de

Renormalisation et qu'elles étaient totalement équivalentes à l'ordre le plus bas de l' ϵ -expansion lorsque l'équation de Navier-Stokes est forcée par un bruit blanc.

14.2 Le Groupe de Renormalisation vu par les hydrodynamiciens

On expose dans cette section une version type du Groupe de Renormalisation telle qu'elle a été développée ces dernières années par les hydrodynamiciens.

14.2.1 Système dynamique

La version du Groupe de Renormalisation utilisée et développée par les hydrodynamiciens est proche du traitement des systèmes dynamiques. En effet, l'équation de Navier-Stokes incompressible est traitée comme un système dynamique et non comme un système hamiltonien. La seule différence de traitement entre ces deux catégories de systèmes est dans l'élimination des degrés de liberté. Dans le cas des systèmes dynamiques, on décompose les champs en champs à modes rapides et à modes lents. Puis on écrit l'équation d'évolution pour les modes rapides et les modes lents dans l'espace de Fourier. On essaie ensuite d'exprimer les modes rapides en fonction des modes lents, afin de n'aboutir qu'à la seule description de ces derniers.

L'hypothèse toujours présente de statistique stationnaire de l'écoulement nécessite d'introduire une source d'énergie dans l'écoulement afin d'entretenir la turbulence. Néanmoins, le spectre de Kolmogorov est une propriété universelle de la turbulence développée et ne dépend donc pas de la source d'énergie ni des conditions aux bords de l'écoulement. Pour modéliser cela, on introduit dans l'équation de Navier-Stokes une force stochastique \vec{f} aussi générale que possible, prenant en compte tous les effets extérieurs. En se servant de la condition d'incompressibilité, on va écrire l'équation de Navier-Stokes forcée dans l'espace de Fourier. Tout d'abord remarquons que la condition d'incompressibilité peut s'exprimer avec l'équation de Navier-Stokes comme

$$\Delta p = - \sum_{i,j} (\partial_i v_j)(\partial_j v_i) \quad (14.1)$$

La transformée de Fourier de $\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} - \nu \Delta \vec{v}$ s'écrit comme $g^{-1}(\hat{k}, \omega) v_l(\hat{k})$ où le propagateur g est défini par $g(\hat{k}, \omega) = (-i\omega + \nu k^2)^{-1}$. Finalement l'équation de Navier-Stokes dans l'espace de Fourier va s'écrire en se servant de (14.1) comme

$$v_l(\hat{k}) = g(\hat{k}) f_l(\hat{k}) - \frac{i\lambda}{2} g(\hat{k}) P_{lmn}(\vec{k}) \int \frac{d^{d+1}\hat{q}}{(2\pi)^{d+1}} v_m(\hat{k} - \hat{q}) v_n(\hat{q}) \quad (14.2)$$

où $P_{imn} = k_m P_{in} + k_n P_{im}$ et $P_{ij} = \delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}$. On utilise comme souvent en physique un traceur λ . Son rôle est de suivre la non-linéarité et sera mise à 1 en fin de calcul.

Remarque 14.2.1 On utilisera la notation condensée $\hat{k} = (\vec{k}, \omega)$ afin de décrire un vecteur de l'espace de Fourier, réciproque de l'espace-temps.

On se doit aussi de spécifier les propriétés du bruit, c'est à dire de la force stochastique \vec{f} . En général, on la considère comme un bruit blanc gaussien de moyenne nulle. Sa statistique est alors complètement déterminée par ses corrélations doubles qui dans l'espace de Fourier s'écrivent comme

$$\langle f_i(\hat{k}) f_j(\hat{k}') \rangle = \frac{2D_0(2\pi)^{2d+1}}{S_d} k^{-y} \delta(\hat{k} + \hat{k}') P_{i,j}(\vec{k}) \quad (14.3)$$

où D_0 est l'amplitude des corrélations et S_d la surface d'une sphère de rayon unité en dimension d . La présence du delta de Dirac traduit la stationnarité et l'homogénéité du système. L'hypothèse de bruit blanc interdit une dépendance explicite en ω . Par contre ces corrélations peuvent dépendre de la norme du vecteur d'onde. C'est pour cela que l'on introduit le terme k^{-y} qui tient compte de l'invariance d'échelle au sein de la cascade.

14.2.2 Perturbations

Il est très rare de pouvoir exhiber de manière analytique le point fixe des transformations du groupe de renormalisation. On utilise alors un paramètre permettant d'effectuer un calcul de perturbation. En Théorie Quantique des Champs et pour certaines transitions on effectue un calcul autour de la dimension 4 à l'aide d'un paramètre $\epsilon = 4 - d$, ce qu'on appelle l' ϵ -expansion. Malheureusement dans le cas de la turbulence, on ne connaît pas *a priori* de situations où l'équation de Navier-Stokes peut être renormalisée exactement. Toutefois, les hydrodynamiciens supposent en général qu'il existe un cas où la renormalisation exacte est possible, puis effectue un développement autour de cette éventuelle solution. Mais l'ordre le plus bas n'étant pas connu, il semble illusoire d'essayer d'obtenir les ordres supérieurs. On est donc obligé de supposer une forme *a priori* de la solution "exacte" en se donnant des hypothèses supplémentaires tirées de faits expérimentaux. En général, et on va le montrer plus bas, la majorité de ces tentatives aboutissent à modéliser l'influence des fluctuations à petites échelles sur le comportement à grande échelle du champ de vitesse par une viscosité renormalisée. Cette dernière, qualifiée de viscosité turbulente, remplace ainsi la viscosité moléculaire. Finalement, la solution "exacte" choisie par les hydrodynamiciens dans leur version du groupe de renormalisation est l'équation de Navier-Stokes où le terme non-linéaire est considéré comme faible. Il n'est toutefois pas évident qu'il existe des cas où cette équation puisse générer un point fixe des transformations du groupe de renormalisation. En effet, chaque procédure d'élimination d'une bande de vecteurs d'onde va générer de nouvelles non-linéarités dans l'équation de Navier-Stokes. De plus, ces non-linéarités seront multipliées par une puissance du traceur auquel est associée une fonction particulière des paramètres apparaissant dans les équations. Cette combinaison représente l'importance relative des termes non-linéaires et linéaires de l'équation de Navier-Stokes évalués pour des vecteurs d'onde

proche de la coupure, c'est à dire les vecteurs d'onde que l'on veut éliminer. On définit ainsi un paramètre de couplage effectif

$$\bar{\lambda}^2 = \frac{\lambda^2 \Lambda^{d-y-4} D_0}{\nu} \quad (14.4)$$

Ce paramètre de couplage est adimensionné et ne dépend que des paramètres apparaissant dans le système : l'amplitude des corrélations du bruit D_0 , la viscosité ν , la coupure Λ et le traceur λ qui sera égal à 1 à la fin des calculs. Grâce à ce paramètre de couplage, on arrive à définir les situations où l'équation de Navier-Stokes renormalisée admet un point fixe, en cherchant simplement à annuler $\bar{\lambda}$. On anticipe le caractère faible de $\bar{\lambda}$ en ne conservant que les corrections proportionnelles à $\bar{\lambda}^2$.

14.2.3 Elimination des degrés de liberté

L'équation de Navier-Stokes est associée à une longueur minimale Λ^{-1} en deçà de laquelle le milieu ne peut plus être considéré comme un milieu continu. On considère donc que l'équation (14.2) est limitée aux vecteurs d'onde de norme inférieure à Λ . La procédure d'élimination va simplement consister à éliminer dans (14.2) toute référence aux grands vecteurs d'onde. Suivant [149, 151, 153, 154, 155] on décompose le champ de vitesse en modes lents et rapides $\vec{v} = \vec{v}^< + \vec{v}^>$ correspondant respectivement aux domaines de vecteurs d'onde $k \leq \frac{\Lambda}{b}$ et $\frac{\Lambda}{b} \leq k \leq \Lambda$ où $b > 1$. L'équation d'évolution du champ lent est pour $k \leq \frac{\Lambda}{b}$

$$\begin{aligned} v_l^<(\hat{k}) &= g(\hat{k})f_l^<(\hat{k}) - \frac{i\lambda}{2}g(\hat{k})P_{lmn}(\vec{k}) \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1}\hat{q}}{(2\pi)^{d+1}} [v_m^<(\hat{k} - \hat{q})v_n^<(\hat{q}) \\ &+ 2v_m^<(\hat{k} - \hat{q})v_n^>(\hat{q}) + v_m^>(\hat{k} - \hat{q})v_n^>(\hat{q})] \end{aligned} \quad (14.5)$$

On voit que dans cette équation le champ rapide n'apparaît qu'au travers d'un terme d'ordre λ . Puisqu'on s'arrête à l'ordre 2 pour λ il suffit d'écrire une solution à $\vec{v}^>$ à l'ordre λ . L'équation d'évolution du champ rapide est pour $\frac{\Lambda}{b} \leq k \leq \Lambda$

$$\begin{aligned} v_l^>(\hat{k}) &= g(\hat{k})f_l^>(\hat{k}) - \frac{i\lambda}{2}g(\hat{k})P_{lmn}(\vec{k}) \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1}\hat{q}}{(2\pi)^{d+1}} [v_m^<(\hat{k} - \hat{q})v_n^<(\hat{q}) \\ &+ g(\hat{k} - \hat{q})f_m^>(\hat{k} - \hat{q})g(\hat{q})f_n^>(\hat{q}) + 2v_m^<(\hat{k} - \hat{q})g(\hat{q})f_n^>(\hat{q})] \end{aligned} \quad (14.6)$$

où $\vec{f} = \vec{f}^< + \vec{f}^>$ dans les mêmes domaines que le champ de vitesse.

On va maintenant introduire (14.6) dans (14.5). Tous les termes générés dans cette dernière équation sont décomposés en une valeur moyenne et une fluctuation. La valeur moyenne est prise sur les différentes réalisations de $f^>$ en supposant que $f^<$ et $\vec{v}^<$ sont des constantes lors de ce moyennage. Les fluctuations de ces termes sont

de nouveaux bruits venant s'additionner à ceux déjà existant. Il n'est pas évident que la statistique initiale soit conservée.

Les termes proportionnels à λ sont purement fluctuants et peuvent être intégrés dans une nouvelle définition de $f^>$, c'est à dire une renormalisation de \vec{f} . On obtient cependant deux contributions à l'ordre λ^2 . Le premier est une non-linéarité cubique en la vitesse

$$\begin{aligned} & - \frac{\lambda^2}{2} P_{lmn}(\vec{k}) \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1} \hat{q}}{(2\pi)^{d+1}} v_n^<(\hat{k} - \hat{q}) P_{mrs}(\hat{q}) g(\hat{q}) \\ & \times \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1} \hat{Q}}{(2\pi)^{d+1}} v_s^<(\hat{q} - \hat{Q}) v_r^<(\hat{Q}) \end{aligned} \quad (14.7)$$

Dans la plupart des calculs effectués par les hydrodynamiciens, ce terme est purement et simplement négligé !

Le second terme est plus intéressant et est exploitable, il s'agit d'un terme linéaire en la vitesse

$$\begin{aligned} & - 4 < \frac{i\lambda}{2} P_{lmn}(\vec{k}) \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1} \hat{q}}{(2\pi)^{d+1}} g(\hat{k} - \hat{q}) f_n^<(\hat{k} - \hat{q}) \frac{i\lambda}{2} P_{mrs}(\hat{q}) g(\hat{q}) \\ & \times \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1} \hat{Q}}{(2\pi)^{d+1}} g(\hat{q} - \hat{Q}) f_s^<(\hat{q} - \hat{Q}) v_r^<(\hat{q}) > \\ & = \lambda^2 < P_{lmn}(\vec{k}) \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1} \hat{q}}{(2\pi)^{d+1}} g(\hat{k} - \hat{q}) f_n^<(\hat{k} - \hat{q}) P_{mrs}(\vec{q}) g(\hat{q}) \\ & \times \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} \frac{d^{d+1} \hat{Q}}{(2\pi)^{d+1}} g(\hat{q} - \hat{Q}) f_s^<(\hat{q} - \hat{Q}) v_r^<(\hat{q}) > \end{aligned} \quad (14.8)$$

On se sert maintenant des hypothèses (14.3) sur les corrélations de la force stochastique qui introduisant une distribution de Dirac permettent d'intégrer sur la variable \hat{q} . On obtient alors

$$\frac{D_0 \lambda^2}{\pi S_d} P_{lmn}(\vec{k}) \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda] \times \mathbb{R}} d^{d+1} \hat{q} g^2(\hat{k} - \hat{q}) g(\hat{q}) |\hat{q} - \hat{k}|^{-y} P_{mrs}(\hat{q}) P_{ns}(\vec{q} - \vec{k}) v_r^<(\hat{k}) \quad (14.9)$$

Ce terme peut être écrit comme la contraction d'un tenseur du second ordre

$$\begin{aligned} L_l & = M_{lr}(\hat{k}) v_r(\hat{k}) \\ & = [a(k) \delta_{lr} + b(k) k_l k_r] v_r(\hat{k}) \\ & = a(k) v_l(\hat{k}) \end{aligned} \quad (14.10)$$

car la condition d'incompressibilité du champ de vitesses assure que le terme $k_l k_r$ n'intervient pas dans L_l . Le coefficient $b(k)$ n'est cependant pas nécessairement égal

à 0. Une autre manière d'extraire $a(k)$ du tenseur M est de contracter M_{lr} avec P_{lr} . On obtient alors

$$a(k) = \frac{1}{d-1} P_{lr} M_{lr} \quad (14.11)$$

Le terme L_l est donc bien proportionnel au vecteur vitesse de rapport $a(k)$.

On s'intéresse toujours dans une procédure d'élimination aux propriétés infra-rouges du système, c'est à dire à grande échelle et aux temps longs. Ce que l'on caractérise par la limite $\hat{k} = (\vec{k}, \omega) \rightarrow (\vec{0}, 0)$. On espère ainsi avoir lors du passage à cette limite sur $a(k)$ une approximation en k^2 nous permettant de renormaliser la viscosité. Le passage aux temps longs ne pose pas de problème particulier puisqu'il suffit de poser $\omega = 0$ dans les propagateurs $g(\hat{k} - \hat{q})$ et $g(\hat{q} - \hat{k})$. Par contre le passage aux grandes échelles pose problème puisque le vecteur d'onde \vec{k} est présent dans les bornes d'intégration. On peut éviter cette difficulté par changement de variables, permettant ainsi de recentrer l'intégrale autour de l'origine, la rendant ainsi symétrique, ce qui élimine les termes impairs en \vec{q} . Ce changement de variables est donné par $\vec{q} \mapsto \vec{q} + \frac{1}{2}\vec{k}$. Les bornes d'intégration sont alors $\frac{\Lambda}{b} \leq |\vec{q} + \frac{1}{2}\vec{k}| \leq \Lambda$ et $\frac{\Lambda}{b} \leq |\vec{q} - \frac{1}{2}\vec{k}| \leq \Lambda$. Ce domaine dépend encore de \vec{k} . En fait cela n'introduit qu'une dépendance proportionnelle à k^3 puisque l'intégrand est déjà proportionnel à k . On peut donc ramener le calcul sur le domaine $\frac{\Lambda}{b} \leq |\vec{q}| \leq \Lambda$, ce qui donne avec $\hat{q} = (\vec{q}, \varpi)$

$$\begin{aligned} a(k) &= \frac{D_0 \lambda^2}{\pi S_d (d-1)} \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda]} d^d \vec{q} P_{lr}(\vec{k}) P_{lmn}(\vec{k}) P_{mrs}(\vec{q} + \frac{1}{2}\vec{k}) P_{ns}(\vec{q} - \frac{1}{2}\vec{k}) \\ &\times |\vec{q} - \frac{1}{2}\vec{k}|^{-y} \int_{\mathbb{R}} d\varpi \frac{1}{\varpi^2 + \nu^2 |\vec{q} - \frac{1}{2}\vec{k}|^4} \cdot \frac{1}{-i\varpi + \nu |\vec{q} + \frac{1}{2}\vec{k}|^2} + \mathcal{O}(k^3) \end{aligned} \quad (14.12)$$

On peut facilement calculer l'intégrale sur les fréquences. On se sert de la relation $P_{lr} P_{lmn} = P_{rmn}$ pour aboutir à

$$\begin{aligned} a(k) &= \frac{D_0 \lambda^2}{\nu^2 S_d (d-1)} \int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda]} d^d \vec{q} P_{rmn}(\vec{k}) P_{mrs}(\vec{q} + \frac{1}{2}\vec{k}) P_{ns}(\vec{q} - \frac{1}{2}\vec{k}) \\ &\times |\vec{q} - \frac{1}{2}\vec{k}|^{-y-2} |\vec{q} + \frac{1}{2}\vec{k}|^{-2} + \mathcal{O}(k^3) \end{aligned} \quad (14.13)$$

On effectue un développement en série de l'intégrand et on utilise les relations suivantes

$$\int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda]} d^d \vec{q} q^{n-2} q_i q_j = \frac{S_d}{d} \Lambda^{n+d} \frac{1-b^{n+d}}{n+d} \delta_{ij} \quad (14.14)$$

$$\int_{[\frac{\Lambda}{b}, \Lambda]} d^d \vec{q} q^{n-4} q_i q_j q_r q_s = \frac{S_d}{d(d+2)} \Lambda^{n+d} \frac{1-b^{n+d}}{n+d} (\delta_{ij} \delta_{rs} + \delta_{ir} \delta_{js} + \delta_{is} \delta_{jr}) \quad (14.15)$$

pour aboutir à l'expression de $a(k)$

$$a(k) = \frac{D_0 \lambda^2 \Lambda^{d-y-4}}{\nu^2} \cdot \frac{d^2 - y - 4}{2d(d+2)} \cdot \frac{1 - b^{-(n+d)}}{n+d} k^2 + \mathcal{O}(k^3) \quad (14.16)$$

Ce terme étant proportionnel à k^2 , donc au laplacien dans l'espace réel, il a pour effet de modifier la viscosité. En suivant [150] on peut évaluer l'accroissement de viscosité si on considère que b est proche de 1, $b = 1 + \delta b$, c'est à dire que la bande de vecteur d'onde que l'on élimine est étroite

$$\delta \nu = \nu \left(\frac{d^2 - y - 4}{2d(d+2)} \bar{\lambda}^2 \delta b + \mathcal{O}(\bar{\lambda}^2) \right) \quad (14.17)$$

Pour donner un sens à la démarche il faudra s'assurer que le paramètre $\bar{\lambda}$ est petit.

14.2.4 Renormalisation des grandeurs

Après élimination, la coupure a été divisée par b , mais pour pouvoir comparer deux équations il est nécessaire de se placer à la même échelle. c'est pour cela qu'il faut renormaliser les grandeurs par un changement d'échelle

$$\omega\left(\frac{\Lambda}{b}\right) \mapsto b^{-z} \omega(\Lambda) \quad (14.18)$$

$$\vec{v}\left(\frac{\Lambda}{b}\right) \mapsto b^\gamma \vec{v}(\Lambda) \quad (14.19)$$

γ et z sont appelées les dimensions anormales respectives de la vitesse et de la fréquence. On va de plus faire une hypothèse très forte et potentiellement criticable. En effet, les dimensions anormales sont liées à la nature du point fixe dans l'espace des paramètres. Les calculs précédents d'élimination ont été développés autour d'une équation de Navier-Stokes où on a considéré que seule la viscosité changeait. On va cependant supposer que la relation (14.2) entre la force stochastique et la vitesse ne changeait pas. On aboutit alors à

$$\vec{f}\left(\frac{\Lambda}{b}\right) \mapsto b^{\gamma-z} \vec{f}(\Lambda) \quad (14.20)$$

$$\nu\left(\frac{\Lambda}{b}\right) \mapsto b^{2-z} \nu(\Lambda) \quad (14.21)$$

Une autre hypothèse forte permettant de faire aboutir les calculs est de supposer que les corrélations du bruit ne sont pas modifiées par renormalisation. On obtient ainsi une relation entre γ et z

$$\gamma = \frac{3}{2}z + \frac{d+y}{2} \quad (14.22)$$

La renormalisation de la viscosité est immédiate et on obtient

$$\delta\nu = (z-2)\nu\delta b \quad (14.23)$$

On peut maintenant étudier le comportement de l'équation sous une transformation d'échelle à l'aide des relations (14.18) à (14.23). L'équation obtenue a la même forme que l'équation originale permettant ainsi d'itérer la procédure

$$v_l(\hat{k}) = g(\hat{k})f_l(\hat{k}) - \frac{i\lambda}{2}b^{\frac{3}{2}z-1-\frac{d-y}{2}}g(\hat{k})P_{lmn}(\vec{k}) \int \frac{d^{d+1}\hat{q}}{(2\pi)^{d+1}}v_m(\hat{k}-\hat{q})v_n(\hat{q}) \quad (14.24)$$

Par contre la procédure de renormalisation modifie le paramètre λ selon

$$\lambda(b\Lambda) \mapsto b^{\frac{3}{2}z-1-\frac{d-y}{2}}\lambda(\Lambda) \quad (14.25)$$

14.2.5 Equations différentielles de renormalisation

Si on considère que δb est infiniment petit, on peut tout de suite écrire une équation différentielle pour la viscosité

$$\frac{d\nu}{db} = \nu(z-2 + B_d\bar{\lambda}^2) + \mathcal{O}(\bar{\lambda}^4) \quad (14.26)$$

où $B_d = \frac{d^2-y-4}{2d(d+2)}$. Puisque le paramètre $\bar{\lambda}$ dépend directement de la viscosité selon (14.4), on peut directement dériver une équation différentielle pour décrire son évolution en fonction du facteur d'élimination b

$$\frac{d\bar{\lambda}}{db} = \frac{\bar{\lambda}}{2}(\epsilon - 3B_d\bar{\lambda}^2) + \mathcal{O}(\bar{\lambda}^4) \quad (14.27)$$

où $\epsilon = y + 4 - d$. Cette équation admet deux points fixes, $\bar{\lambda}_1 = 0$ et $\bar{\lambda}_2 = \sqrt{\frac{\epsilon}{3B_d}}$. dans le cas où $\epsilon < 0$, $\bar{\lambda}_1$ est stable et $\bar{\lambda}_2$ est instable. Ce résultat justifie le calcul de perturbation lors de l'élimination des vecteurs d'onde puisque les termes négligés sont nuls pour de grands facteurs de dilution. Lorsque $\epsilon > 0$ par contre, c'est l'inverse qui se produit $\bar{\lambda}_1$ est instable et $\bar{\lambda}_2$ est stable. Mais dans ce cas, les termes négligés sont proportionnels à différentes puissances de $\bar{\lambda}$ au point fixe et ne seront faibles que si ϵ l'est aussi.

En résolvant simultanément les deux équations différentielles (14.26)(14.27), on trouve une relation liant la dimension anormale de la fréquence aux autres paramètres

$$z = 2 - B_d(\bar{\lambda})^2 \quad (14.28)$$

où $\bar{\lambda}$ est le point fixe stable dépendant de ϵ .

Deux cas se présentent donc

- Si $\epsilon < 0$, alors $\bar{\lambda} = 0$ et $z = 2$
- Si $\epsilon > 0$, alors $\bar{\lambda} = \sqrt{\frac{\epsilon}{3B_d}} \neq 0$ et $z = 2 - \frac{\epsilon}{3}$

La viscosité ayant pour dimension anormale $z - 2$, on a dans le dernier cas

$$\nu \sim \Lambda^{-\frac{\epsilon}{3}} \quad (14.29)$$

Le facteur est obtenu à partir de la définition du paramètre de couplage et de sa valeur au point fixe. On trouve finalement

$$\nu = \left(\frac{3B_d D_0}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{3}} \Lambda^{-\frac{\epsilon}{3}} \quad (14.30)$$

Une relation avait été obtenue par Kraichnan [158, 160] et la puissance était $-\frac{4}{3}$, c'est à dire $\epsilon = 4$, laquelle puissance est encore souvent utilisée dans les simulations numériques et donne des résultats en accord avec l'expérience, même si elle ne peut pas être considérée comme petite et justifier ainsi le développement perturbatif précédent. La viscosité obtenue est bien une viscosité renormalisée et elle est indépendante de k . L'équation de Navier-Stokes écrite dans l'espace réel et amputée de toute dépendance en $k > \Lambda$ par la procédure de renormalisation, présente une forme analogue à l'équation de Navier-Stokes originale où la viscosité moléculaire est remplacée par la viscosité renormalisée.

14.2.6 Spectre d'énergie

Toute cette magnifique artillerie que constitue le groupe de renormalisation n'avait pas pour autres buts que de retrouver au moins le spectre de Kolmogorov et notamment la fameuse loi des $\frac{5}{3}$, autrement dit dans l'espace réel la loi des $\frac{2}{3}$. On va donc calculer le spectre d'énergie après un grand nombre de dilutions des degrés de liberté et lorsque le système se trouve proche de son point fixe. Le spectre d'énergie est donné pour un système homogène par

$$E(k) = \frac{S_d k^{d-1}}{2(2\pi)^d} \int \frac{d^d \omega}{2\pi} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^{d+1}} \langle v_i(\vec{k}) v_i(\vec{q}) \rangle \quad (14.31)$$

On trouve à l'ordre le plus bas en $\bar{\lambda}$

$$E(k) = \frac{S_d k^{d-1}}{2(2\pi)^d} \int \frac{d^d \omega}{2\pi} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^{d+1}} g(\hat{k}) g(\hat{q}) \langle f_i(\vec{k}) f_i(\vec{q}) \rangle \quad (14.32)$$

En utilisant la forme supposée des corrélations de la force stochastique

$$E(k) = \frac{d-1}{2} k^{d-y-3} \frac{D_0}{\nu} \quad (14.33)$$

Si on suppose de plus que tous les vecteurs d'onde supérieurs à k ont été éliminés, c'est à dire que $\Lambda \simeq k$, on obtient d'après (14.30)

$$\nu(k) = \left(\frac{3B_d D_0}{\epsilon} \right)^{\frac{1}{3}} k^{-\frac{\epsilon}{3}} \quad (14.34)$$

et

$$E(k) = \frac{d-1}{2} \left(\frac{\epsilon D_0^2}{3B_d} \right)^{\frac{1}{3}} k^{1-2\frac{\epsilon}{3}} \quad (14.35)$$

La viscosité obtenue est une viscosité dite effective. Elle est ressentie par les structures de nombre d'onde k et ne dépend pas de la coupure Λ , car ce dernier n'est qu'un moyen de traiter une équation de Navier-Stokes avec moins de degrés de liberté. Une structure donnée est diffusée par les structures plus petites, et est convectée par les plus grandes. La viscosité effective agissant sur le nombre d'onde k devient la viscosité renormalisée lorsque la coupure est égale à ce nombre d'onde. Dans ce cas, en effet, toutes les interactions créant une diffusion se retrouvent dans les coefficients de transport.

Une relation à ϵ fixé et souvent utilisée dans les simulations numériques est

$$\frac{E(k)}{\nu^2(k)} \sim k \quad (14.36)$$

Le spectre de Kolmogorov est retrouvé pour $\epsilon = 4$, c'est à dire $y = d$.

Chapitre 15

Contributions de la TFDC à l'hydrodynamique

On a vu au chapitre précédent que l'utilisation du Groupe de Renormalisation par les hydrodynamiciens pour traiter l'équation de Navier-Stokes et essayer de retrouver les lois d'échelle de la turbulence était incohérente sur un grand nombre d'aspects. On se propose ici de développer une procédure beaucoup plus orthodoxe du point de vue de la Théorie du Groupe de Renormalisation. Elle fait appel à la Théorie de la Fonctionnelle de Densité de Courant (TDFC) et permet d'envisager de traiter la turbulence de manière beaucoup plus systématique.

15.1 Problématique

Les équations du mouvement en hydrodynamique sont obtenues dans la limite de faibles et lentes déviations par rapport à l'équilibre [147]. Il est particulièrement difficile de construire une approche systématique pour trouver les équations du mouvement susceptibles de prendre en compte les grandes amplitudes (petites longueurs d'onde) des modes hydrodynamiques en raison de la nature phénoménologique de la dérivation des dites équations. Dans le cas d'écoulements laminaires, ces limitations ne sont pas bloquantes et on peut obtenir des résultats simples et précis en accord avec les expériences. Cela peut paraître toutefois suprenant en regard de la nature approximative des équations mais peut être aisément compris en raison de la séparation des échelles de temps et d'espace. Ces dernières, lorsqu'on les considère pour la dynamique entre particules à l'échelle microscopique, sont bien plus petites que celles des modes hydrodynamiques, rendant ainsi les approximations utilisées tout à fait justifiées et ce, même pour des larges amplitudes, c'est à dire de larges écarts dans les vitesses.

La puissance prédictive des équations hydrodynamiques est sérieusement limitée lorsque l'on considère un phénomène critique, en l'occurrence le cas de la turbulence. Dans ce type de phénomène, un grand nombre de modes appartenant à une large gamme d'échelles de temps et d'espace, sont à prendre en compte et la validité des approximations éventuellement utilisées pour dériver les équations du mouvement

n'est plus vraiment justifiable.

La méthode du Groupe de Renormalisation est une méthode systématique pour traiter ce genre de problème [163], où il s'agit de comprendre comment les petites échelles peuvent donner naissance à des grandes échelles à des théories phénoménologiques.

Le concept d'universalité est conçu dans ce contexte pour expliquer pourquoi une famille de paramètres microscopiques relevant peuvent influencer des phénomènes à grande échelle. La clef est encore dans la séparation des échelles qui fournit un mécanisme de suppression de la sensibilité des phénomènes à grande échelle à une grande classe de paramètres microscopiques dits irrelevants. L'objectif avoué de ce travail est de fournir un moyen de construire les équations hydrodynamiques du mouvement en commençant au niveau microscopique dans le cadre d'une Théorie Quantique de Champ et d'arriver ainsi à la généralisation systématique des équations de Navier-Stokes, ce qui permettrait par la suite d'appliquer des approximations non-perturbatives, telles que la méthode de groupe de renormalisation. Les détails de l'application de la méthode de groupe de renormalisation sont reportés pour de futures publications. Une dérivation systématique de l'équation hydrodynamique à partir des principes microscopiques doit résoudre deux difficiles problèmes physiques et mathématiques, tous deux liés aux processus dispersifs. Dans une description microscopique quantique, le système devrait être fermé, ce qui rend la description des processus dispersifs difficile. Ce problème est évité dans le travail actuel en représentant les degrés de liberté participant aux processus dispersifs d'une façon phénoménologique qui la rend contrôlable et peut facilement être remplacée par la description correcte au prix d'avoir un formalisme plus compliqué. En particulier, les processus dispersifs produits par un thermostat ou par le désordre microscopique aux frontières seront pris en considération dans le travail actuel en utilisant un temps de vie fini, τ_{micr} , pour des excitations élémentaires. Ce nouveau paramètre sera maintenu libre, phénoménologique ici mais comme mentionné ci-dessus, il peut être en principe obtenu à partir des descriptions microscopiques conformément à [164] et [165]. Un autre problème relatif est que les équations du mouvement dérivées du système fermé résultent d'un principe variationnel où il est notoirement difficile de représenter les forces dispersives. En fait, le problème de représentation du frottement est un problème bien connu en mécanique lagrangienne où on assimile la particule à un point. La situation est différente en hydrodynamique eulérienne où la variable de base est la vitesse plutôt que la coordonnée. Il n'est alors pas difficile de dériver les forces visqueuses à partir d'un principe de moindre action puisqu'elles sont quadratiques dans les dérivées. Le véritable problème apparaît quand on cherche les puissances impaires des dérivées, c'est à dire la partie de l'accélération qui correspond à un terme de surface dans l'action intégrale et qui ne donne aucune contribution à l'équation d'Euler-Lagrange. Il y a des solutions alternatives [166] mais dont l'origine est plutôt artificielle et leur origine physique n'est pas toujours bien démontrée [167]. L'action est toujours bien déterminée dès qu'une description microscopique est appliquée. Dans notre cas c'est l'action effective pour la densité et les opérateurs courants, tronquée par un développement du gradient. Les processus dispersifs, représentés par le temps de vie fini des excitations élémentaires, produisent de nouveaux termes pour l'énergie dans la relation de dispersion extraite à partir de la partie quadratique de l'action

effective, ce qui nous amène à éviter des dérivées premières dans les équations d'Euler-Lagrange. Nous suggérons donc le remplacement de la dérivée spatio-temporelle ∂_μ par sa version symétrisée, $\sqrt{\partial_\mu^2}$ dans le lagrangien. Un tel procédé est consistant avec le fait que la perte d'invariance par inversion de temps devrait avoir lieu sans avoir des termes de brisure de symétrie explicites au niveau microscopique. Une telle brisure spontanée de symétrie a été déjà employée pour obtenir des processus dispersifs, en particulier la conductivité, au moyen de l'action effective [165]. L'équation du mouvement obtenue à partir de l'action effective caractérise la dynamique des excitations bosoniques les plus importantes, celles de la densité et du courant, à l'échelle de la coupure UV utilisée en obtenant l'action. Afin de transformer ces équations en les vraies équations hydrodynamiques, la valeur originale de la coupure devrait être déplacée de l'échelle microscopique, subatomique, vers le régime hydrodynamique au moyen de la méthode du groupe de renormalisation. On a fait un raccourci par simplicité et on présente la partie quadratique de l'action effective à l'ordre principal du développement en boucles en plaçant naïvement la coupure dans le régime hydrodynamique, et en ignorant l'évolution produite par les équations finales du groupe de renormalisation. L'équation du mouvement pour le courant, considérée au principal ordre dans la déviation des valeurs moyennes de l'état fondamental reproduit l'équation de Navier-Stokes. Les résultats du développement en boucle à l'ordre principal pour les coefficients de viscosité de cisaillement et de viscosité de volume sont présentés. La pression provient du multiplicateur de Lagrange utilisé pour maintenir l'équation de continuité. L'équation du mouvement pour la densité peut formellement être interprétée comme une équation constitutive. La détermination microscopique des paramètres hydrodynamiques par des fonctions de Green a une longue histoire [168]. Le procédé présenté dans ce chapitre devrait apporter une manière plus systématique de dériver les équations hydrodynamiques du mouvement parce que l'évolution produite par l'utilisation du groupe de renormalisation et les corrections d'ordre supérieurs dans le développement du gradient et dans la déviation des valeurs moyennes dans l'état fondamental sont prises en considération.

Le chapitre est organisé de la façon suivante. Le hamiltonien microscopique est présenté dans la section (15.2), l'action effective pour la densité et le courant en (15.3). Elle est donnée formellement pour les particules non-interagissantes jusqu'à l'ordre à trois boucles dans les statistiques d'échange. L'interaction à deux corps est traitée au niveau d'une boucle. L'action effective est plus utile en l'absence d'interactions à grande échelle. Les forces dispersives sont censées réduire les corrélations à grande échelle dues aux statistiques d'échange et de rendre ainsi l'action effective locale. Cette manière phénoménologique de tenir compte de la dissipation due au thermostat est présentée dans la section (15.3), et est suivie de l'introduction du développement du gradient, travaillée particulièrement afin de maintenir les termes non-analytiques dans l'énergie ou dans les moments produits par dissipation. Ces dépendances non-analytiques sont en partie plaidées à un niveau qualitatif en exploitant des analogies formelles entre le traitement en champ moyen de la brisure spontanée de l'invariance par inversion en temps et sont en partie extraite à partir de la densité à une boucle et de la fonction courant à deux points. La section (15.4) présente la densité du lagrangien effectif résultant de l'action effective locale dans

le cadre du double développement de Ginzburg-Landau, par la troncation dans les fluctuations et dans les gradients d'espace-temps. Ce lagrangien n'est pas entièrement local, les forces dispersives introduisent des processus non-locaux jusqu'à des distances de l'ordre du libre parcours moyen. Le traitement phénoménologique de la dissipation, à savoir la présence du thermostat, produit des contributions imaginaires à l'action effective. Celles-ci ne sont pas prises en considération dans l'équation du mouvement puisqu'elles correspondent au "leakage" de l'état quantique et devraient être éliminées en incluant les degrés de liberté du thermostat dans la description comme mentionné ci-dessus. Différentes caractéristiques de l'équation du mouvement sont discutées dans la section (15.5). La forme invariante par transformation galiléenne des équations est d'abord présentée en prolongeant le calcul variationnel pour la dérivée convective. L'équation de continuité est ensuite abordée et on propose que l'équation du mouvement pour la densité soit interprétée comme équation constitutive. La brisure spontanée de l'invariance par inversion de temps est décrite pour l'équation du mouvement du premier ordre et est discutée avec la dérivée temporelle symétrisée. L'identification des degrés de liberté régis par l'équation du mouvement termine cette section. L'équation du mouvement à l'ordre le plus élevé pour la vitesse est présentée dans la section (15.6). et ses termes sont comparés au Navier-Stokes. La section (15.7). inclut les résultats et une courte liste de questions encore en suspens. Il y a un certain nombre d'annexes supplémentaires où les aspects techniques et formels des calculs sont discutés. Les notations sont récapitulées dans l'annexe (A). La dérivation symétrisée est explicitée en annexe (B). On donne le détail des calculs quelque peu fastidieux des coefficients de développement fonctionnels de la source σ et de l'action effective Γ dans l'annexe (C). L'annexe (D) montre les premiers ordres du développement double de Ginzburg-Landau pour la densité lagrangienne effective. Les équations correspondantes du mouvement sont dérivées dans l'annexe (D.2). Les expressions du calcul à une boucle de la partie quadratique de l'action effective dans la densité et le courant sont rassemblées en annexe (D.3).

15.2 Modèle

On considère le modèle le plus simple de fluide, en l'occurrence un système atomique ou moléculaire équivalent, où les interactions sont prises en compte par un potentiel à deux corps $U_{x,x'}$. L'objectif est d'étudier les basses énergies, les excitations à longue portée dues à la conservation du nombre de particules. On suppose que la structure interne des atomes ou des molécules, dénommées désormais particules, est gelée dans ce régime énergétique.

L'hamiltonien est supposé être la somme de trois termes, $H = H_k + H_i + H_r$ où

$$\begin{aligned} H_k &= \int_x \psi_x^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \mu \right) \psi_x, \\ H_i &= \int_x V_x \psi_x^\dagger \psi_x + \frac{1}{2} \int_{x,x'} \psi_{x'}^\dagger \psi_{x'} U_{x',x} \psi_x^\dagger \psi_x, \end{aligned} \tag{15.1}$$

On renvoie à l'appendix (A) pour un résumé des notations. Le potentiel chimique μ est introduit afin de rendre le système à densité finie. Le spin est explicitement ignoré et n'est pris en compte qu'au travers de la statistique, c'est à dire que les opérateurs de champ ψ_x doivent satisfaire les relations de commutation et d'anti-commutation canoniques. L'hamiltonien d'interaction, H_i , inclut des termes de forces à un corps et à deux corps. L'hamiltonien H_r est responsable des interactions avec l'environnement et contient des termes d'interactions à plus de deux corps. Il est localisé en espace-temps pour les conditions initiales et les conditions aux limites. Il brise l'invariance par translation et représente le désordre à un niveau microscopique. Bien que l'impact de telles interactions peut être facilement incorporées dans la description [165], cette issue sera ignorée dans le travail actuel par raison de simplicité. La partie à plus de deux corps de H_r représente le couplage au thermostat, réalisé par la composante transverse du champ électromagnétique et par d'autres degrés de liberté situés sur la frontière spatiale. Ils seront ignorés ci-dessous excepté dans la section (15.3) où un argument qualitatif basé sur ces interactions est présenté. La charge et les opérateurs de courant sont couplés aux sources σ ,

$$\begin{aligned}\psi^\dagger \cdot \phi \cdot \psi &= \psi^\dagger \cdot \sigma_0 \cdot \mathcal{O}_0 \cdot \psi + \psi^\dagger \cdot \sigma_j \cdot \mathcal{O}_j \cdot \psi, \\ \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{0,x} \cdot \psi &= \psi_x^\dagger \psi_x, \\ \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{j,x} \cdot \psi &= \frac{i\hbar}{2ma} [\partial_j \psi_x^\dagger \psi_x - \psi_x^\dagger \partial_j \psi_x].\end{aligned}\tag{15.2}$$

La représentation de la fonctionnelle génératrice des fonctions de Green connexes, $W[\sigma]$, pour la densité et les opérateurs de courants peut s'écrire

$$e^{\frac{i}{\hbar}W[\sigma]} = \int \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\psi^\dagger] \mathcal{D}[u] e^{\frac{i}{\hbar} \psi^\dagger \cdot (G^{-1} - u - V + \phi) \cdot \psi - \frac{i}{2\hbar} u \cdot U^{-1} \cdot u},\tag{15.3}$$

avec

$$S[\psi^\dagger, \psi, u] = \int_x \psi_x^\dagger \left[i\hbar \partial_t - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu - V_x - u_x \right] \psi_x - \frac{1}{2} \int_{x,y} u_x U_{x,y}^{-1} u_y,\tag{15.4}$$

après l'introduction d'un champ auxiliaire u_x où

$$\int_z U_{x,z} U_{z,y}^{-1} = \delta_{x,y}.\tag{15.5}$$

La variable de champ ψ_x est un nombre complexe ou grassmanien respectivement pour les particules de spins entiers ou demi-entiers. Remarquons que u_x joue formellement le rôle de composante temporelle du champ de photon, $u = A_0$, quand on prend en

compte l'interaction coulombienne. Il est facile de vérifier que le champ auxiliaire nécessaire pour "maquiller" la totalité des interactions électromagnétiques entre les charges portera le potentiel-vecteur A_μ avec l'action de Maxwell usuelle.

Le type d'interactions considérées ici ne peut être traité de manière consistante à des échelles arbitrairement courtes, autrement dit, la théorie non-relativiste que nous considérons n'est pas renormalisable. La régularisation la plus simple est la coupure dans l'espace des impulsions puisqu'elle préserve les symétries globales, en particulier elle conserve le courant électromagnétique, confère (15.15) ci-dessous. La conservation du courant est la première équation dans la hiérarchie des identités de Ward, caractérisant par là les théories de jauge. Les identités à des ordres élevés et violées par la coupure dans l'espace des impulsions peuvent être préservées de manière non-perturbative en utilisant seulement une régularisation du réseau. Puisque nous ne sommes pas en train de traiter les modes transverses du champ électromagnétique de manière dynamique dans notre modèle, on se contentera d'une coupure dans l'espace des impulsions.

Il est pertinent de mettre en avant un problème lié à la coupure, en l'occurrence la perte d'invariance galiléenne. En fait, la coupure dans l'espace des moments viole l'invariance du "boost" galiléen

$$x \rightarrow x + tu, \quad j \rightarrow j + \rho_0 u \quad (15.6)$$

Ce n'est pas évident du tout si on construit un régulateur invariant par "boost" puisque les "boosts" représentent un groupe de symétrie de volume infini. En travaillant avec la coupure dans l'espace des moments, on reporte ce problème à de futurs travaux, où l'on imposera l'invariance par "boost" d'une manière empirique en supprimant explicitement les contributions non-invariantes et en retenant les contributions invariantes comme indiqué dans la section (15.4.4). Bien que la fonctionnelle génératrice $W[\sigma]$ contienne entièrement la physique du modèle, il n'est pas nécessaire qu'elle soit non-locale. La fonctionnelle de densité de courant est alors introduite comme la transformée de Legendre de $W[\sigma]$,

$$\Gamma[\rho] = -W[\sigma] + \sigma_{\tilde{a}} \cdot \rho_{\tilde{a}}, \quad \rho_{\tilde{a}} = \frac{\delta W[\sigma]}{\delta \sigma_{\tilde{a}}}, \quad (15.7)$$

où on définit l'indice de bloc $\tilde{a} = (a, x)$. La transformation inverse est similaire à (15.7) mis à part la seconde équation qui est remplacée par

$$\sigma_{\tilde{a}} = \frac{\delta \Gamma[\rho]}{\delta \rho_{\tilde{a}}}. \quad (15.8)$$

Une importante relation qui sera utilisée par la suite

$$\frac{\delta^2 \Gamma[\rho]}{\delta \rho \delta \rho} \cdot \frac{\delta^2 W[\sigma]}{\delta \sigma \delta \sigma} = \mathbb{I} \quad (15.9)$$

et qui peut être obtenue en prenant la dérivée fonctionnelle seconde de la première équation dans (15.7). On utilisera souvent la notation $\rho_0 = n$, $\rho_\ell = j_\ell = nv_\ell$ dans la plupart des expressions qui suivront. La fonctionnelle génératrice des vertex $\Gamma_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n}$ sera définie par les coefficients du développement de Taylor fonctionnel autour d'une configuration extrême, $\rho_{a,x}^*$,

$$\Gamma[\rho] = \Gamma_0 + \sum_{n=2}^{\infty} \int_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} \frac{1}{n!} \Gamma_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} (\rho - \rho^*)_{\tilde{a}_1} \cdots (\rho - \rho^*)_{\tilde{a}_n}. \quad (15.10)$$

Une fonctionnelle $F[\rho]$ sera qualifiée de locale si la corrélation explicite entre ses variables indépendantes a un support fini, c'est à dire

$$\frac{\delta^2 F[\rho]}{\delta \rho_{a,x} \delta \rho_{b,y}} = 0 \quad (15.11)$$

si $|x^0 - y^0| > \tau_0$ ou $|x - y| > \ell_0$. On justifiera ci-dessous, dans la section (15.4), que $\Gamma[\rho]$ qui nous permet d'obtenir les équation hydrodynamiques du mouvement est en fait local, τ_0 est le temps microscopique de relaxation $\tau_0 = \tau_{micr}$, et $\ell_0 = \tau_{micr} v_F$ où v_F est la vitesse de Fermi. La fonctionnelle où $\tau_0 = \ell_0 = 0$ est qualifiée d'ultra-locale. L'action effective $\Gamma[\rho]$ vérifie un nombre important de symétries. Mis à part les symétries bien connues comme les symétries de translation en espace-temps et de rotation en espace, l'invariance sous "boost" galiléen est très importante car elle fait appel à une transformation non-triviale de la variable ρ_μ . On sera particulièrement intéressé dans ce travail par des configurations extrêmes ρ^* . Les "boosts" galiléen transforment une configuration extrême en une autre et les équations du mouvement, un ensemble d'équations différentielles dérivées ci-dessous, doivent être invariantes sous des "boosts" galiléens. La dérivée en temps dans l'équation du mouvement transforme comme

$$\partial_0 \rightarrow \partial_0 - u \cdot \nabla \quad (15.12)$$

Il est avantageux d'utiliser la dérivée convective qui elle est invariante sous "boosts"

$$D = \partial_0 + v \cdot \nabla \quad (15.13)$$

dans les équations du mouvement. Une autre symétrie, plus discrète en hydrodynamique, est l'invariance sous renversement du temps. L'hamiltonien microscopique, $H = H_k + H_i + H_r$, est formellement invariant sous renversement du temps mais cette symétrie peut être perdue au niveau de l'action effective. Cette possibilité sera

discutée en détail dans la section (15.4.3). Enfin, on mentionne le fait que la fonctionnelle $W[\sigma]$ vérifie l'invariance de jauge. Elle reste invariante sous la transformation $\sigma_{(\mu,x)} \rightarrow \sigma_{(\mu,x)} + \partial_\mu \Phi_x$, comme un résultat intermédiaire de la conservation du courant. Il est utile de scinder les champs de vecteurs en somme de composantes transverses invariantes de jauge et en composantes longitudinales dépendantes de la jauge $\sigma_\mu = \sigma_\mu^{(tr)} + \sigma_\mu^{(\ell)}$ et $\rho_\mu = \rho_\mu^{(tr)} + \rho_\mu^{(\ell)}$, où $\partial_\mu \sigma_\mu^{(tr)} = \partial_\mu \rho_\mu^{(tr)} = 0$, $\sigma_\mu^{(\ell)} = \partial_\mu \alpha$ et $\rho_\mu^{(\ell)} = \partial_\mu \beta$. La transformation de Legendre de la fonctionnelle invariante de jauge $W[\sigma^{(tr)}]$, (15.7) se fait comme

$$\Gamma[\rho^{(tr)} + \rho^{(\ell)}] = -W[\sigma^{(tr)}] + \sigma_{\tilde{a}}^{(tr)} \cdot \rho_{\tilde{a}}^{(tr)} + \sigma_{\tilde{a}}^{(\ell)} \cdot \rho_{\tilde{a}}^{(\ell)}, \quad \rho_{\tilde{a}}^{(tr)} = \frac{\delta W[\sigma^{(tr)}]}{\delta \sigma_{\tilde{a}}^{(tr)}}, \quad (15.14)$$

et $\rho^{(\ell)} = 0$. Ainsi, la variable de l'action effective est contrainte par l'équation de continuité

$$\partial_0 \rho_0 + \partial_j \rho_j = 0. \quad (15.15)$$

15.3 Action effective

Après avoir présenté le modèle, on s'intéresse maintenant à l'action effective dans l'équation (15.7) et on montre comment l'obtenir de manière systématique en l'absence ou en la présence d'interactions à deux corps.

15.3.1 Particules non-interagissantes

On se place dans le cas le plus simple, celui où les particules sont non-interagissantes et les corrélations dans la densité et le courant apparaissent uniquement en raison de la statistique d'échange. L'intégrale gaussienne est triviale dans (15.3),

$$W_{ni}[\sigma] = -i\hbar \text{Tr} \log[G^{-1} + \phi] = -i\hbar \text{Tr} \log G^{-1} + i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n, \quad (15.16)$$

où les constitutants élémentaires sont supposés être des fermions. Dans le cas de bosons, la fonctionnelle génératrice peut être obtenue au moyen d'un changement total du signe $W_{ni \text{ bos}}[\sigma] = -W_{ni \text{ ferm}}[\sigma]$.

Le changement de variable dans la transformation de Legendre est réalisé en inversant la relation

$$\rho_{\tilde{a}} = -i\hbar \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}]. \quad (15.17)$$

A cette fin, on introduit le propagateur particule-trou

$$\tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{b}} = -i\hbar \text{Tr}[G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}} \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{b}}] \quad (15.18)$$

et on cherche une inversion ayant la forme d'une série en puissance de fonctionnelles dans $r = \tilde{G}^{-1} \cdot (\rho - \rho^*)$,

$$\sigma_{\tilde{a}} = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} \frac{1}{n!} A_{\tilde{a}, \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} r_{\tilde{a}_1} \cdots r_{\tilde{a}_n}. \quad (15.19)$$

En insérant (C.16) dans (C.14)

$$\rho_{\tilde{a}} = \int_{\tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{b}} r_{\tilde{b}} + \rho_{\tilde{a}}^* = i\hbar \nu \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \quad (15.20)$$

L'identification des coefficients des différentes puissances de r des deux côtés de (C.14) est effectuée dans l'annexe (C.2.1) et amène à

$$\begin{aligned} \rho_{\tilde{a}}^* &= -i\hbar \text{Tr}[G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \\ A_{\tilde{c},\tilde{d}} &= -\delta_{\tilde{c},\tilde{d}} \\ A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} &= 2 \cdot \int_{\tilde{a}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{a}}^{-1} S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \\ A_{\tilde{b},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} &= \int_{\tilde{a}} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{a}}^{-1} \left(3! S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} - 4 \int_{\tilde{c},\tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{d}}^{-1} (S_{\tilde{d},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha}} + S_{\tilde{d},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\beta}} + S_{\tilde{d},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\gamma}}) \right) \\ A_{\tilde{b},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} &= \int_{\tilde{a}} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{a}}^{-1} \left(4! S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} - 3! \cdot \int_{\tilde{c}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} A_{\tilde{c},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} A_{\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\delta}} A_{\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} \right. \\ &\quad + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \\ &\quad + 4 \cdot \int_{\tilde{c},\tilde{d}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{d}} (A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} A_{\tilde{d},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} A_{\tilde{d},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} + A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\delta}} A_{\tilde{d},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}}) \\ &\quad \left. - 2 \cdot \int_{\tilde{c}} S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{\beta},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{\gamma},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{\delta},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} \right) \end{aligned} \quad (15.21)$$

avec

$$S_{\tilde{a},\tilde{a}_1,\tilde{a}_2,\dots,\tilde{a}_n} = -\frac{i\hbar}{n!} \sum_{P \in S_n} \text{Tr}(G \mathcal{O}_{\tilde{a}_{P(1)}} G \mathcal{O}_{\tilde{a}_{P(2)}} \cdots G \mathcal{O}_{\tilde{a}_{P(n)}} G \mathcal{O}_{\tilde{a}}), \quad (15.22)$$

où la somme s'étend sur toutes les permutations des n indices. On écrit finalement l'action effective au moyen de (15.7) et (15.16) comme

$$\Gamma_{ni}[\rho] = i\hbar \text{Tr} \log G^{-1} - i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n + \sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} \quad (15.23)$$

et les fonctions des coefficients de l'ansatz (15.10) pour l'action effective sont identifiées en comparant les coefficients des puissances identiques en r dans (15.23). Un calcul long mais direct amène à

$$\begin{aligned}
\Gamma_0 &= i\hbar \text{Tr} \log G^{-1} \\
\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b}} &= \tilde{G}_{\tilde{a}\tilde{b}}^{-1} \\
\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} &= -2\tilde{S}_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} \\
\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c},\tilde{d}} &= 2 \cdot 3! \tilde{S}_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c},\tilde{d}} - 8 \cdot \int_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma},\tilde{\delta},\tilde{e},\tilde{f}} \tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{\alpha}}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{\beta}}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{\gamma}}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{d},\tilde{\delta}}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{b}}^{-1} (S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} S_{\tilde{b},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{e},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} S_{\tilde{f},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} \\
&\quad + S_{\tilde{e},\tilde{\alpha},\tilde{\delta}} S_{\tilde{f},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}})
\end{aligned} \tag{15.24}$$

avec

$$\tilde{S}_{\tilde{a}_1,\tilde{a}_2,\dots,\tilde{a}_n} = \int_{\tilde{b}_1,\tilde{b}_2,\dots,\tilde{b}_n} \tilde{G}_{\tilde{b}_1,\tilde{a}_1}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{b}_2,\tilde{a}_2}^{-1} \dots \tilde{G}_{\tilde{b}_n,\tilde{a}_n}^{-1} S_{\tilde{b}_1,\tilde{b}_2,\dots,\tilde{b}_n} \tag{15.25}$$

On renvoie à l'annexe (C.2.2) pour plus de détails.

Remarque 15.3.1 *Remarquons que l'action effective contient une infinité de vertex même en l'absence d'interactions. Ces vertex représentent des corrélations à longue portée induites par l'(anti-)symétrisation des états physiques par rapport à l'échange de particules identiques.*

15.3.2 Particules interagissantes

Les interactions à deux corps induisent une autre série de vertex dans l'action effective qui est habituellement construite dans le cadre d'expansion en boucles ou de développement perturbatif. Les méthodes non-perturbatives sont disponibles bien entendu, comme la TFD phénoménologique [25], ou la méthode du Groupe de Renormalisation Fonctionnelle [174]. On présente brièvement dans cette section la forme à une boucle de la fonctionnelle génératrice $W[\sigma]$ uniquement pour les fermions.

L'intégration sur le champ fermionique peut être effectuée aisément dans (15.3) et on obtient le résultat suivant

$$e^{\frac{i}{\hbar}W[\sigma]} = \int \mathcal{D}[u] e^{\text{Tr} \log[G^{-u+\not{\sigma}}]^{-1} - \frac{i}{2\hbar} u \cdot U^{-1} \cdot u} \tag{15.26}$$

ce qui peut être écrit comme

$$e^{\frac{i}{\hbar}W[\sigma]} = e^{\text{Tr} \log[G^{-1+\not{\sigma}}]} \int \mathcal{D}[u] e^{-\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \text{Tr}[G^{(\sigma)} \cdot u]^n - \frac{i}{2\hbar} u \cdot U^{-1} \cdot u} \tag{15.27}$$

où $G^{(\sigma)^{-1}} = G^{-1} + \phi$. L'approximation à une boucle consiste à traiter les modes indépendants des autres dans la dernière intégrale fonctionnelle par une troncature de l'action à l'ordre $\mathcal{O}(u^2)$,

$$e^{\frac{i}{\hbar}W[\sigma]} = e^{\frac{i}{\hbar}W_{ni}[\sigma]} \int \mathcal{D}[u] e^{-\frac{i}{\hbar}\rho^{*(\sigma)} \cdot u - \frac{i}{2\hbar}u \cdot (\tilde{G}^{(\sigma)} + U^{-1}) \cdot u + \mathcal{O}(u^3)} \quad (15.28)$$

où

$$\rho_x^{*(\sigma)} = -i\hbar G_{x,x}^{(\sigma)}, \quad (15.29)$$

et

$$\tilde{G}_{x,y}^{(\sigma)} = -i\hbar G_{y,x}^{(\sigma)} G_{x,y}^{(\sigma)}. \quad (15.30)$$

L'intégrale gaussienne sur u_x donne

$$\begin{aligned} W[\sigma] &= W_{ni}[\sigma] + \frac{1}{2}\rho^{*(\sigma)} \cdot \frac{1}{\tilde{G}^{(0)} + \phi + U^{-1}} \cdot \rho^{*(\sigma)} + \mathcal{O}(\hbar^3) \\ &= -i\hbar \text{Tr} \log G^{-1} + i\hbar \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n \\ &\quad - \hbar^2 \sum_{k,\ell,m=0}^{\infty} (-1)^{k+\ell+m} \int_{a,b} [G \cdot (\phi \cdot G)^k]_{a,a} [\tilde{G}^{(U)} \cdot (\phi \cdot \tilde{G}^{(U)})^\ell]_{a,b} [G \cdot (\phi \cdot G)^m]_{b,b} \\ &\quad + \mathcal{O}(\hbar^3) \end{aligned} \quad (15.31)$$

où

$$\tilde{G}^{(U)} = \frac{1}{\tilde{G}^{(0)} + U^{-1}} \quad (15.32)$$

est le propagateur re-sommé à une boucle pour le champ u contenant la polarisation $\tilde{G}^{(0)}$ comme self-énergie. La contribution ayant l'air plutôt compliquée dans (15.31) peut être facilement interprétée comme une resommation partielle du développement perturbatif dans U^{-1} . Puisque les interactions seront traitées d'une manière phénoménologique et simple par la suite, l'expression (15.31) ne sert qu'à démontrer que l'ansatz (15.10) pour l'action effective reste valide tant que les interactions sont traitées perturbativement. L'action effective est alors construite ordre par ordre dans la section (15.3.1) en remplaçant la fonctionnelle génératrice (15.16) par (15.31).

15.4 Lagrangien effectif

Un des avantages du formalisme basé sur l'action effective est la réintroduction de principes d'actions extrémales. En fait, on suppose qu'on prépare une source externe σ mise en action adiabatiquement depuis $\sigma_{t=-\infty} = 0$ qui s'annule pour $t > 0$ et mène le système dans un état fondamental pour des conditions initiales données pour la densité et le courant. En raison de (C.12), les valeurs moyennes de ces dernières, ρ^* forment une configuration stationnaire de l'action effective pour $t > 0$ et satisfont l'équation du mouvement

$$\frac{\delta\Gamma[\rho]}{\delta\rho} = 0. \quad (15.33)$$

15.4.1 Forces dissipatives

Le problème habituel nous empêchant d'accomplir cette démarche dans le contexte d'équations hydrodynamiques phénoménologiques est lié aux processus dissipatifs. En fait, c'est un problème ancien que de tenter de représenter les forces dissipatives dans le cadre de principes variationnels en mécanique. Le transfert de l'énergie mécanique vers l'environnement, vers le bain ou vers le désordre au bord du domaine, maintient le système ouvert et empêche d'introduire un lagrangien et le principe de moindre action. Peut-on éviter ce problème pour l'action effective ? D'un autre côté, le traitement phénoménologique de l'environnement maintient le système ouvert et le problème semble subsister. Mais d'un côté, l'action effective est assez adaptée pour établir la validité de (15.33) si l'environnement est correctement pris en compte. Afin de mieux comprendre ce point, on suppose que l'environnement peut être pris en compte en introduisant des degrés de liberté additionnel, dénoté par Φ , dans l'action effective $\Gamma[\rho] \rightarrow \Gamma[\rho, \Phi]$. Alors, cette action étendue pourrait donner les équations du mouvement correctes

$$\frac{\delta\Gamma[\rho, \Phi]}{\delta\rho} = 0, \quad \frac{\delta\Gamma[\rho, \Phi]}{\delta\Phi} = 0. \quad (15.34)$$

En résolvant la seconde équation, on peut en principe éliminer Φ et l'équation du mouvement pour ρ seulement peut être obtenue à partir de la fonctionnelle $\Gamma[\rho, \Phi[\rho]]$. L'incorporation correcte de l'environnement mentionné ci-dessous est la supposition que l'action effective $\Gamma[\rho, \Phi[\rho]]$ reste locale en ρ . On propose maintenant un traitement phénoménologique des interactions avec l'environnement qui puisse rendre la fonctionnelle $\Gamma[\rho, \Phi[\rho]]$ locale. Cette approximation réalisera la description hydrodynamique et introduira une densité lagrangienne effective.

Notre action effective est valide dans une certaine gamme d'échelles de longueur et de temps, allant de la coupure UV en temps et en espace, respectivement τ_0 et ℓ_0 , jusqu'à l'infini. La coupure spatiale, ℓ_0 est toujours présente en raison des divergences UV et $\tau_0 \approx \ell_0/v_F$ est produit dynamiquement. L'application de la stratégie

du groupe de renormalisation à l'intégrale de chemin (15.3) autorise à changer la coupure librement. Supposons que le système est un liquide de Fermi, c'est à dire perturbatif à température nulle et l'action effective $\Gamma[\rho, \Phi]$ correspond à $\tau_0 > \tau_{micr}$ et $\ell_0 > \tau_{micr} v_F$. Alors les processus de relaxation microscopique ne sont plus pris en compte et il est alors possible de représenter les interactions perturbatives des constituants élémentaires entre eux et avec l'environnement dans $\Gamma[\rho, \Phi[\rho]]$ de manière phénoménologique, en ne gardant que l'action effective non-interagissante pour les constituants élémentaires avec des paramètres renormalisés comme la masse, le temps de vie fini, $\tau \approx \tau_{micr}$. Le temps de vie fini du aux interactions avec l'environnement peut provenir du désordre aux frontières du domaine, le terme à un corps de H_r ou de l'interaction avec le thermostat, représenté par le terme à N-corps de H_r , introduit en section (15.2). L'approximation consiste alors à utiliser l'action effective non-interactive, $\Gamma[\rho] \rightarrow \Gamma_{ni}[\rho]$, avec une coupure choisie dans le régime hydrodynamique et un propagateur fermionique causal

$$G_{\omega,p}^{-1} \rightarrow G_{\omega,p}^{-1} - \text{sign}(\Im m \omega) \gamma, \quad (15.35)$$

où $\tau = 1/\gamma$. Le calcul de $\mathcal{O}((\rho - \rho^*)^2)$ élément de l'action effective est donné dans l'appendice (D.3). Le temps de vie fini des excitations limite la partie non-locale de l'action effective, ce qui suggère l'application du développement en gradient de l'action effective. On verra plus bas que l'action effective (15.10) peut être écrite comme une intégrale spatio-temporelle d'une densité lagrangienne dans le cadre du développement en gradient. Tant que les interactions et les corrélations portent sur de courtes distances, le lagrangien effectif résultant est local, c'est à dire analytique dans les dérivations spatio-temporelles, et le développement en série de dérivées peut être tronquée du point de vue des basses fréquences et des processus à grande distance. La complication dans ce schéma provient du fait que la brisure spontanée de l'invariance par renversement du temps, pilotée par les processus de relaxation microscopique, génère une dépendance non-analytique en fréquence, ce qui correspond à des corrélations non-locaux en temps. Ces dernières génèrent formellement une "fuite" du vecteur d'état dans l'espace de Fock de l'environnement, au thermostat ou vers les impuretés. Puisque ces degrés de liberté ne sont pas traités explicitement dans l'approximation phénoménologique ces processus sont représentés par une partie imaginaire dans l'action effective et la partie réelle de l'action effective devrait être employée uniquement pour dériver les équations du mouvement. Les équations résultantes capturent correctement la dynamique des excitations bosoniques des forces dispersives.

15.4.2 Fonctions de vertex analytiques

Il est plus simple d'établir le développement du gradient sous l'hypothèse simplificatrice que la seule singularité des fonctions de vertex apparaissant dans l'action effective, naît de la conservation globale de l'énergie-impulsion, c'est à dire des fonc-

tions $\hat{\Gamma}_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}, \mu_n}$, introduites par la relation,

$$\Gamma_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_n} = \delta_{p_1 + \dots + p_n, 0} \hat{\Gamma}_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}, \mu_n}. \quad (15.36)$$

Elles sont analytiques pour les variables d'énergie-impulsion. Le développement en gradient peut être réalisé d'abord en écrivant l'action effective (15.10) dans l'espace de Fourier

$$\begin{aligned} \Gamma[\rho] = & \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}} \sum_{\mu_n} \hat{\Gamma}_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}, \mu_n} (\rho - \rho^*)_{\mu_1, -p_1} \\ & \cdots (\rho - \rho^*)_{\mu_{n-1}, -p_{n-1}} (\rho - \rho^*)_{\mu_n, p_1 + \dots + p_{n-1}} \end{aligned} \quad (15.37)$$

et ensuite en appliquant un développement de Taylor pour les coefficients autour de $p = 0$,

$$\begin{aligned} \Gamma[\rho] = & \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}} \sum_{\mu_n} \sum_{\{k_j\}} \frac{1}{k_1! \cdots k_{n-1}!} \partial^{k_1} \cdots \partial^{k_{n-1}} \hat{\Gamma}_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}, \mu_n} |_{p_j=0} \\ & \times p_1^{k_1} (\rho - \rho^*)_{-\tilde{p}_1} \cdots p_{n-1}^{k_{n-1}} (\rho - \rho^*)_{-\tilde{p}_{n-1}} (\rho - \rho^*)_{\mu_n, p_1 + \dots + p_{n-1}}. \end{aligned} \quad (15.38)$$

Le multi-indice k est introduit à l'aide des règles $k_j = (k_j^0, k_j^1, k_j^2, k_j^3)$, $\partial_j^{k_j} = \partial_0^{k_j^0} \partial_1^{k_j^1} \partial_2^{k_j^2} \partial_3^{k_j^3}$ et $k! = k_0! k_1! k_2! k_3!$. Enfin on récrit $\rho_{(\mu, p)}$ à l'aide de son expression dans l'espace réel,

$$\begin{aligned} \Gamma[\rho] = & \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{\{k_j\}} \frac{i^{|k_1| + \dots + |k_{n-1}|}}{k_1! \cdots k_{n-1}!} \partial^{k_1} \cdots \partial^{k_{n-1}} \hat{\Gamma}_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}, \mu_n} |_{p_j=0} \\ & \times \int_x \partial_{a_1}^{k_1} (\rho - \rho^*)_{(\mu_1, x)} \cdots \partial_{a_{n-1}}^{k_{n-1}} (\rho - \rho^*)_{(\mu_{n-1}, x)} (\rho - \rho^*)_{(\mu_n, x)}, \end{aligned} \quad (15.39)$$

qui nous permet d'introduire la densité lagrangienne effective

$$L = \sum_{n=2}^{\infty} \sum_{\{k_j\}} \frac{1}{n!} \Gamma_{\mu_1, \dots, \mu_{n-1}, \mu_n}^{k_1, \dots, k_{n-1}} \partial_{a_1}^{k_1} (\rho - \rho^*)_{(\mu_1, x)} \cdots \partial_{a_{n-1}}^{k_{n-1}} (\rho - \rho^*)_{(\mu_{n-1}, x)} (\rho - \rho^*)_{(\mu_n, x)}, \quad (15.40)$$

avec

$$\Gamma_{\mu_1, \dots, \mu_{n-1}, \mu_n}^{k_1, \dots, k_{n-1}} = \frac{i^{|k_1| + \dots + |k_{n-1}|}}{k_1! \cdots k_{n-1}!} \partial^{k_1} \cdots \partial^{k_{n-1}} \hat{\Gamma}_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}, \mu_n} |_{p_j=0}. \quad (15.41)$$

15.4.3 Invariance par renversement du temps

La discussion précédente est ultra-simplifiée car la fonction de Green $\hat{\Gamma}_{\tilde{p}_1, \dots, \tilde{p}_{n-1}, \mu_n}$ est une fonction non-analytique de la fréquence à $\omega = 0$, le point autour duquel le développement en gradient est supposé être effectué. La partie réelle et imaginaire de la fonction de Green exhibe des singularités résultantes du temps de vie fini des excitations élémentaires. On considère la fonction à deux points $\Gamma_p^{\mu, \nu} = \hat{\Gamma}_{(\mu, p), \nu}$ par simplicité. La partie absorbante $\Im \Gamma_p$, développe une discontinuité dont l'amplitude est proportionnelle au taux du processus de relaxation particule-trou. On considère la partie réelle non-absorbante, $\Re \Gamma_p$, qui reste formellement invariante sous renversement du temps, sous inversion du signe de la fréquence $\omega = -p^0$, $\Re \Gamma_{\omega, p} = \Re \Gamma_{-\omega, p}$. Quand bien même $\Re \Gamma_{\omega, p}$ serait une fonction analytique de ω que cette relation nécessiterait que $\Re \Gamma_{\omega, p}$ dépende de ω^2 seulement. Mais la brisure attendue de l'invariance par renversement du temps dans le régime hydrodynamique suggère que les fonctions de vertex, en particulier $\Re \Gamma_{\omega, p}$, pourraient être sensible à l'inversion du signe des variables de fréquence. Cette dernière propriété mène à des puissances impaires de ω dans une fonction analytique. Comment $\Re \Gamma_{\omega, p}$ peut-elle se comporter comme une fonction paire en ω et exhiber en même temps des puissances impaires de la même variable ?

Il est instructif de rappeler ici comment la solution de champ moyen d'un modèle de type Ising exhibe une brisure spontanée de symétrie \mathbb{Z}_2 , représentée par un changement de signe du paramètre d'ordre noté s . Supposons que l'hamiltonien de champ moyen est de la forme $H = -Jns\langle s \rangle - hs$ où J est une constante de couplage, n est le nombre de coordination, le nombre des autres degrés de liberté couplés à s dans l'énergie de manière linéaire et h est un paramètre externe de brisure de symétrie. L'approximation de champ moyen pour l'énergie libre à température finie $T = 1/\beta$,

$$\beta F = -\ln \left(e^{\beta(Jn\langle s \rangle + h)} + e^{-\beta(Jn\langle s \rangle + h)} \right) \quad (15.42)$$

est une fonction paire de $\langle s \rangle$ pour $h = 0$ et

$$F \approx -|Jn\langle s \rangle + h| \quad (15.43)$$

pour

$$|\langle s \rangle| > \max \left(\frac{1}{\beta J n}, \frac{|h|}{J n} \right). \quad (15.44)$$

La condition de champ moyen de Weiss,

$$\langle s \rangle = -\frac{\partial \beta F}{\partial h} = \tanh \beta(Jn\langle s \rangle + h) \quad (15.45)$$

donne dans ce régime $\langle s \rangle \approx \pm 1$. Afin d'identifier la valeur moyenne correcte, on doit choisir la solution qui correspond aux valeurs d'énergie libre basse. En suivant l'équation (15.42) $\text{sgn}(\langle s \rangle) = \text{sgn}(h)$. La brisure spontanée de symétrie apparaissant à $h = 0$ est déclenchée par le paramètre de brisure de symétrie infinitésimal h qui détermine le signe du paramètre d'ordre. La limite thermodynamique, autrement dit la présence d'une infinité de degrés de liberté tacitement supposée quand le "tunneling" entre les minima dégénérés de l'énergie libre $h = 0$, capable d'annuler le paramètre d'ordre, est ignoré.

Dans le contexte de brisure de symétrie de l'invariance par renversement du temps, le rôle du paramètre de brisure de symétrie h est joué par le paramètre de Feynmann ϵ dans le propagateur. L'infinitésimal $\mathcal{O}(\epsilon)$, partie imaginaire du propagateur, brise l'invariance par renversement du temps pour chaque secteur d'impulsion de l'espace de Fock, le nombre de coordination n peut alors être identifié avec le nombre de degrés de liberté et peut être divergent à la limite thermodynamique. La faible brisure de symétrie est amplifiée jusqu'à une limite finie par les interactions à la fois avec le thermostat et avec le désordre aux frontières spatiales de l'écoulement. L'énergie libre de champ moyen qui inclut déjà les effets de brisure de symétrie pourrait être remplacée par l'action effective puisqu'il contient déjà elle aussi les effets de l'environnement cités précédemment. L'analogie du paramètre d'ordre sera la fréquence, qui se transforme de façon non-triviale durant le renversement de temps. Naturellement, l'analogie avec la théorie de champ moyen de Weiss s'arrête là et il ne faut pas s'attendre à pouvoir prédire n'importe quelle autre valeur moyenne du paramètre, la fréquence n'étant pas une variable dynamique. Mais il est raisonnable de penser que la dépendance de l'action effective par rapport à la fréquence d'un ρ monochromatique sera similaire à celles de l'énergie libre par rapport au paramètre d'ordre dans une théorie de Weiss donnée par l'équation (15.43). On s'attend donc à l'apparition de l'expression singulière $|\omega|$ dans la dépendance en fréquence des fonctions de vertex à $\omega \approx 0$. Cela devrait se produire puisque le temps de vie fini des excitations fermioniques introduit une partie imaginaire dans la self-énergie de l'électron, qui ne s'annule pas au niveau de Fermi et dont le signe est le même que celui de la partie imaginaire de la fréquence. Ce signe est en accord avec le signe de la partie réelle de l'énergie tant qu'on considère les propagateurs. On peut observer un tel mécanisme dans l'expression à l'ordre d'une boucle de $\Re\Gamma_{\omega,p}$, présenté dans l'appendice (D.3). Le changement $\omega = 0^+ \rightarrow 0^-$ inverse le signe de certaines contributions du temps de vie fini dans l'expression de $\Re\Gamma_{\omega,p}$ de telle manière que $\Re\Gamma_{\omega,p=0} \approx \alpha|\omega|$ pour $\omega \approx 0$. On prendra en compte de tels termes non analytiques dans l'action effective en remplaçant certaines dérivées partielles en temps par leur version symétrisée $\partial_t \rightarrow \hat{\partial}_t$ dans le lagrangien effectif (15.40). Puisque la transformée de Fourier de ∂_t est $-i\omega$, $\hat{\partial}_t$ sera la transformée de Fourier inverse de $-i|\omega| = -i\sqrt{\omega^2}$, i.e.

$$\hat{\partial}_t = \sqrt{\partial_t^2}. \quad (15.46)$$

Le mélange des dérivées spatio-temporelles sous "boosts" galiléens, montré par l'équation (15.12) requiert une dépendance singulière similaire en les variables d'impulsion et on se doit de remplacer toutes les dérivées spatio-temporelles par cette

construction symétrisée, $\partial_\mu \rightarrow \hat{\partial}_\mu = \sqrt{\partial_\mu^2}$. Pour le calcul des éléments de matrice de $\hat{\partial}_t$ en temps, on introduit d'abord une distribution de Dirac régularisée

$$\delta_\epsilon(t) = \frac{\epsilon}{\pi} \frac{1}{t^2 + \epsilon^2}, \quad (15.47)$$

et l'opérateur

$$\hat{G}_{t,t'} = \frac{i}{2\pi} \ln \delta_\epsilon(t - t'), \quad (15.48)$$

dont il sera prouvé qu'il vaut $(\hat{\partial}_t)^{-1}$ ci-dessous. On construit alors les éléments de matrice de l'opérateur hermitien $S = \text{sgn}(\omega)$,

$$\begin{aligned} S_{t,t'} &= \int_\omega e^{-i\omega(t-t')} \text{sgn}(\omega) \\ &= \partial_t \hat{G}_{t,t'}, \end{aligned} \quad (15.49)$$

au moyen de la représentation habituelle de Fourier de la fonction Θ ,

$$\Theta(\omega) = \int \frac{d\tau}{2\pi i} \frac{e^{i\omega\tau}}{\tau - i\epsilon}. \quad (15.50)$$

La relation (15.49) nous donne directement les éléments de matrice

$$\begin{aligned} (\hat{\partial}_t)_{t,t'} &= \partial_t S_{t,t'} \\ &= \partial_t^2 \hat{G}_{t,t'} \\ &= i \left[\frac{1}{\epsilon} \delta_\epsilon(t - t') - 2\pi \delta_\epsilon^2(t - t') \right], \end{aligned} \quad (15.51)$$

où le paramètre infinitésimal $\epsilon > 0$ est conservé afin de fournir une coupure ultraviolette pour la dépendance linéaire en fréquence qui caractérise la région infra-rouge seulement. Puisque la non-localité de la dérivée symétrisée $\hat{\partial}$ "existe" sur une distance de l'ordre de ϵ , on fixe $\epsilon = \ell_0$ pour $\hat{\partial}_j$, $j = 1, 2, 3$ et $\epsilon = \tau_0$ pour $\hat{\partial}_t$. Remarquons que la seconde équation dans (15.51) montre que $\hat{G} = (\hat{\partial}_t)^{-1}$ en raison de $\hat{\partial}^2 = \partial^2$.

Une autre expression très utile pour S est

$$S_{t,t'} = -\frac{i}{\pi} P \frac{1}{t - t'} \quad (15.52)$$

où P dénote la partie principale de l'intégration lorsque S agit tel un opérateur, régulé par ϵ . La substitution de ce résultat dans la première équation de (15.51) donne

$$(\hat{\partial}_t)_{t,t'} = -\frac{i}{\pi} \partial_t P \frac{1}{t-t'}. \quad (15.53)$$

On verra que ce qui est important d'un point de vue calcul est que, bien qu'à la fois $i\hat{\partial}$ et $i\hat{\partial}$ soient des opérateurs hermitiens, le premier est imaginaire et anti-symétrique, le second est réel et symétrique, respectivement. La dérivée temporelle convective sera modifiée suivant $D \rightarrow \hat{D} = \hat{\partial}_t + v \cdot \hat{\partial}$. Puisque toutes les dérivées doivent être modifiées dans l'action effective, on omettra le chapeau sur les symboles de dérivation dans les équations sans risques et sans ambiguïtés. Mais on doit garder à l'esprit qu'une équation importante, l'équation de continuité, doit conserver ses dérivées partielles. Une différence majeure entre les dérivées usuelles et les dérivées symétrisées nouvellement introduite est exprimée par les règles suivantes $\hat{\partial}_x \cos kx = ik \cos kx$, $\hat{\partial}_x \sin kx = ik \sin kx$.

Comme il a été mentionné plus haut, les forces dissipatives, en particulier la dérivée première d'un champ réel, sont difficiles à reproduire dans le formalisme lagrangien. En fait, l'étape d'intégration par partie en dérivant l'équation d'Euler-Lagrange pour l'action

$$S = \int_t \phi_t \partial_t \phi_t \quad (15.54)$$

élimine l'équation du mouvement, indiquant par là que l'action ne contient qu'un terme de surface. Comment retrouver les dérivées du premier ordre de l'équation hydrodynamique du mouvement? Le lien entre ce problème et la modification des dérivées peut être observée en notant que l'intégration par partie dans l'espace réel consiste à utiliser une distribution de Dirac conservant l'énergie et l'impulsion et à effectuer le changement $p \rightarrow -p$ dans l'espace de Fourier,

$$\begin{aligned} \int_x f'_x g_x &= \int_{x,p,q} f_p g_q e^{ix(p+q)} ip = \int_p f_p g_{-p} ip \\ - \int_x f_x g'_x &= - \int_{x,p,q} f_p g_q e^{ix(p+q)} iq = \int_q f_{-q} g_q i(-q) \end{aligned} \quad (15.55)$$

La disparition du terme de dérivation du premier ordre dans l'équation d'Euler-Lagrange pour un champ réel est alors le résultat de l'élimination entre les contributions de vecteurs d'onde opposée ou de fréquences dans l'action, écrite dans l'espace de Fourier. La modification des dérivées amène à utiliser le mauvais signe dans l'intégration par partie car $\hat{\partial}_\mu$ est un opérateur symétrique

$$\int_x f_x \hat{\partial}_\mu g_x = \int_x g_x \hat{\partial}_\mu f_x, \quad (15.56)$$

et on trouve les contributions à l'équation du mouvement provenant des puissances impaires des dérivées. Enfin, on remarque que la partie imaginaire de l'action effective est impaire en fréquence et devrait contenir le facteur $\text{sgn}(\omega)$.

15.4.4 Lagrangien tronqué

Le calcul de la partie réelle du lagrangien dans un développement double du type Ginzburg-Landau jusqu'à l'ordre $\mathcal{O}((\rho - \rho^*)^3)$ des amplitudes et $\mathcal{O}(\partial^3)$ des dérivées est donné dans l'appendice (D). Le calcul commence par lister tous les coefficients du développement en gradient non-triviaux possibles qui contribuent au lagrangien invariant par rotation et translation. Cette liste est présentée dans les sections (D.1.1) et (D.1.2). La partie réelle doit formellement être invariante par renversement du temps, ce qui signifie que les puissances impaires des dérivées temporelles ∂_t doivent être remplacées par les dérivées symétrisées $\hat{\partial}_t$. Dans la section (D.1.3), l'équation de continuité est alors utilisée pour simplifier la dépendance du lagrangien au courant, en contre-partie la dépendance à la densité est plus forte. En particulier, cette étape génère des termes contenant des puissances impaires de la dérivée temporelle usuelle agissant sur la densité. Enfin, l'invariance par "boost" galiléen est imposée formellement dans la section (D.1.4), en remplaçant les dérivées temporelles par des dérivées convectives et en éliminant les contributions en volume non-invariantes par "boost" galiléen, c'est à dire que seules les dérivées par rapport aux coordonnées spatiales ou temporelles et complètement constantes en temps, subsistent parmi les termes non-invariants. Le résultat final pour le lagrangien, est de la forme $L = L_n + L_j$, où

$$\begin{aligned} \Re L_n = & g + g_t Dn + \hat{g}_t \hat{D}n + g_{tt} D^2 n + g_{t^2} (Dn)^2 + \Re g_{ss} \Delta n + \Re g_{s^2} (\nabla n)^2 + g_{ttt} D^3 n \\ & + \hat{g}_{ttt} \hat{D}^3 n + g_{tt,t} D^2 n Dn + \hat{g}_{tt,t} D^2 n \hat{D}n + \Re \hat{g}_{tss} \hat{D} \Delta n + \Re \hat{g}_{ts,s} \hat{D} \nabla n \cdot \nabla n \\ & + \Re \hat{g}_{t,ss} \Delta n \hat{D}n \end{aligned} \quad (15.57)$$

et

$$\begin{aligned} \Re L_j = & \Re G_{j,k}^a \partial_a j_j j_k + G_{tj} \cdot \hat{D}j + n \gamma_{ttj} \cdot D^2 j + G_{t^2} (\hat{D}j)^2 + n \Re \hat{\gamma}_{j,k}^{0a} \hat{D} \partial_a j_j \\ & + n \Re \gamma_{j,k}^{ab} \partial_a \partial_b j_j j_k + n \Re \gamma_{j,k}^{a,b} \partial_a j_j \partial_b j_k + n \hat{\gamma}_{ttj} \cdot \hat{D}^3 j + \hat{G}_{tt,t} D^2 j \cdot \hat{D}j \\ & + n \Re \hat{\gamma}_{j,k}^{0ab} \hat{D} \partial_a \partial_b j_j j_k + \Re \hat{G}_{j,k}^{ab,0} \partial_a \partial_b j_j \hat{D} j_k + \Re \hat{G}_{j,k}^{0a,b} \hat{D} \partial_a j_j \partial_b j_k \end{aligned} \quad (15.58)$$

On renvoie aux équations (D.22), (D.24) et (D.25) pour les coefficients qui ne sont pas des fonctions locales de la densité n et de ses dérivées spatio-temporelles. On s'attend à ce que la partie imaginaire du lagrangien soit liée aux termes de l'équation (15.57)-(15.58) correspondant aux forces dissipatives. Une telle corrélation entre la partie réelle et la partie imaginaire est confirmée pour les parties aux ordres $\mathcal{O}((\rho - \rho^*)^2)$ et $\mathcal{O}(\partial^2)$ du lagrangien par le simple calcul en (D.3). Il y a deux sources différentes de contributions imaginaires au lagrangien, les deux étant reliées aux dérivées spatiales. Les simples dérivées spatiales correspondent à i fois les simples dérivées par rapport aux impulsions spatiales et agissant sur les fonctions de vertex. La partie d'ordre $\mathcal{O}(p)$ des fonctions de vertex est réelle lorsque l'énergie s'annule, rendant ainsi G^0 , G et G_{tt}^a purement imaginaire. La dérivée seconde par rapport aux impulsions spatiales agissant sur les fonctions de vertex produit des contributions réelles et imaginaires et ces dernières sont proportionnelles à $\text{sgn}(E)$. La partie imaginaire du lagrangien est donc

$$\Im L_n = \Im m_{g_{ss}} \Delta n + \Im m_{g_{s^2}} (\partial n)^2 + \Im m_{\hat{g}_{tss}} \hat{D} \Delta n + \Im m_{\hat{g}_{ts,s}} \hat{D} \partial n \partial n + \Im m_{\hat{g}_{t,ss}} \Delta n \hat{D} n \quad (15.59)$$

et

$$\begin{aligned} \Im L_j = & \Im m G^0 \cdot D j + \Im m G \cdot j + \Im m G_{tt} \cdot D^2 j + \Im m G_{j,k}^a \partial_a j_j S j_k + n \Im m \hat{\gamma}_{j,k}^{0a} S \hat{D} \partial_a j_j \\ & + n \Im m \gamma_{j,k}^{ab} \partial_a \partial_b j_j S j_k + n \Im m \gamma_{j,k}^{a,b} \partial_a j_j S \partial_b j_k + n \Im m \hat{\gamma}_{j,k}^{0ab} \hat{D} \partial_a \partial_b j_j S j_k \\ & + \Im m \hat{G}_{j,k}^{ab,0} \partial_a \partial_b j_j S \hat{D} j_k + \Im m \hat{G}_{j,k}^{0a,b} \hat{D} \partial_a j_j S \partial_b j_k \end{aligned} \quad (15.60)$$

où S est donnée par l'équation (15.49). Comme mentionné plus haut, seule la partie réelle de l'action effective doit être prise en compte dans le calcul des équations du mouvement car la partie imaginaire reflète les corrélations entre la "fuite" de l'état quantique et le mouvement spatio-temporel.

15.5 Equations du mouvement

On a mentionné au début de la section (15.4) que l'équation du mouvement (15.33), correspondant à l'action effective (15.10),

$$\frac{\delta \Re \Gamma[\rho]}{\delta \rho_{\bar{x}}} = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\bar{a}_1, \dots, \bar{a}_n} \frac{1}{n!} \Gamma_{\bar{x}, \bar{a}_1, \dots, \bar{a}_n} (\rho - \rho^*)_{\bar{a}_1} \cdots (\rho - \rho^*)_{\bar{a}_n} = 0, \quad (15.61)$$

est satisfaite par la densité de courant lorsque la source externe est éteinte. On remarque que les théories effectives contiennent toujours des dérivées d'ordre supérieurs

et que les conditions initiales impliquent donc pas seulement la densité et le courant à l'instant initial $t = 0$, mais aussi un certain nombre de dérivées temporelles.

On considère d'abord les aspects mathématiques des équations du mouvement, les équations d'Euler-Lagrange généralisées avec des dérivées symétrisées et convectives, ainsi que les difficultés induites par une contrainte, en l'occurrence l'équation de continuité et les différences entre la plus simple des équations du mouvement avec et sans brisure spontanée de l'invariance par renversement du temps. Enfin, on termine cette section par une discussion qualitative des degrés de liberté contrôlés par les équations du mouvement du lagrangien effectif.

15.5.1 Dérivées convectives

Les équations du mouvement (15.61), peuvent être obtenues de manière standard, en effectuant une variation infinitésimale de $\rho_\mu = (n, j)$ et en généralisant la dérivation usuelle des équations d'Euler-Lagrange pour des dérivations d'ordre plus élevées du lagrangien effectif (15.57)-(15.58). Mais il est plus avantageux de suivre une procédure où n'apparaissent que des quantités invariantes par "boost". Pour ce faire, on devrait travailler avec des dérivées convectives plutôt qu'avec des dérivées temporelles et écrire les variations des dérivées convectives de ρ_μ comme

$$\begin{aligned}\delta D\rho_\mu &= D\delta\rho_\mu + \delta\rho \cdot \partial\rho_\mu, \\ \delta D^2\rho_\mu &= D^2\delta\rho_\mu + \delta\rho \cdot \partial D\rho_\mu + D(\delta\rho \cdot \partial\rho_\mu), \\ \delta D^3\rho_\mu &= D^3\delta\rho_\mu + \delta\rho \cdot \partial D^2\rho_\mu + D(\delta\rho \cdot \partial D\rho_\mu) + D^2(\delta\rho \cdot \partial\rho_\mu).\end{aligned}\tag{15.62}$$

On obtient des expressions similaires pour la variation contenant la dérivée \hat{D} . En suivant les étapes usuelles, on aboutit à l'ordre $\mathcal{O}(\delta\rho)$ de variation de l'action

$$S(\rho, D\rho, \hat{D}\rho, \nabla\rho, D^2\rho, D\nabla\rho, \hat{D}\nabla\rho, \nabla\nabla\rho, D^3\rho, \hat{D}^3\rho, D^2\nabla\rho, D\nabla\nabla\rho, \hat{D}\nabla\nabla\rho, \nabla\nabla\nabla\rho)\tag{15.63}$$

On a donc

$$\begin{aligned}\delta S &= \int \left[\frac{\delta L}{\delta\rho_\mu} \delta\rho_\mu + \frac{\delta L}{\delta D\rho_\mu} \delta D\rho_\mu + \frac{\delta L}{\delta \hat{D}\rho_\mu} \delta \hat{D}\rho_\mu + \frac{\delta L}{\delta \partial_a \rho_\mu} \delta \partial_a \rho_\mu \right. \\ &+ \frac{\delta L}{\delta D^2\rho_\mu} \delta D^2\rho_\mu + \frac{\delta L}{\delta D\partial_a \rho_\mu} \delta D\partial_a \rho_\mu + \frac{\delta L}{\delta \hat{D}\partial_a \rho_\mu} \delta \hat{D}\partial_a \rho_\mu + \frac{1}{2} \frac{\delta L}{\delta \partial_a \partial_b \rho_\mu} \delta \partial_a \partial_b \rho_\mu \\ &+ \frac{\delta L}{\delta D^3\rho_\mu} \delta D^3\rho_\mu + \frac{\delta L}{\delta \hat{D}^3\rho_\mu} \delta \hat{D}^3\rho_\mu + \frac{\delta L}{\delta D^2\partial_a \rho_\mu} \delta D^2\partial_a \rho_\mu + \frac{1}{2} \frac{\delta L}{\delta D\partial_a \partial_b \rho_\mu} \delta D\partial_a \partial_b \rho_\mu \\ &\left. + \frac{1}{2} \frac{\delta L}{\delta \hat{D}\partial_a \partial_b \rho_\mu} \delta \hat{D}\partial_a \partial_b \rho_\mu + \frac{1}{6} \frac{\delta L}{\delta \partial_a \partial_b \partial_c \rho_\mu} \delta \partial_a \partial_b \partial_c \rho_\mu \right]\end{aligned}\tag{15.64}$$

qui donne après intégration par partie l'équation du mouvement

$$\begin{aligned}
0 = & \frac{\delta L}{\delta \rho_\mu} - D \frac{\delta L}{\delta D \rho_\mu} + \hat{D} \frac{\delta L}{\delta \hat{D} \rho_\mu} - \partial_a \frac{\delta L}{\delta \partial_a \rho_\mu} + D^2 \frac{\delta L}{\delta D^2 \rho_\mu} \\
& + \partial_a D \frac{\delta L}{\delta D \partial_a \rho_\mu} - \partial_a \hat{D} \frac{\delta L}{\delta \hat{D} \partial_a \rho_\mu} + \frac{1}{2} \partial_a \partial_b \frac{\delta L}{\delta \partial_a \partial_b \rho_\mu} - D^3 \frac{\delta L}{\delta D^3 \rho_\mu} + \hat{D}^3 \frac{\delta L}{\delta \hat{D}^3 \rho_\mu} \\
& - \partial_a D^2 \frac{\delta L}{\delta D^2 \partial_a \rho_\mu} - \frac{1}{2} \partial_a \partial_b D \frac{\delta L}{\delta D \partial_a \partial_b \rho_\mu} + \frac{1}{2} \partial_a \partial_b \hat{D} \frac{\delta L}{\delta \hat{D} \partial_a \partial_b \rho_\mu} \\
& - \frac{1}{6} \partial_a \partial_b \partial_c \frac{\delta L}{\delta \partial_a \partial_b \partial_c \rho_\mu} + \frac{\delta L}{\delta D \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu \rho_\nu - \delta_{0,\mu} v \cdot \partial \rho_\nu) \\
& + \frac{\delta L}{\delta \hat{D} \rho_\nu} \frac{1}{n} (\hat{\partial}_\mu \rho_\nu - \delta_{0,\mu} v \cdot \hat{\partial} \rho_\nu) + \frac{\delta L}{\delta D^2 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu D \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial D \rho_\nu) \\
& - D \frac{\delta L}{\delta D^2 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial \rho_\nu) + \frac{\delta L}{\delta D \partial_a \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu \partial_a \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial \partial_a \rho_\nu) \\
& + \frac{\delta L}{\delta \hat{D} \partial_a \rho_\nu} \frac{1}{n} (\hat{\partial}_\mu \partial_a \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \hat{\partial} \partial_a \rho_\nu) \\
& + \frac{\delta L}{\delta D^3 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu D^2 \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial D^2 \rho_\nu) + \frac{\delta L}{\delta \hat{D}^3 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\hat{\partial}_\mu D^2 \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \hat{\partial} D^2 \rho_\nu) \\
& - D \frac{\delta L}{\delta D^3 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu D \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial D \rho_\nu) + \hat{D} \frac{\delta L}{\delta \hat{D}^3 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\hat{\partial}_\mu D \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \hat{\partial} D \rho_\nu) \\
& + D^2 \frac{\delta L}{\delta D^3 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial \rho_\nu) + D^2 \frac{\delta L}{\delta \hat{D}^3 \rho_\nu} \frac{1}{n} (\hat{\partial}_\mu \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \hat{\partial} \rho_\nu) \\
& + \frac{\delta L}{\delta D^2 \partial_a \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu D \partial_a \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial D \partial_a \rho_\nu) - D \frac{\delta L}{\delta D^2 \partial_a \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu \partial_a \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial \partial_a \rho_\nu) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\delta L}{\delta D \partial_a \partial_b \rho_\nu} \frac{1}{n} (\partial_\mu \partial_a \partial_b \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \partial \partial_a \partial_b \rho_\nu) \\
& + \frac{1}{2} \frac{\delta L}{\delta \hat{D} \partial_a \partial_b \rho_\nu} \frac{1}{n} (\hat{\partial}_\mu \partial_a \partial_b \rho_\nu - \delta_{\mu,0} v \cdot \hat{\partial} \partial_a \partial_b \rho_\nu)
\end{aligned} \tag{15.65}$$

où on introduit la notation $\partial_\mu = (1 - \delta_{\mu,0}) \partial_\mu$.

15.5.2 Equation de continuité

L'application de (15.65) au lagrangien effectif produit les équations du mouvement pour la densité n et pour chacune des composantes du courant j . On a donc pas besoin de potentiel thermodynamique dans le système, car la dynamique interne est complètement encapsulée dans l'action effective. Néanmoins, on doit imposer une équation supplémentaire qui est la réminiscence d'une équation constitutive pour l'hydrodynamique. La raison est, comme il a déjà été mentionné plus haut, que ρ_μ satisfait toujours l'équation de continuité, une contrainte qui doit être prise en compte par un multiplicateur de Lagrange. On considérera donc une action effective étendue

$$\Gamma[\rho, \lambda] = \Gamma[\rho] + \lambda \cdot \partial_\mu \rho_\mu \quad (15.66)$$

avec les équations variationnelles correspondantes

$$0 = \mathcal{L}_0 + \partial_0 \lambda = \mathcal{L}_j + \partial_j \lambda, \quad (15.67)$$

où \mathcal{L}_μ dénote les équations d'Euler-Lagrange de l'action effective $\Gamma[\rho]$. La dérivée spatio-temporelle agissant sur λ est la dérivée partielle usuelle. On considérera aussi l'équation de continuité (15.15) comme une équation du mouvement pour n et la première équation dans (15.67) comme une équation constitutive pour une quantité qui joue le rôle réminiscent de la pression dans l'équation du mouvement pour la pression.

15.5.3 Brisure spontanée de l'invariance par renversement du temps

Après avoir introduit le système des équations du mouvement en général, on regarde de près la manière dont l'invariance par renversement du temps est brisée en raison des dérivées symétrisées. On considère le cas le plus simple, le lagrangien

$$L = \psi^\dagger [i\partial_t - h + i\epsilon \operatorname{sgn}(h)] \psi + j^\dagger \psi + \psi^\dagger j, \quad (15.68)$$

pour un champ complexe ψ_t . L'équation d'Euler-Lagrange correspondant à ψ^\dagger est

$$[i\partial_t - h + i\epsilon \operatorname{sgn}(h)] \psi = -j. \quad (15.69)$$

Les deux premiers termes dans le lagrangien et l'équation du mouvement sont invariants par renversement du temps. Le terme infinitésimal est impair par rapport au renversement du temps et fixe une direction du temps privilégiée, dépendante du signe de l'énergie h . En fait, la solution de l'équation du mouvement peut être aisément obtenue au moyen du propagateur causal

$$\begin{aligned} G_t &= \int_\omega \frac{e^{-i\omega t}}{\omega - h + i\epsilon \operatorname{sgn}(h)} \\ &= -ie^{-iht} \Theta(t \operatorname{sgn}(h)), \end{aligned} \quad (15.70)$$

comme

$$\psi_t = ie^{-iht} \int_{t'} \Theta((t - t') \operatorname{sgn}(h)) e^{iht'} j_{t'}. \quad (15.71)$$

Lorsque $h = 0^+$, cette expression correspond simplement à l'intégration de l'équation $\partial_t \psi = i \cdot j$. La constante d'intégration additive à la solution est fixée par la condition $\psi_{-\infty} = 0$. La partie du lagrangien symétrique par renversement du temps $i\partial_0 - h$ agit en avant ou en arrière, selon le signe du terme explicite de brisure temporelle. En fait, l'intégration sur le côté droit de (15.71) filtre la composante fréquentielle $-h$ de la source j passée ou future selon $\text{sgn}(h)$. Une façon formelle mais bien plus exploitable d'exprimer la même chose est de remarquer que la différence entre la brisure de symétrie spontanée et la brisure de symétrie explicite est que le lagrangien nu ou les quantités extraites à partir de ce dernier, en particulier le propagateur, sont invariants ou pas par rapport à la symétrie en question. Le propagateur G_t est clairement non-invariant sous renversement du temps selon la prescription de Feynman $i\epsilon$.

Montrons comment la situation change lors du remplacement $\partial_t \rightarrow \hat{\partial}_t$ dans le lagrangien. On aurait ainsi dans ce dernier un champ réel

$$\hat{L} = \phi[i\hat{\partial}_t - h + i\epsilon \text{sgn}(h)]\phi + j\phi, \quad (15.72)$$

qui générerait une équation du mouvement

$$[i\hat{\partial}_t - h + i\epsilon \text{sgn}(h)]\phi = -j. \quad (15.73)$$

Le propagateur causal

$$\begin{aligned} \hat{G}_t &= \int_{\omega} \frac{e^{-i\omega t}}{|\omega| - h + i\epsilon \text{sgn}(h)} \\ &= \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\cos \omega t}{\omega - h + i\epsilon \text{sgn}(h)}, \end{aligned} \quad (15.74)$$

reste invariant sous renversement du temps. On considère d'abord le cas $h = 0^{\pm}$, où le propagateur, \hat{G} , est donné par l'équation (15.48). La solution de $\hat{\partial}_t \phi = i \cdot j$ est alors

$$\phi_t = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \ln[(t - t')^2 + \epsilon^2] j_{t'}. \quad (15.75)$$

Remarque 15.5.1 – L'équation (15.73) n'est pas une équation différentielle du premier ordre car la dérivée symétrisée $\hat{\partial}$, donnée par l'équation (15.51) est non-locale. Néanmoins l'équation $\hat{\partial}_t \phi_t = 0$ n'admet de solutions non-triviales que la constante, ce qui peut être vu à l'aide de son expression dans l'espace de Fourier $0 = |\omega| \phi_{\omega}$. Ainsi, la solution de l'équation (15.73) devient unique dès lors qu'une condition aux limites est imposée à $t = \infty$ ou $t = -\infty$.

– Une autre remarque peut être faite sur l'indépendance du propagateur par rapport à $\text{sgn}(h)$ à $h = 0$ qui permet de mélanger les contributions passées et futures dans la solution de (15.75), ceci en accord avec la remarque précédente sur la brisure spontanée de symétrie.

- Essayons de comprendre qualitativement la différence entre les équations (15.69) et (15.73) lorsque ϕ_ω ne s'annule pas que pour $\omega_1 < |\omega| < \omega_2$ seulement. Les solutions doivent être similaires pour de grands $\omega_1 \approx \omega_2$ sauf lors de l'apparition du mélange passé-futur en résolvant l'équation avec la dérivée symétrisée. Puisqu'on n'a pas d'échelle de temps finie à notre disposition, la différence entre les solutions devrait être logarithmique comme ω_2/ω_1 . Il est facile de voir que cette propriété est reproduite par la solution de (15.75). A cette fin, on choisit j_t qui ne s'annule pas pour $-T_1 \leq t \leq 0$ et on cherche une solution pour $t > T_2$. On a évidemment $\omega_1 \approx 1/(T_1 + T_2)$ et $\omega_2 \approx 1/T_2$ dans ce cas. La variation dans le propagateur de l'équation (15.73) est $\ln(T_1 + T_2) - \ln(T_2) \approx \ln \omega_2/\omega_1$.

La seconde des équations (15.74) peut être utilisée pour obtenir le propagateur pour des valeurs non-nulles de h . Pour $h > 0$ on trouve

$$\hat{G}_t(h > 0) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} P \frac{\cos \omega t}{\omega - h} - i\pi \cos ht, \quad (15.76)$$

et le propagateur filtre dans la solution $\phi = \hat{G} \cdot j$ les modes de fréquence approximativement $\pm h$ lorsque $h > 0$ et ce, en accord avec les remarques précédentes sur la brisure de symétrie spontanée laissant le lagrangien et son propagateur symétrique. Lorsque $h < 0$ alors

$$\hat{G}_t(h < 0) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{\cos \omega t}{\omega + |h|}, \quad (15.77)$$

Il n'y a donc pas de fréquence à filtrer qui soit privilégiée et la solution reçoit des contributions principalement des fréquences $|\omega| < |h|$. Remarquons que dans aucun cas le terme de brisure de symétrie explicite ne joue de rôle.

15.5.4 Modes hydrodynamiques

Après avoir considéré les équations du mouvement de différents points de vue formels, on en arrive à des questions plus physiques. Quels types de degré de liberté correspondent à l'équation du mouvement. Afin de répondre à cette question, il est intéressant de ré-interpréter l'action effective (15.7) pour les opérateurs composites $\psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{\bar{a}} \cdot \psi$ comme une bosonisation [171]. En fait, les excitations de notre système dans un sous-espace à nombre de particules donné peut être décrit par l'application répétée de l'opérateur bosonique bi-linéaire $\psi_x^\dagger \psi_y$ agissant sur l'état de plus basse énergie du sous-espace en question car le nombre de particules est conservé par les interactions. Autrement dit, n'importe quel état excité peut être obtenu en terme d'excitations particules-trou au-dessus de l'état fondamental. L'action nue pour le champ correspondant à nos opérateurs composites est donné par [172]

$$e^{\frac{i}{\hbar} S[\rho]} = \int \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\psi^\dagger] \mathcal{D}[u] e^{\frac{i}{\hbar} \psi^\dagger \cdot (G^{-1} - u - V) \cdot \psi - \frac{i}{2\hbar} u \cdot U^{-1} \cdot u} \prod_{\bar{x}} \delta_{\rho_{\bar{x}}, \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{\bar{x}} \cdot \psi} \quad (15.78)$$

qui peut être décrit comme

$$e^{\frac{i}{\hbar}S[\rho]} = \int D[\sigma] e^{\frac{i}{\hbar}W[\sigma] - \frac{i}{\hbar}\rho \cdot \sigma} \quad (15.79)$$

au moyen de la représentation de Fourier de la distribution de Dirac. L'approximation du point-selle à l'ordre "arbre" de cette fonctionnelle donne l'identité $S[\rho] = \Gamma[\rho]$ selon les règles de la transformation de Legendre (C.12). Ainsi, l'équation du mouvement (15.61) peut être considérée comme une approximation à l'ordre "arbre" de l'équation du mouvement pour la valeur moyenne du champ qui contrôle les excitations bosoniques du système. L'existence d'une solution non-triviale, un point-selle non-trivial, indique la présence d'un condensat de ces quanta. Ainsi, l'équation du mouvement (15.61) gouverne un condensat d'excitations bosoniques collectives de la surface de Fermi. On peut comprendre facilement l'émergence d'une approximation semi-classique en remarquant que le spectre d'excitations au-dessus du niveau de Fermi d'un système macroscopique avec une densité finie de fermions est dense et obéit à la statistique d'échange bosonique.

On retrouve un tel cas, quoique plus intuitif, en hydrodynamique moléculaire [175]. La moyenne effectuée sur les mouvements des particules dans un volume de contrôle approprié produit des champs hydrodynamiques qui contrôlent la dynamique en deçà des échelles de distance atomiques. En quels sens, l'équation du mouvement décrit elle à grande distance, les modes hydrodynamiques ? Une réponse quantitative à cette question nécessite une analyse par le groupe de renormalisation de l'intégrale de chemin (15.3). Dans le présent travail, on remplace une telle analyse par la coupure courte présentée dans l'appendice (D.3), nommément par un calcul direct et simplifié de l'action effective avec une coupure $\ell_0 > \tau_{micr}v_F$. Un tel choix de la coupure spatiale correspond à une moyenne sur le mouvement des particules en hydrodynamique moléculaire. Ce qu'on peut dire à un niveau quantitatif, c'est que les excitations collectives, condensées et de basse énergie de la surface de Fermi sont supposées représenter les modes à grande distance du système. Ainsi, l'équation du mouvement peut être vue comme une équation effective pour la structure à grande distance. Ceci est consistant avec l'interprétation de $\rho_{\bar{x}}$ comme valeur moyenne de la densité et du courant dans l'état fondamental et en présence d'une source adiabatique externe. En fait, les excitations à courte distance émergent lorsque l'opérateur de densité de courant est considéré proche des frontières du domaine ou lorsqu'il est coincé dans un état fondamental avec d'autres opérateurs locaux. Un exemple de tels opérateurs est donné par la fonction de Green avec une séparation spatio-temporelle faible entre les opérateurs. En l'absence de telles opérateurs en ignorant les effets de surface proches des bords du domaine de l'écoulement, la valeur moyenne $\rho_{\bar{x}} = \langle 0 | \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{\bar{x}} \cdot \psi | 0 \rangle$ devrait en effet recevoir des contributions des basses énergies et seulement des modes à grande distance qui survivent aux processus de relaxations rapides.

15.6 Ordre principal

Après avoir obtenu le lagrangien effectif (15.57)-(15.58) et les équations d'Euler-Lagrange généralisées (15.65) on est en position de construire les équations hydrodynamiques. Le calcul est direct mais long et est présenté brièvement dans l'annexe (D.2). On discute dans cette section de la partie dominante de cette équation et on la compare avec l'équation de Navier-Stokes usuelle. On écrit les coefficients dans le lagrangien comme une somme $g = g^{(0)} + g^{(1)} + \dots$, où les $g^{(n)}$ sont les contributions de l'ordre $\mathcal{O}((\rho - \rho^*)^n)$. La contribution principale dans $\mathcal{O}(\rho - \rho^*)$, $\mathcal{O}(D)$, $\mathcal{O}(\hat{D})$ et $\mathcal{O}(\partial^2)$ à l'équation du mouvement pour la densité est

$$0 = \partial_n g^{(1)} + \partial_n \hat{g}_t^{(1)} \hat{D}n + \hat{D} \hat{g}_t^{(1)} + \Re \Delta g_{ss} + \partial_0 \lambda \quad (15.80)$$

où les coefficients

$$\begin{aligned} \hat{g}_t^{(1)} &= 2\Gamma_{0,0}^0 (n - n^*), \\ \Re g_{ss}^{(1)} &= 2\Re C_{2,0}^{ss} (n - n^*), \end{aligned} \quad (15.81)$$

sont donnés en terme de dérivées des fonctions de vertex à deux et à trois points (D.22). En utilisant une de ces relations dans (D.8), on obtient

$$C_{2,0}^{ss} = -\frac{1}{12} \Delta_{p_1} \Gamma_{0,0}, \quad (15.82)$$

L'équation (15.80) peut être écrite comme

$$0 = \Gamma_0 + 4\Gamma_{0,0}^0 \hat{D}n - \frac{1}{6} \Delta_{p_1} \Gamma_{0,0} \Delta n + \partial_0 \lambda. \quad (15.83)$$

Les coefficients sont

$$\begin{aligned} 4\Gamma_{0,0}^0 &= -2i\hbar \frac{\partial_E \tilde{G}^{tt}}{(\tilde{G}^{tt})^2} \\ &= -2 \frac{\hbar\pi \int_q \frac{1}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}}{\left(\int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2}\right)^2}, \end{aligned} \quad (15.84)$$

et

$$\begin{aligned} 2\Re C_{2,0}^{ss} &= \Re \left(\frac{\partial_{p^2} \tilde{G}^{tt}}{3(\tilde{G}^{tt})^2} - \frac{(\tilde{G}^{st})^2}{3(\tilde{G}^{tt})^2 \tilde{G}^L} \right) \\ &= \frac{\pi \int_q \left[\frac{E_q}{(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2 (E_q^2 + 2\gamma^2)}{3m(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right]}{6m\gamma \left(\int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2}\right)^2} + \frac{\pi \left(\int_q \frac{q^2 E_q}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}\right)^2}{9\gamma \int_q \frac{q^2}{E_q^2 + \gamma^2} \left(\int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2}\right)^2}. \end{aligned} \quad (15.85)$$

La première équation dans (15.84)-(15.85) donne les coefficients exprimés en fonction des fonctions de Green. Ils sont obtenus en utilisant les relations (D.63) entre les fonctions de Green et les fonctions de vertex. La seconde équation dans (15.84)-(15.85) contient les résultats du développement à une boucle, tirées des équations (D.58). Ici, E_q est défini comme l'énergie d'une particule donnée par l'équation (D.48) en fonction du potentiel chimique μ . Les intégrales sur les impulsions dans ces équations ainsi que les suivantes sont contraintes dans la région $|q| \leq 2\pi/\ell_0$, ℓ_0 étant donné dans le régime hydrodynamique par (D.59). Les intégrales de boucle sont donc des fonctions des paramètres libres du modèle, la masse effective m , la densité $n^* = 4\pi(2m\mu)^{3/2}/3\hbar^3$ et le temps de vie, $\tau_{micr} = \hbar/\gamma$. Ce schéma est cohérent et consistant pour des amortissements suffisamment forts des excitations élémentaires, la limite supérieure du temps de vie est donnée par (D.60).

L'équation à l'ordre principal pour le courant donne l'équation du mouvement pour la vitesse

$$0 = n\hat{D}v_a + n\Re L_{a,k}^{bc(0)} \partial_b \partial_c v_k + \frac{\partial_a \lambda}{4C_{0,2}} \quad (15.86)$$

où les coefficients sont donnés par (D.24) et (D.33). Cette équation pourra être écrite d'une manière plus transparente comme

$$n\hat{D}v_a = F_a + \eta \Delta v_a + \left(\xi + \frac{\eta}{3} \right) \partial_a (\nabla \cdot v). \quad (15.87)$$

Le membre de gauche peut être considéré comme l'analogie microscopique du terme d'accélération dans l'équation de Navier-Stokes, à ceci près que la dérivée symétrisée \hat{D} représente la dérivée convective usuelle. D'après ce qui a été dit en section (15.5.3), cette différence peut être négligeable un temps suffisamment long après avoir imposé la condition initiale, lorsque les processus de relaxation peuvent établir une brisure de symétrie du renversement du temps. Considérons un à un les différents termes du membre de droite dans l'équation (15.87) tels qu'ils sont donnés par les calculs présentés dans l'appendice (D.2.1). Le premier terme de (15.87) représente une force conservative qui peut être obtenue à partir de la pression

$$p = \frac{3n}{2i\hbar\partial_E(2\hat{\Gamma}^T + \hat{\Gamma}^L)} = -\frac{3n(\tilde{G}^L)^2}{6i\hbar\partial_E\tilde{G}^T} = -\lambda \frac{n\hbar(\int_q \frac{q^2}{E_q^2 + \gamma^2})^2}{6m^2\pi \int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}} \quad (15.88)$$

La première équation donne ici la pression en fonction des vertex selon (D.35). La seconde exhibe la pression au moyen des fonctions de Green connexes comme elles sont exprimées dans l'équation (D.36). Enfin, la simple approximation de l'action effective, résumée dans (D.58), amène à la dernière des équations.

Les deux derniers termes du membre de droite de l'équation du mouvement contiennent les coefficients de viscosité de volume et de cisaillement

$$\Re L_{a,k}^{bc(0)} = \eta \delta_{k,a} \delta_{b,c} + \frac{1}{2} \left(\xi + \frac{\eta}{3} \right) (\delta_{c,k} \delta_{b,a} + \delta_{c,a} \delta_{b,k}) \quad (15.89)$$

Les équations (D.33), (D.35) et (D.39) donnent

$$\begin{aligned} \eta &= -\Re \frac{3\partial_{p^2} \hat{\Gamma}^T}{i\hbar \partial_E (2\hat{\Gamma}^T + \hat{\Gamma}^L)}, \\ \xi &= -\Re \frac{\frac{3}{p^2} (\Gamma^L - \Gamma^T)}{i\hbar \partial_E (2\hat{\Gamma}^T + \hat{\Gamma}^L)} + \Re \frac{\partial_{p^2} \hat{\Gamma}^T}{i\hbar \partial_E (2\hat{\Gamma}^T + \hat{\Gamma}^L)}. \end{aligned} \quad (15.90)$$

A l'aide de (D.63) et de (D.58) on peut récrire η et ξ comme

$$\begin{aligned} \eta &= -\Re \frac{\partial_{p^2} \tilde{G}^T}{i\hbar \partial_E \tilde{G}^T} \\ &= -\frac{\int_q q^2 \left(\frac{E_q}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2(E_q^2 + 2\gamma^2)}{6m^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right)}{\gamma \int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}}. \end{aligned} \quad (15.91)$$

et

$$\begin{aligned} \xi &= -\Re \operatorname{sgn}(E) \frac{2i}{\hbar} \left(\frac{(\tilde{G}^{st})^2}{\tilde{G}^{tt} \partial_E \tilde{G}^T} + \frac{\partial_{p^2} \tilde{G}^T - \partial_{p^2} \tilde{G}^L}{\partial_E \tilde{G}^T} \right) + \Re \operatorname{sgn}(E) \frac{\partial_{p^2} \tilde{G}^T}{3i\hbar \partial_E \tilde{G}^T} \\ &= \frac{1}{3\hbar\gamma} \left(\frac{\int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2}}{3 \int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}} - \frac{(\int_q \frac{q^2 E_q}{(E_q^2 + \gamma^2)^2})^2}{m^2 \int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2} \int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2}} \right) + \frac{\int_q q^2 \left(\frac{E_q}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2(E_q^2 + 2\gamma^2)}{6m^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right)}{3\gamma \int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}} \end{aligned} \quad (15.92)$$

15.7 Conclusion

On a proposé dans ce travail une méthode alternative pour dériver les équations hydrodynamiques pour un liquide quantique. On a étudié le potentiel effectif pour la densité et le courant puisqu'il contrôle les excitations bosoniques les plus importantes. On a argué du fait que les interactions, en particulier les forces dissipatives, limitent la non-localité de l'action effective à l'aide du libre parcours moyen, ce qui permet d'identifier une densité lagrangienne. Une analyse précise du comportement non-analytique des vertex en énergie, générés par dissipation, ont permis d'établir des équations du mouvement invariante par brisure spontanée de symétrie par renversement temporel. Cette construction a été utilisée pour poser un "ansatz" pour le lagrangien effectif

qui permet d'obtenir une généralisation d'équations d'Euler-Lagrange généralisées et compatibles avec l'hydrodynamique. L'équation du mouvement à l'ordre principal du développement double de Ginzburg-Landau a été comparée à l'équation de Navier-Stokes et on a pu identifier les coefficients de viscosité.

Un certain nombre de questions en suspens subsistent et seront clarifiées ultérieurement. La première question est la relation entre le schéma proposé dans cette thèse pour obtenir les paramètres hydrodynamiques comme les viscosités, à partir de modèles microscopiques et les schémas basés sur l'analyse des fonctions de Green. Les deux approches sont basées sur le comportement infrarouge du propagateur inverse pour le courant, mais la façon dont on l'obtient et dont on l'utilise est différente. En fait, on a inversé la totalité de la matrice 4×4 du propagateur densité-courant en obtenant la partie quadratique de l'action effective, alors que la formule de réponse linéaire n'inclut que le propagateur courant-courant. Le résultat obtenu est que les coefficients de viscosité obtenus sont linéaires dans le propagateur.

L'amélioration la plus importante provient de l'inclusion des degrés de liberté de l'environnement dans la description et de l'utilisation du groupe de renormalisation pour amener la coupure au régime hydrodynamique. Une attention spéciale doit être de mise dans ce cas, car ce régime est non-relativiste et les lois d'échelle sont différentes en espace et en temps et car il faut clarifier la manière dont les dérivées symétrisées font apparaître des dérivées partielles. L'inclusion systématique des effets d'impuretés aux frontières du domaine peuvent rendre ce schéma plus réaliste et général. Enfin, on mentionne un problème formel, la brisure de l'invariance par "boost" galiléen lors de la régularisation. C'est une question particulièrement importante aux grandes distances du régime hydrodynamique où la compréhension de l'origine de la turbulence requiert que toutes les symétries spatio-temporelles doivent être préservées à une échelle microscopique.

Sixième partie

Annexes

Annexe A

Notations

A.1 Quadri-vecteurs

Les quadri-vecteurs, introduits comme $x = x^\mu = (x^0, x)$, $x^0 = t$, $p = p^\mu = (p^0, p)$, $p^0 = -\omega$, et le produit scalaire

$$xp = x^\mu p^\mu = \sum_{\mu} x^\mu p^\mu = x \cdot p - t\omega \quad (\text{A.1})$$

sont strictement non-relativistes, ils apparaissent uniquement pour compactifier les expressions. Les lettres grecs et les lettres du début de l'alphabet latin dénomment les indices des composantes des quadri-vecteurs. Les indices j, k, ℓ, m ainsi n représentent les indices spatiaux.

A.2 Intégrales

Les notations pour les intégrales spatio-temporelles sont

$$\int d^d x = a^d \sum_x = \int_x \quad (\text{A.2})$$

$$\int_x f_x g_x = f \cdot g \quad (\text{A.3})$$

$$\int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} = \frac{1}{V} \sum_p = \int_p, \quad f_p = \int_x e^{-ipx} f_x \quad (\text{A.4})$$

$$f_x = \int_p e^{ipx} f_p \quad (\text{A.5})$$

$$\int_{\tilde{a}} \equiv \int_{(a,x)} = \sum_a \int_x \quad (\text{A.6})$$

Annexe B

Dérivées symétrisées

B.1 Définition

On vérifie aisément que

$$\begin{aligned} \int_x f'_x g_x &= \int_{x,p,q} f_p g_q e^{ix(p+q)} ip = \int_{p,q} \delta_{p+q,0} f_p g_q ip = \int_p f_p g_{-p} ip \\ - \int_x f_x g'_x &= - \int_{x,p,q} f_p g_q e^{ix(p+q)} iq = - \int_{p,q} \delta_{p+q,0} f_p g_q iq = \int_q f_{-q} g_q i(-q) \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

L'intégration par partie dans l'espace réel correspond à utiliser la distribution de Dirac conservant les impulsions et à effectuer le changement $p \rightarrow -p$ dans l'espace des impulsions.

$$\partial_t \rightarrow \hat{\partial}_t = -i\omega \rightarrow -i|\omega| = -i\sqrt{\omega^2} \rightarrow -i\sqrt{(i\partial_t)^2} = \sqrt{\partial_t^2} \quad (\text{B.2})$$

La fonction de Heaviside s'écrit sous forme de Fourier comme

$$\Theta(\omega) = \int \frac{d\tau}{2\pi i} \frac{e^{i\omega\tau}}{\tau - i\epsilon} \quad (\text{B.3})$$

$$\begin{aligned}
(\hat{\partial}_t)_t &= (\sqrt{\partial_t^2})_t \\
&= -i \int_{\omega} e^{-i\omega t} \text{sign}(\omega) \omega \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{-i\omega t} \omega \left(\frac{e^{i\omega\tau}}{\tau - i\epsilon} - \frac{e^{-i\omega\tau}}{\tau + i\epsilon} \right) \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \omega \left(\frac{1}{\tau - i\epsilon} + \frac{1}{\tau + i\epsilon} \right) \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \frac{2\omega\tau}{\tau^2 + \epsilon^2} \\
&= 2\partial_t \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \frac{\tau}{\tau^2 + \epsilon^2} \\
&= 2\partial_t \int \frac{d\tau}{2\pi i} \delta_{\tau-t,0} \frac{\tau}{\tau^2 + \epsilon^2} \\
&= -\frac{i}{\pi} \partial_t \frac{t}{t^2 + \epsilon^2} \\
&= -\frac{i}{\pi} \left(\frac{1}{t^2 + \epsilon^2} - \frac{2t^2}{(t^2 + \epsilon^2)^2} \right) \\
&= \frac{i}{\pi} \frac{t^2 - \epsilon^2}{(t^2 + \epsilon^2)^2} \\
&\approx \frac{i}{\pi} \frac{1}{t^2 + \epsilon^2} \\
&= \frac{i}{\epsilon} \delta_{\epsilon}(t) \tag{B.4}
\end{aligned}$$

$$(\hat{\partial}_0)_{x,y} = -i \delta_{\vec{x},\vec{y}} \int_{\omega} |\omega| e^{i\omega(x^0 - y^0)} = \frac{i}{\pi} \delta_{\vec{x},\vec{y}} \frac{1}{(x^0 - y^0)^2} \tag{B.5}$$

Ce qui élimine le "mauvais" signe de l'intégration par partie

$$\int_t f_t \hat{\delta}_0 g_t = \int_t g_t \hat{\delta}_0 f_t \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}
(\partial_t)_t &= -i \int_{\omega} e^{-i\omega t} \omega \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{-i\omega t} \omega \left(\frac{e^{i\omega\tau}}{\tau - i\epsilon} + \frac{e^{-i\omega\tau}}{\tau - i\epsilon} \right) \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \omega \left(\frac{1}{\tau - i\epsilon} - \frac{1}{\tau + i\epsilon} \right) \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \frac{2i\omega\epsilon}{\tau^2 + \epsilon^2} \\
&= 2\pi \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} \omega e^{i\omega(\tau-t)} \delta_{\tau,0} \\
&= 2i\pi \partial_t \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \delta_{\tau,0} \\
&= 2i\pi \partial_t \int_{\omega} \frac{1}{2\pi i} e^{-i\omega t} \\
&= \partial_t \delta_{t,0}
\end{aligned} \tag{B.7}$$

$$\begin{aligned}
S_t &= -i(\operatorname{sgn}(\omega))_t \\
&= -i \int_{\omega} e^{-i\omega t} \operatorname{sgn}(\omega) \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{-i\omega t} \left(\frac{e^{i\omega\tau}}{\tau - i\epsilon} - \frac{e^{-i\omega\tau}}{\tau - i\epsilon} \right) \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \left(\frac{1}{\tau - i\epsilon} + \frac{1}{\tau + i\epsilon} \right) \\
&= -i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} e^{i\omega(\tau-t)} \frac{2\tau}{\tau^2 + \epsilon^2} \\
&= -2i \int_{\omega} \frac{d\tau}{2\pi i} \delta_{\tau-t,0} \frac{\tau}{\tau^2 + \epsilon^2} \\
&= -\frac{1}{\pi} \frac{t}{t^2 + \epsilon^2} \\
&\approx -\frac{1}{\epsilon} t \delta_{\epsilon}(t)
\end{aligned} \tag{B.8}$$

B.2 Propriétés formelles de $\hat{\partial}$

Soit $f(t) = 0$ pour $t < 0$,

$$f^L(\omega) = \int_0^T dt e^{it\omega} f(t) \tag{B.9}$$

On utilise

$$\begin{aligned}
\hat{\partial}f^L(\omega) &= \int_0^T dt e^{it\omega} \int_0^T dt' \hat{D}(t-t') f(t') \\
&= \int_0^T dt f(t) \int_0^T dt' \hat{D}(t-t') e^{it'\omega} \\
&= \int_0^T dt f(t) \int_{-T}^T dt' \hat{D}(t-t') e^{it'\omega} - \int_0^T dt f(t) \int_{-T}^0 dt' \hat{D}(t-t') e^{it'\omega} \\
&= i|\omega| \int_0^T dt f(t) e^{it\omega} - \frac{i}{\epsilon} \int_0^T dt f(t) \int_{-T}^0 dt' \frac{\epsilon}{\pi} \frac{e^{it'\omega}}{(t-t')^2 + \epsilon^2} \quad (\text{B.10})
\end{aligned}$$

Soit $t'' = t' - t$,

$$\begin{aligned}
\hat{\partial}f^L(\omega) &= i|\omega|f^L(\omega) - \frac{i}{\epsilon} \int_0^T dt e^{it\omega} f(t) \int_{-T-t}^{-t} dt'' \frac{\epsilon}{\pi} \frac{e^{it''\omega}}{t''^2 + \epsilon^2} \\
&\approx i|\omega|f^L(\omega) - \frac{i}{\epsilon} \int_0^T dt e^{it\omega} f(t) \int_{-T-t}^{-t} dt'' e^{it''\omega} \hat{\delta}_\epsilon(t'') \quad (\text{B.11})
\end{aligned}$$

où

$$\hat{\delta}_\epsilon(t) = \frac{\Theta(\epsilon - t)\Theta(\epsilon + t)}{2\epsilon} \quad (\text{B.12})$$

$$\begin{aligned}
\hat{\partial}f^L(\omega) &= i|\omega|f^L(\omega) - \frac{i}{\epsilon} \int_0^T dt e^{it\omega} f(t) \begin{cases} \frac{e^{-it\omega} - e^{-i\epsilon\omega}}{2i\epsilon\omega} & 0 < t < \epsilon \\ 0 & t > \epsilon \end{cases} \\
&= i|\omega|f^L(\omega) - \frac{i}{\epsilon} \int_0^\epsilon dt e^{it\omega} f(t) (-i\omega) \frac{\epsilon - t}{2i\epsilon\omega} \\
&= i|\omega|f^L(\omega) - f(0) \frac{i}{\epsilon} \int_0^\epsilon dt \frac{t - \epsilon}{2\epsilon} \\
&= i|\omega|f^L(\omega) - f(0) \frac{i}{\epsilon} \frac{\frac{\epsilon^2}{2} - \epsilon^2}{2\epsilon} \\
&= i \left(|\omega|f^L(\omega) + \frac{f(0)}{4} \right) \quad (\text{B.13})
\end{aligned}$$

Puisque

$$\begin{aligned}
\int \frac{dt}{t^2 + \epsilon^2} &= \frac{1}{\epsilon} \arctan \frac{t}{\epsilon} \\
\int dx \arctan \frac{x}{\epsilon} &= x \arctan \frac{x}{\epsilon} - \frac{\epsilon}{2} \ln \left(\frac{x^2}{\epsilon^2} + 1 \right) \quad (\text{B.14})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^T dt dt' f(t) \hat{D}(t-t') \Theta(t') g(t') - \int_0^T dt f(t) \Theta(t) \int_{-T}^T dt' \hat{D}(t-t') g(t') \\
&= -\frac{i}{\pi\epsilon} \int_0^T dt f(t) g(t) \left(\arctan \frac{t}{\epsilon} - \frac{\pi}{2} \right) \\
&\approx -\frac{i}{\pi\epsilon} f(0) g(0) \int_0^T dt \left(\arctan \frac{t}{\epsilon} - \frac{\pi}{2} \right) \\
&\approx -\frac{i}{\pi\epsilon} f(0) g(0) \left[\frac{T\pi}{2} - \frac{\epsilon}{2} \ln \left(\frac{T^2}{\epsilon^2} + 1 \right) - \frac{T\pi}{2} \right] \\
&\approx f(0) g(0) \frac{i \ln \frac{T^2}{\epsilon^2}}{2\pi}
\end{aligned} \tag{B.15}$$

Annexe C

Source et action effective

C.1 Modèle

L'hamiltonien est supposé être la somme de trois termes, $H = H_k + H_i + H_r$ où

$$\begin{aligned} H_k &= \int dx \psi^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_x - \mu \right) \psi(x), \\ H_i &= \int dx V(x) \psi^\dagger(x) \psi(x) + \frac{1}{2} \int dx dx' \psi^\dagger(x') \psi(x') U(x', x) \psi^\dagger(x) \psi(x). \end{aligned} \tag{C.1}$$

La représentation par intégrale de chemin de l'amplitude vide-vide est

$$Z = \int \mathcal{D}[\psi] \mathcal{D}[\psi^\dagger] \mathcal{D}[u] e^{\frac{i}{\hbar} S[\psi^\dagger, \psi, u]}, \tag{C.2}$$

après l'introduction d'un champ auxiliaire $u(x)$ avec

$$\begin{aligned} S[\psi^\dagger, \psi, u] &= \int d^4x \psi^\dagger(x) \left[i\hbar \partial_t + \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \mu - V(x) - u(x) \right) \right] \psi(x) \\ &\quad - \frac{1}{2} \int d^4x d^4y u(x) U^{-1}(x, y) u(y), \end{aligned} \tag{C.3}$$

où

$$\int d^4z U(x, z) U^{-1}(z, y) = \delta(x - y). \tag{C.4}$$

La variable de champ $\psi(x)$ est un nombre complexe ou grassmanien, pour des particules de spin entier ou demi-entier.

$$e^{\frac{i}{\hbar}W[\sigma]} = \int \mathcal{D}[\psi]\mathcal{D}[\psi^\dagger]\mathcal{D}[u] e^{\frac{i}{\hbar}\psi^\dagger \cdot (G^{-1} - u - V + \phi) \cdot \psi - \frac{i}{2\hbar}u \cdot U^{-1} \cdot u}, \quad (\text{C.5})$$

On régularise sur réseau :

$$S[\psi^\dagger, \psi, u] = a_s^6 a_t^2 \sum_{x,y} \psi_{s,x}^\dagger [G_{x,y}^{-1} - \delta_{x,y}(u_x + V_x)] \psi_{s,y} - \frac{a_s^6 a_t^2}{2} \sum_{x,y} u_x U_{x,y}^{-1} u_y, \quad (\text{C.6})$$

$$G_{x',x}^{-1} = i\hbar \frac{1}{a_\tau} \left(\delta_{x',x}^K - \delta_{x',x+\hat{0}}^K \right) + \frac{\hbar^2}{2ma^2} \sum_{j>0} \left(\delta_{x'+\hat{j},x}^K + \delta_{x'-\hat{j},x}^K - 2\delta_{x',x}^K \right) + \mu \delta_{x',x}^K, \quad (\text{C.7})$$

$$\begin{aligned} \psi^\dagger \cdot \phi \cdot \psi &= \psi^\dagger \cdot \sigma_0 \cdot \mathcal{O}_0 \cdot \psi + \psi^\dagger \cdot \sigma_j \cdot \mathcal{O}_j \cdot \psi, \\ \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{0,x} \cdot \psi &= \psi_{x+\hat{0}}^\dagger \psi_x, \\ \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{j,x} \cdot \psi &= \frac{i\hbar}{2ma} \sum_{j>0} \left[\psi_{x+\hat{j}}^\dagger \psi_x - \psi_x^\dagger \psi_{x+\hat{j}} \right]. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

$$(\mathcal{O}_{0,x})_{y,z} = \delta_{x+\hat{0},y} \delta_{x,z}, \quad (\mathcal{O}_{j,x})_{y,z} = \frac{i\hbar}{2ma} (\delta_{y,x+\hat{j}} \delta_{z,x} - \delta_{y,x} \delta_{z,x+\hat{j}}). \quad (\text{C.9})$$

On place une coupure dans l'espace des impulsions :

$$\begin{aligned} \psi^\dagger \cdot \phi \cdot \psi &= \psi^\dagger \cdot \sigma_0 \cdot \mathcal{O}_0 \cdot \psi + \psi^\dagger \cdot \sigma_j \cdot \mathcal{O}_j \cdot \psi, \\ \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{0,x} \cdot \psi &= \psi_x^\dagger \psi_x, \\ \psi^\dagger \cdot \mathcal{O}_{j,x} \cdot \psi &= \frac{i\hbar}{2ma} [\partial_j \psi_x^\dagger \psi_x - \psi_x^\dagger \partial_j \psi_x]. \end{aligned} \quad (\text{C.10})$$

$$\Gamma[\rho] = -W[\sigma] + \sigma_{\bar{\alpha}} \cdot \rho_{\bar{\alpha}}, \quad \rho_{\alpha,x} = \frac{\delta W[\sigma]}{\delta \sigma_{\alpha,x}}. \quad (\text{C.11})$$

La transformation inverse est similaire à (C.11) excepté que la seconde équation est remplacée par

$$\sigma_{\alpha,x} = \frac{\delta \Gamma[\rho]}{\delta \rho_{\alpha,x}}. \quad (\text{C.12})$$

C.2 Particules non-interagissantes

On se place dans le cas le plus simple, celui où les particules sont non-interagissantes et les corrélations dans la densité et le courant apparaissent uniquement en raison de la statistique d'échange. Cette dernière est prise en compte au travers de $\nu = -1$ pour les fermions et de $\nu = +1$ pour les bosons.

On prend $U = u = V = 0$ et on trouve pour les fermions

$$W_{ni}[\sigma] = i\hbar\nu \text{Tr} \log[G^{-1} + \phi] = i\hbar\nu \text{Tr} \log G^{-1} - i\hbar\nu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n \quad (\text{C.13})$$

Le changement de variable est effectué en inversant la relation

$$\rho_{\tilde{a}} = i\hbar\nu \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}], \quad (\text{C.14})$$

où $\tilde{a} = (a, x)$. On utilise le propagateur particule-trou,

$$\tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{b}} = i\hbar\nu \text{Tr}[G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}} \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{b}}] \quad (\text{C.15})$$

et on cherche une inversion sous la forme d'une série fonctionnelle en puissance de $r = \tilde{G}^{-1} \cdot (\rho - \rho^*)$,

$$\sigma_{\tilde{a}} = \sum_{n=1}^{\infty} \int_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} \frac{1}{n!} A_{\tilde{a}, \tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} r_{\tilde{a}_1} \cdots r_{\tilde{a}_n} \quad (\text{C.16})$$

C.2.1 Développement de σ

On insère (C.16) dans (C.14) afin d'isoler les différentes puissances de r et d'identifier les coefficients A ,

$$\rho_{\tilde{a}} = \int_{\tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{b}} r_{\tilde{b}} + \rho_{\tilde{a}}^* = i\hbar\nu \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}]. \quad (\text{C.17})$$

Ordre $\mathcal{O}(r^0)$

Pour l'ordre $\mathcal{O}(r^0)$ on trouve

$$\rho_{\tilde{a}}^* = i\hbar\nu \text{Tr}[G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \quad (\text{C.18})$$

Ainsi

$$\begin{aligned}
\int_{\tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{b}} r_{\tilde{b}} &= i\hbar\nu \left[-\text{Tr} [(G \cdot \phi) \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] + \text{Tr} [(G \cdot \phi)^2 \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] - \text{Tr} [(G \cdot \phi)^3 \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \right. \\
&\quad \left. + \text{Tr} [(G \cdot \phi)^4 \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] + \sum_{n=5}^{\infty} (-1)^n \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \right] \\
&= i\hbar\nu \left[- \int_{a_1, \dots, a_4} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} + \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \phi_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \right. \\
&\quad - \int_{a_1, \dots, a_8} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \phi_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \phi_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} \\
&\quad + \int_{a_1, \dots, a_{10}} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \phi_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \phi_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} \phi_{a_8 a_9} G_{a_9 a_{10}} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_{10} a_1} \\
&\quad \left. + \sum_{n=5}^{\infty} (-1)^n \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \right] \\
&= i\hbar\nu \left[- \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} \right. \\
&\quad + \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\
&\quad - \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \sigma_{\tilde{e}} (\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} \\
&\quad + \int_{a_1, \dots, a_{10}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} \\
&\quad G_{a_5 a_6} \sigma_{\tilde{e}} (\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} \sigma_{\tilde{f}} (\mathcal{O}_{\tilde{f}})_{a_8 a_9} G_{a_9 a_{10}} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_{10} a_1} \\
&\quad \left. + \sum_{n=5}^{\infty} (-1)^n \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \right]
\end{aligned} \tag{C.19}$$

Ordre $\mathcal{O}(r)$

$$\int_{\tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{b}} r_{\tilde{b}} = -i\hbar\nu \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{d}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} \tag{C.20}$$

En insérant (C.15) on obtient

$$\int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{b}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4, a_1} r_{\tilde{b}} = - \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{d}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} \tag{C.21}$$

Une permutation cyclique des indices nous permet d'écrire

$$\int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{b}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4, a_1} r_{\tilde{b}} = - \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_4 a_1} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} \quad (\text{C.22})$$

On aboutit immédiatement à

$$A_{\tilde{c}, \tilde{d}} = -\delta_{\tilde{c}, \tilde{d}} \quad (\text{C.23})$$

Ordre $\mathcal{O}(r^2)$

Cette contribution provient de

$$\begin{aligned} & - \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} \\ & + \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \end{aligned} \quad (\text{C.24})$$

En se servant de (C.23) on obtient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} \\ & = \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{e}} r_{\tilde{e}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{f}} r_{\tilde{f}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\ & = \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} r_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} r_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \end{aligned} \quad (\text{C.25})$$

qui peut être récrit autrement,

$$\int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} = 2 \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}} \frac{G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5}}{G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}}} \quad (\text{C.26})$$

On applique l'opérateur de différentiation fonctionnelle $\delta^2_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta}}$ aux deux côtés de cette équation,

$$\begin{aligned}
& \int_{a_1,\dots,a_4,\tilde{c}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} (A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} + A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}}) \\
&= 2 \left[\int_{a_1,\dots,a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \right. \\
& \left. + \int_{a_1,\dots,a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \right]
\end{aligned} \tag{C.27}$$

Les symétries de $A_{\tilde{c},\dots}$ nous permettent de simplifier cette équation en

$$2 \cdot \int_{a_1,\dots,a_4,\tilde{c}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} = 2 \cdot \frac{2}{i\hbar\nu} \cdot S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \tag{C.28}$$

qui est équivalent à

$$\int_{\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{a}} = 2 \cdot S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \tag{C.29}$$

Finalement on trouve

$$A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} = 2 \cdot \int_{\tilde{a}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{a}}^{-1} S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \tag{C.30}$$

avec

$$S_{\tilde{a},\tilde{a}_1,\tilde{a}_2,\dots,\tilde{a}_n} = \frac{i\hbar\nu}{n!} \sum_{P \in S_n} \text{Tr}(G\mathcal{O}_{\tilde{a}_{P(1)}} G\mathcal{O}_{\tilde{a}_{P(2)}} \cdots G\mathcal{O}_{\tilde{a}_{P(n)}} G\mathcal{O}_{\tilde{a}}), \tag{C.31}$$

où la somme s'entend sur toutes les permutations des n indices.

$\mathcal{O}(r^3)$

La contribution à r^3 provient uniquement de

$$\begin{aligned}
& - \int_{a_1,\dots,a_4,\tilde{c}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} + \int_{a_1,\dots,a_6,\tilde{c},\tilde{d}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\
& - \int_{a_1,\dots,a_8,\tilde{c},\tilde{d},\tilde{e}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \sigma_{\tilde{e}}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1}
\end{aligned} \tag{C.32}$$

Ce qui donne

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} \\
&= \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{e}, \tilde{f}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{g}} r_{\tilde{g}} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\
&+ \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{e}} r_{\tilde{e}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{f}, \tilde{g}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\
&- \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{f}} r_{\tilde{f}} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{g}} r_{\tilde{g}} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} A_{\tilde{e}, \tilde{h}} r_{\tilde{h}} (\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} \\
&= -\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{c}, \tilde{e}, \tilde{f}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} \\
&\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{d}, \tilde{f}, \tilde{g}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} \\
&+ \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}}
\end{aligned} \tag{C.33}$$

On applique l'opérateur de différentiation fonctionnelle $\delta^3_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}$ aux deux côtés de cette équation et on utilise la symétrie de $(A_{\tilde{c}, \cdot, \cdot})$ et $(A_{\tilde{c}, \cdot, \cdot})$

$$\begin{aligned}
& \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \\
&= - \left[\int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \right. \\
&+ \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} \\
&+ \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \\
&+ \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \\
&+ \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} \\
&+ \left. \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \right] \\
&+ \frac{3!}{i\hbar\nu} S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}
\end{aligned} \tag{C.34}$$

$$\int_{\tilde{c}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{a}} = 3! S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} - 2 \left[\int_{\tilde{c}} S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} + \int_{\tilde{c}} S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} + \int_{\tilde{c}} S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \right] \tag{C.35}$$

En utilisant (C.29) on trouve

$$\int_{\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{a}} = 3! S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} - 4 \int_{\tilde{c},\tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{d}}^{-1} (S_{\tilde{d},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha}} + S_{\tilde{d},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\beta}} + S_{\tilde{d},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\gamma}}) \quad (\text{C.36})$$

$$A_{\tilde{b},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} = \int_{\tilde{a}} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{a}}^{-1} \left(3! S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} - 4 \int_{\tilde{c},\tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{d}}^{-1} (S_{\tilde{d},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha}} + S_{\tilde{d},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\beta}} + S_{\tilde{d},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\gamma}}) \right) \quad (\text{C.37})$$

$\mathcal{O}(r^4)$

La contribution à r^4 provient uniquement de

$$\begin{aligned} & - \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} + \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\ & - \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \sigma_{\tilde{e}}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} \\ & + \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2} \sigma_{\tilde{c}}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \sigma_{\tilde{d}}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \sigma_{\tilde{e}}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} \sigma_{\tilde{f}}(\mathcal{O}_{\tilde{f}})_{a_9 a_{10}} G_{a_{11} a_{12}}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_{12} a_{13}} \end{aligned} \quad (\text{C.38})$$

Ce qui donne

$$\begin{aligned} & \frac{1}{4!} \int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} \tilde{d} \tilde{r} \tilde{e} \tilde{r} \tilde{f} \tilde{r} \tilde{g}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_4 a_1} \\ & = \frac{1}{4} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{e}, \tilde{f}} \tilde{r} \tilde{e} \tilde{r} \tilde{f}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{g}, \tilde{h}} \tilde{r} \tilde{g} \tilde{r} \tilde{h}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\ & + \frac{1}{3!} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{e}} \tilde{r} \tilde{e}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} \tilde{r} \tilde{f} \tilde{r} \tilde{g} \tilde{r} \tilde{h}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\ & + \frac{1}{3!} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} \tilde{r} \tilde{e} \tilde{r} \tilde{f} \tilde{r} \tilde{g}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{h}} \tilde{r} \tilde{h}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_6 a_1} \\ & - \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}, \tilde{i}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{f}, \tilde{g}} \tilde{r} \tilde{f} \tilde{r} \tilde{g}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{h}} \tilde{r} \tilde{h}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} A_{\tilde{e}, \tilde{i}} \tilde{r} \tilde{i}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} \\ & - \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}, \tilde{i}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{f}} \tilde{r} \tilde{f}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{g}, \tilde{h}} \tilde{r} \tilde{g} \tilde{r} \tilde{h}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} A_{\tilde{e}, \tilde{i}} \tilde{r} \tilde{i}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} \\ & - \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}, \tilde{i}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{f}} \tilde{r} \tilde{f}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{g}} \tilde{r} \tilde{g}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} A_{\tilde{e}, \tilde{h}, \tilde{i}} \tilde{r} \tilde{h} \tilde{r} \tilde{i}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} \\ & + \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}, \tilde{i}} G_{a_1 a_2} A_{\tilde{c}, \tilde{f}} \tilde{r} \tilde{f}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} A_{\tilde{d}, \tilde{g}} \tilde{r} \tilde{g}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_4 a_5} \\ & G_{a_5 a_6} A_{\tilde{e}, \tilde{h}} \tilde{r} \tilde{h}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} A_{\tilde{f}, \tilde{i}} \tilde{r} \tilde{i}(\mathcal{O}_{\tilde{f}})_{a_7 a_8} G_{a_8 a_9}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_9 a_{10}} \end{aligned} \quad (\text{C.39})$$

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{2} \cdot 2 \cdot \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{e}} \left(G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \right. \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\delta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\delta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\delta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\delta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \\
& + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\delta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} \\
& \left. + G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\delta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{e}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_8 a_1} A_{\tilde{e}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \right) \\
& + \frac{4!}{i\hbar\nu} S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}}
\end{aligned} \tag{C.43}$$

On obtient

$$\begin{aligned}
\int_{\tilde{c}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{a}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} &= 4! S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} - 3! \cdot \int_{\tilde{c}} \times (S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \\
& + S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} + S_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}}) \\
& + 4i\hbar\nu \cdot \int_{\tilde{c}, \tilde{d}} \text{Tr}(G\mathcal{O}_{\tilde{c}}G\mathcal{O}_{\tilde{d}}G\mathcal{O}_{\tilde{a}}) \\
& \times (A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{d}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} \\
& + A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} + A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{d}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{c}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \\
& + A_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \\
& + A_{\tilde{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{d}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}}) \\
& - 2 \cdot \int_{\tilde{c}} (S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{c}} A_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{c}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{c}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\delta}, \tilde{c}} A_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}})
\end{aligned} \tag{C.44}$$

$$\begin{aligned}
A_{\tilde{b},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} &= \int_{\tilde{a}} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{a}}^{-1} \left(4! S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} - 3! \int_{\tilde{c}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} A_{\tilde{c},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} A_{\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\delta}} A_{\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} \right. \\
&\quad + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} + S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} \\
&\quad + 4 \cdot \int_{\tilde{c},\tilde{d}} S_{\tilde{a},\tilde{c},\tilde{d}} (A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta}} A_{\tilde{d},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma}} A_{\tilde{d},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} + A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\delta}} A_{\tilde{d},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}}) \\
&\quad \left. - 2 \int_{\tilde{c}} S_{\tilde{a},\tilde{\alpha},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\beta},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{\beta},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\gamma},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{\gamma},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\delta}} + S_{\tilde{a},\tilde{\delta},\tilde{c}} A_{\tilde{c},\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} \right)
\end{aligned} \tag{C.45}$$

C.2.2 Action effective

$$\begin{aligned}
\Gamma[\rho] &= -W[\sigma] + \sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} \\
&= -i\hbar\nu \text{Tr} \log[G + \phi]^{-1} = -i\hbar\nu \text{Tr} \log G^{-1} + i\hbar\nu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n + \sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}}
\end{aligned} \tag{C.46}$$

L'action effective peut être réécrite comme

$$\Gamma[\rho] = \Gamma_0 + \sum_{n=2}^{\infty} \int_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} \frac{1}{n!} \Gamma_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} (\rho - \rho^*)_{\tilde{a}_1} \cdots (\rho - \rho^*)_{\tilde{a}_n} \tag{C.47}$$

$$\begin{aligned}
&\Gamma_0 + \sum_{n=2}^{\infty} \int_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} \frac{1}{n!} \Gamma_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} (\rho - \rho^*)_{\tilde{a}_1} \cdots (\rho - \rho^*)_{\tilde{a}_n} \\
&= -i\hbar\nu \text{Tr} \log G^{-1} + i\hbar\nu \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n + \sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} \\
&= -i\hbar\nu \text{Tr} \log G^{-1} + i\hbar\nu \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n \\
&\quad + \left[\sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} - i\hbar\nu \text{Tr}(G \cdot \phi) \right]
\end{aligned} \tag{C.48}$$

qui peut être transformée en

$$\begin{aligned}
& \Gamma_0 + \sum_{n=2}^{\infty} \int_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} \frac{1}{n!} \Gamma_{\tilde{a}_1, \dots, \tilde{a}_n} \tilde{G}_{\tilde{a}_1, \tilde{b}_1} r_{\tilde{b}_1} \cdots \tilde{G}_{\tilde{a}_n, \tilde{b}_n} r_{\tilde{b}_n} \\
&= -i\hbar\nu \text{Tr} \log G^{-1} + i\hbar\nu \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr}(G \cdot \phi)^n \\
&+ \left[\sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} - i\hbar\nu \text{Tr}(G \cdot \phi) \right] \\
&= -i\hbar\nu \text{Tr} \log G^{-1} + i\hbar\nu \left[\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_4} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \phi_{a_4 a_1} \right. \\
&\quad - \frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \phi_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \phi_{a_6 a_1} \\
&\quad + \frac{1}{4} \int_{a_1, \dots, a_8} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} \phi_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6} \phi_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8} \phi_{a_8 a_1} \\
&\quad \left. + \sum_{n=5}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n} \text{Tr} [(G \cdot \phi)^n \cdot G \cdot \mathcal{O}_{\tilde{a}}] \right] + \left[\sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2} G_{a_1 a_2} \phi_{a_2 a_1} \right]
\end{aligned} \tag{C.49}$$

$\mathcal{O}(\rho^0)$

$$\Gamma_0 = -i\hbar\nu \text{Tr} \log G^{-1} \tag{C.50}$$

$\mathcal{O}(\rho^2)$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} \Gamma_{\tilde{a}, \tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{c}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} &= \frac{1}{2} i\hbar\nu \left[\text{Tr}(G \cdot \phi)^2 \right] \\
&= \frac{1}{2} i\hbar\nu \left[\int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{c}} A_{\tilde{b}, \tilde{d}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} \right] \\
&= \frac{1}{2} i\hbar\nu \left[\int_{a_1, \dots, a_4, \tilde{a}, \tilde{b}} G_{a_1 a_2} (\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4} (\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} r_{\tilde{a}} r_{\tilde{b}} \right]
\end{aligned} \tag{C.51}$$

On applique l'opérateur de différentiation fonctionnelle $\delta^2_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta}}$ aux deux côtés

$$\begin{aligned}
\int_{\tilde{a},\tilde{b}} \Gamma_{\tilde{a},\tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{\alpha}} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{\beta}} &= i\hbar\nu \int_{a_1,\dots,a_4} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_1} \\
&= i\hbar\nu \text{Tr}(G \mathcal{O}_{\tilde{\alpha}} G \mathcal{O}_{\tilde{\beta}}) \\
&= \tilde{G}_{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}
\end{aligned} \tag{C.52}$$

$$\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b}} = \tilde{G}_{\tilde{a}\tilde{b}}^{-1} \tag{C.53}$$

$\mathcal{O}(\rho^3)$

La seule contribution à r^3 provient de

$$\frac{1}{3!} \int_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c},\tilde{d},\tilde{e},\tilde{f}} \Gamma_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} \tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{e}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{f}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} = i\hbar\nu \left(\frac{1}{2} \text{Tr}(G \cdot \phi)^2 - \frac{1}{3} \text{Tr}(G \cdot \phi)^3 \right) + \sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} - \text{Tr}(G \cdot \phi) \tag{C.54}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{3!} \int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} \Gamma_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{b}, \tilde{e}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{f}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} \\
&= i\hbar\nu \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{d}} A_{\tilde{b}, \tilde{e}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} \right. \\
&+ \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{c}} A_{\tilde{b}, \tilde{d}, \tilde{e}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} \\
&- \left. \frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{d}} A_{\tilde{b}, \tilde{e}} A_{\tilde{c}, \tilde{f}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[\int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} \right] \\
&= i\hbar\nu \left[-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} \right. \\
&- \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{b}, \tilde{d}, \tilde{e}} r_{\tilde{a}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} \\
&+ \left. \frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} r_{\tilde{a}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} \right] \\
&+ \frac{1}{2} \left[\int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} \right]
\end{aligned}
\tag{C.55}$$

$$\begin{aligned}
\int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} \Gamma_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}} \tilde{G}_{\tilde{b}, \tilde{\beta}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{\gamma}} = i\hbar\nu \left[-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \right. \\
-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} \\
-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \\
-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{b}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_1} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_2 a_3} A_{\tilde{b}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \\
-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{b}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_1} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_2 a_3} A_{\tilde{b}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} \\
-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{b}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_1} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_2 a_3} A_{\tilde{b}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} \\
+\frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_6 a_1} \\
+\frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_6 a_1} \\
+\frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_6 a_1} \\
+\frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_6 a_1} \\
+\frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_6 a_1} \\
+\frac{1}{3} \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{\gamma}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{\alpha}})_{a_6 a_1} \left. \right] \\
+\delta_{\tilde{\alpha}} \left[\int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2, \tilde{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} \right]
\end{aligned} \tag{C.56}$$

$$\begin{aligned}
\int_{\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}} \Gamma_{\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}} \tilde{G}_{\bar{a}, \bar{\alpha}} \tilde{G}_{\bar{b}, \bar{\beta}} \tilde{G}_{\bar{c}, \bar{\gamma}} &= i\hbar\nu \left[-\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \bar{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{\alpha}})_{a_4 a_1} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} \right. \\
&\quad -\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \bar{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{\beta}})_{a_4 a_1} A_{\bar{a}, \bar{\alpha}, \bar{\gamma}} \\
&\quad -\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \bar{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{\gamma}})_{a_4 a_1} A_{\bar{a}, \bar{\alpha}, \bar{\beta}} \\
&\quad -\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \bar{b}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{\alpha}})_{a_4 a_1} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{b}})_{a_2 a_3} A_{\bar{b}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} \\
&\quad -\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \bar{b}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{\beta}})_{a_4 a_1} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{b}})_{a_2 a_3} A_{\bar{b}, \bar{\alpha}, \bar{\gamma}} \\
&\quad \left. -\frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \bar{b}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{\gamma}})_{a_4 a_1} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{b}})_{a_2 a_3} A_{\bar{b}, \bar{\alpha}, \bar{\beta}} \right. \\
&\quad + \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{\beta}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\bar{\gamma}})_{a_6 a_1} \\
&\quad \left. + \int_{a_1, \dots, a_6} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{\alpha}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\bar{\gamma}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\bar{\beta}})_{a_6 a_1} \right] \\
&\quad + \delta_{\bar{\alpha}} \left[\int_{\bar{a}} \rho_{\bar{a}} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2, \bar{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{a}})_{a_2 a_1} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} \right]
\end{aligned} \tag{C.57}$$

Le dernier terme du membre de droite est

$$\begin{aligned}
\delta_{\bar{\alpha}} \left(\int_{\bar{a}} \rho_{\bar{a}} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2, \bar{a}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\bar{a}})_{a_2 a_1} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} \right) &= \delta_{\bar{\alpha}} \left(\int_{\bar{a}} \rho_{\bar{a}} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} - \int_{\bar{a}} \rho_{\bar{a}}^* A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} \right) \\
&= \delta_{\bar{\alpha}} \int_{\bar{a}, \bar{b}} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} \tilde{G}_{\bar{a}, \bar{b}} r_{\bar{b}} \\
&= \int_{\bar{a}} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} \tilde{G}_{\bar{a}, \bar{\alpha}} \\
&= 2S_{\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}}
\end{aligned} \tag{C.58}$$

$$\begin{aligned}
\int_{\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}} \Gamma_{\bar{a}, \bar{b}, \bar{c}} \tilde{G}_{\bar{a}, \bar{\alpha}} \tilde{G}_{\bar{b}, \bar{\beta}} \tilde{G}_{\bar{c}, \bar{\gamma}} &= 2 \left[S_{\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} + S_{\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} - \int_{\bar{a}} (\tilde{G}_{\bar{a}, \bar{\alpha}} A_{\bar{a}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}} + \tilde{G}_{\bar{a}, \bar{\beta}} A_{\bar{a}, \bar{\alpha}, \bar{\gamma}} + \tilde{G}_{\bar{a}, \bar{\gamma}} A_{\bar{a}, \bar{\alpha}, \bar{\beta}}) \right] \\
&= 2 \left[2S_{\bar{\beta}, \bar{\gamma}, \bar{\alpha}} - (S_{\bar{\beta}, \bar{\gamma}, \bar{\alpha}} + S_{\bar{\gamma}, \bar{\alpha}, \bar{\beta}} + S_{\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}}) \right] \\
&= -2S_{\bar{\alpha}, \bar{\beta}, \bar{\gamma}}
\end{aligned} \tag{C.59}$$

Ce qui donne

$$\begin{aligned}\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} &= -2 \int_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} \tilde{G}_{\tilde{\alpha},\tilde{a}}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{\beta},\tilde{b}}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{\gamma},\tilde{c}}^{-1} S_{\tilde{\alpha},\tilde{\beta},\tilde{\gamma}} \\ &= -2\tilde{S}_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}}\end{aligned}\tag{C.60}$$

avec

$$\tilde{S}_{\tilde{a}_1,\tilde{a}_2,\dots,\tilde{a}_n} = \int_{\tilde{b}_1,\tilde{b}_2,\dots,\tilde{b}_n} \tilde{G}_{\tilde{b}_1,\tilde{a}_1}^{-1} \tilde{G}_{\tilde{b}_2,\tilde{a}_2}^{-1} \dots \tilde{G}_{\tilde{b}_n,\tilde{a}_n}^{-1} S_{\tilde{b}_1,\tilde{b}_2,\dots,\tilde{b}_n}\tag{C.61}$$

$\mathcal{O}(\rho^4)$

$$\begin{aligned}\frac{1}{4!} \int_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c},\tilde{d},\tilde{e},\tilde{f}} \Gamma_{\tilde{a},\tilde{b},\tilde{c}} \tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{b},\tilde{e}} \tilde{G}_{\tilde{c},\tilde{f}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} &= i\hbar\nu \left[\frac{1}{2} \text{Tr}(G \cdot \phi)^2 - \frac{1}{3} \text{Tr}(G \cdot \phi)^3 + \frac{1}{4} \text{Tr}(G \cdot \phi)^4 \right] \\ &+ \sigma_{\tilde{\alpha}} \cdot \rho_{\tilde{\alpha}} - \text{Tr}(G \cdot \phi)\end{aligned}$$

(C.62)

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{4!} \int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} \Gamma_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{e}} \tilde{G}_{\tilde{b}, \tilde{f}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{g}} \tilde{G}_{\tilde{d}, \tilde{h}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} r_{\tilde{h}} \\
&= i\hbar\nu \left[\frac{1}{2} \cdot \frac{1}{4} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{d}} A_{\tilde{b}, \tilde{e}, \tilde{f}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} \right. \\
&\quad - \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{d}, \tilde{e}} A_{\tilde{b}, \tilde{f}} A_{\tilde{c}, \tilde{g}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} \\
&\quad - \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{d}} A_{\tilde{b}, \tilde{e}, \tilde{f}} A_{\tilde{c}, \tilde{g}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} \\
&\quad - \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{d}} A_{\tilde{b}, \tilde{e}} A_{\tilde{c}, \tilde{f}, \tilde{g}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} \\
&\quad \left. + \frac{1}{4} \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_8 a_1} \right. \\
&\quad \left. A_{\tilde{a}, \tilde{e}} A_{\tilde{b}, \tilde{f}} A_{\tilde{c}, \tilde{g}} A_{\tilde{d}, \tilde{h}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} r_{\tilde{h}} \right] \\
&\quad + \frac{1}{3!} \left[\int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} \right] \\
&= i\hbar\nu \left[\frac{1}{8} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{c}, \tilde{d}} A_{\tilde{b}, \tilde{e}, \tilde{f}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} \right. \\
&\quad - \frac{1}{6} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{d}, \tilde{e}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} r_{\tilde{e}} \\
&\quad - \frac{1}{6} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{e}, \tilde{f}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{b}, \tilde{e}, \tilde{f}} r_{\tilde{a}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{e}} r_{\tilde{f}} \\
&\quad - \frac{1}{6} \int_{a_1, \dots, a_6, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{f}, \tilde{g}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_1} A_{\tilde{c}, \tilde{f}, \tilde{g}} r_{\tilde{a}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{f}} r_{\tilde{g}} \\
&\quad \left. + \frac{1}{4} \int_{a_1, \dots, a_8, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}, \tilde{e}, \tilde{f}, \tilde{g}, \tilde{h}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_3} G_{a_3 a_4}(\mathcal{O}_{\tilde{b}})_{a_4 a_5} G_{a_5 a_6}(\mathcal{O}_{\tilde{c}})_{a_6 a_7} G_{a_7 a_8}(\mathcal{O}_{\tilde{d}})_{a_8 a_1} r_{\tilde{a}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} \right] \\
&\quad + \frac{1}{3!} \left[\int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} - i\hbar\nu \int_{a_1, a_2, \tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} G_{a_1 a_2}(\mathcal{O}_{\tilde{a}})_{a_2 a_1} A_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} r_{\tilde{b}} r_{\tilde{c}} r_{\tilde{d}} \right]
\end{aligned} \tag{C.63}$$

$$\begin{aligned}
& \int_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} \Gamma_{\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}, \tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}} \tilde{G}_{\tilde{b}, \tilde{\beta}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{\gamma}} \tilde{G}_{\tilde{d}, \tilde{\delta}} \\
&= \int_{\tilde{a}, \tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{b}} (A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{b}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{b}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{b}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}) \\
&\quad - \frac{1}{6} \int_{\tilde{a}} 4 \cdot (S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\delta}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}) \\
&\quad - \frac{1}{6} \int_{\tilde{a}} 4 \cdot (S_{\tilde{\alpha}, \tilde{a}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\alpha}, \tilde{a}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\alpha}, \tilde{a}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} + S_{\tilde{\beta}, \tilde{a}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\gamma}, \tilde{a}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\delta}, \tilde{a}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}) \\
&\quad - \frac{1}{6} \int_{\tilde{a}} 4 \cdot (S_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}, \tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\alpha}, \tilde{\delta}, \tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} + S_{\tilde{\beta}, \tilde{\alpha}, \tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\gamma}, \tilde{\alpha}, \tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{\delta}, \tilde{\alpha}, \tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}) \\
&\quad + \frac{1}{4} \cdot 3! \cdot 4 (S_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}}) + \delta_{\tilde{\alpha}} \left[\int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} - \int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}}^* A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \right] \\
&= \int_{\tilde{a}, \tilde{b}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{b}} (A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{b}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{b}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + A_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{b}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}) \\
&\quad - 2 \cdot \int_{\tilde{a}} (S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\gamma}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{a}, \tilde{\delta}, \tilde{\alpha}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}}) \\
&\quad + 3! S_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} + \delta_{\tilde{\alpha}} \left(\int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} - \int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}}^* A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \right)
\end{aligned} \tag{C.64}$$

Le dernier terme du membre de droite est

$$\begin{aligned}
\delta_{\tilde{\alpha}} \left(\int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} - \int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}}^* A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \right) &= \delta_{\tilde{\alpha}} \left(\int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} - \int_{\tilde{a}} \rho_{\tilde{a}}^* A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \right) \\
&= \delta_{\tilde{\alpha}} \int_{\tilde{a}, \tilde{b}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{b}} r_{\tilde{b}} \\
&= \int_{\tilde{a}} A_{\tilde{a}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} \tilde{G}_{\tilde{a}, \tilde{\alpha}} \\
&= 3! S_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}} - 4 \int_{\tilde{c}, \tilde{d}} \tilde{G}_{\tilde{c}, \tilde{d}}^{-1} (S_{\tilde{d}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} S_{\tilde{c}, \tilde{\alpha}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\gamma}} S_{\tilde{c}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} + S_{\tilde{d}, \tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} S_{\tilde{c}, \tilde{\gamma}, \tilde{\delta}})
\end{aligned} \tag{C.65}$$

Annexe D

Lagrangien

D.1 Lagrangien

On présente dans cette section la dérivation des ordres $\mathcal{O}((\rho - \rho^*)^3)$ et $\mathcal{O}(\partial^3)$ du lagrangien effectif apparaissant dans le développement en gradient de l'action (15.10). On cherche un lagrangien de la forme

$$L = L^{(1)} + L^{(2)} + L^{(3)} \quad (\text{D.1})$$

où $L^{(n)}$ contient les termes $\mathcal{O}((\rho - \rho^*)^n)$. Il n'y a qu'une seule contribution qui préserve l'invariance par rotation dans $\mathcal{O}(\rho)$,

$$L^{(1)} = \Gamma_0(n - n^*) \quad (\text{D.2})$$

L'invariance rotationnelle peut être utilisée pour réduire la structure tensorielle des coefficients des termes d'ordre supérieur. Tous les coefficients tels que Γ_0 sont constants en espace et en temps et sont des fonctions de $\rho^* = (n^*, 0)$ seulement.

D.1.1 $\mathcal{O}(\rho^2)$

On démarre avec la partie quadratique de l'action et on considère les contributions selon les puissances des dérivées. Les coefficients à l'ordre $\mathcal{O}(\partial^0)$ sont

$$\begin{aligned} \Gamma_{0,0} &= \frac{1}{2} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0)}, \\ \Gamma_{j,k} &= \frac{1}{2} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{0,2}, \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

où

$$C_{0,2} = \frac{1}{6} \hat{\Gamma}_{(j,0),(j,0)}. \quad (\text{D.4})$$

L'ordre $\mathcal{O}(\partial)$ donne

$$\begin{aligned}
\Gamma_{0,0}^0 &= -\frac{i}{2}\partial_{p_1^0}\hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{j,k}^0 &= -\frac{i}{2}\partial_{p_1^0}\hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0)} = \delta_{j,k}C_{0,2}^t, \\
\Gamma_{j,0}^a &= -\frac{i}{2}\partial_{p_1^a}\hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0)} = \delta_{a,j}C_{1,1}^s, \\
\Gamma_{0,j}^a &= -\frac{i}{2}\partial_{p_1^a}\hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0)} = \delta_{a,j}C_{1,1}^s,
\end{aligned} \tag{D.5}$$

où

$$\begin{aligned}
C_{0,2}^t &= -\frac{i}{6}\partial_{p_1^0}\Gamma_{j,j}, \\
C_{1,1}^s &= -\frac{i}{6}\partial_{p_1^j}\Gamma_{0,j} = -C_{1,1}^s.
\end{aligned} \tag{D.6}$$

a l'ordre $\mathcal{O}(\partial^2)$ les coefficients non-triviaux sont,

$$\begin{aligned}
\Gamma_{0,0}^{00} &= -\frac{1}{4}\partial_{p_1^0}^2\hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{0,0}^{ab} &= -\frac{1}{4}\partial_{p_1^a}\partial_{p_1^b}\hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0)} = \delta_{a,b}C_{2,0}^{ss}, \\
\Gamma_{j,k}^{00} &= -\frac{1}{4}\partial_{p_1^0}^2\hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0)} = \delta_{j,k}C_{0,2}^{tt}, \\
\Gamma_{j,0}^{0a} &= -\frac{1}{4}\partial_{p_1^0}\partial_{p_1^a}\hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0)} = \delta_{a,j}C_{1,1}^{st}, \\
\Gamma_{0,j}^{0a} &= -\frac{1}{4}\partial_{p_1^0}\partial_{p_1^a}\hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0)} = -\delta_{a,j}C_{1,1}^{st}, \\
\Gamma_{j,k}^{ab} &= -\frac{1}{4}\partial_{p_1^a}\partial_{p_1^b}\hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0)},
\end{aligned} \tag{D.7}$$

avec

$$\begin{aligned}
C_{2,0}^{ss} &= -\frac{1}{12}\Delta_{p_1}\Gamma_{0,0}, \\
C_{1,1}^{st} &= -\frac{1}{12}\partial_{p_1^0}\partial_{p_1^j}\Gamma_{j,0}, \\
C_{0,2}^{tt} &= -\frac{1}{12}\partial_{p_1^0}^2\Gamma_{j,j}.
\end{aligned} \tag{D.8}$$

Enfin à l'ordre $\mathcal{O}(\partial^3)$ on a

$$\begin{aligned}
\Gamma_{0,0}^{000} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^3 \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0)} \\
\Gamma_{0,0}^{0ab} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0)} = \delta_{a,b} C_{2,0}^{tss} \\
\Gamma_{j,k}^{000} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^3 \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{0,2}^{ttt} \\
\Gamma_{j,0}^{00a} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{1,1}^{tts} \\
\Gamma_{0,j}^{00a} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0)} = -\delta_{a,j} C_{1,1}^{tts} \\
\Gamma_{j,k}^{0ab} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0)}
\end{aligned} \tag{D.9}$$

avec

$$\begin{aligned}
C_{2,0}^{tss} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \Delta_{p_1} \Gamma_{0,0} \\
C_{1,1}^{tts} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_1^j} \Gamma_{j,0} \\
C_{0,2}^{ttt} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^3 \Gamma_{j,j}
\end{aligned} \tag{D.10}$$

Le lagrangien quadratique est alors

$$\begin{aligned}
L^{(2)} &= \Gamma_{0,0} (n - n^*)^2 + C_{0,2} j^2 + \Gamma_{0,0}^0 \hat{\partial}_0 n (n - n^*) + C_{0,2}^t j \cdot \hat{\partial}_0 j + C_{1,1}^s (n - n^*) \nabla \cdot j - C_{1,1}^s j \cdot \nabla n \\
&\quad + \Gamma_{0,0}^{00} \partial_0^2 n (n - n^*) + C_{2,0}^{ss} (n - n^*) \Delta n + C_{0,2}^{tt} j \cdot \partial_0^2 j + C_{1,1}^{st} (n - n^*) \partial_0 \nabla \cdot j + C_{1,1}^{st} j \cdot \partial_0 \nabla n \\
&\quad + \Gamma_{j,k}^{ab} \partial_a \partial_b j_j j_k + \Gamma_{0,0}^{000} \partial_0^3 n (n - n^*) + 3C_{2,0}^{tss} (n - n^*) \partial_0 \Delta n + C_{0,2}^{ttt} j \cdot \hat{\partial}_0^3 j \\
&\quad + 3C_{1,1}^{tts} (n - n^*) \partial_0^2 \nabla \cdot j - 3C_{1,1}^{tts} j \cdot \partial_0^2 \nabla n + 3\Gamma_{j,k}^{0ab} \partial_0 \partial_a \partial_b j_j j_k
\end{aligned} \tag{D.11}$$

D.1.2 $\mathcal{O}(\rho^3)$

La partie cubique du lagrangien effectif sans dérivée à l'ordre $\mathcal{O}(\partial^0)$ provient de

$$\begin{aligned}
\Gamma_{0,0,0} &= \frac{1}{6} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{j,k,0} &= \frac{1}{6} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2},
\end{aligned} \tag{D.12}$$

où

$$C_{1,2} = \frac{1}{18} \hat{\Gamma}_{(j,0),(j,0),(0,0)}. \tag{D.13}$$

La partie à l'ordre $\mathcal{O}(\partial)$ est

$$\begin{aligned}
\Gamma_{0,0,0}^0 &= -\frac{i}{6} \partial_{p_1^0} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{j,k,0}^0 &= -\frac{i}{6} \partial_{p_1^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^t, \\
\Gamma_{0,j,k}^0 &= -\frac{i}{6} \partial_{p_1^0} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^t, \\
\Gamma_{j,0,0}^a &= -\frac{i}{6} \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^s, \\
\Gamma_{0,j,0}^a &= -\frac{i}{6} \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^s, \\
\Gamma_{j,k,\ell}^a &= -\frac{i}{6} \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(\ell,0)},
\end{aligned} \tag{D.14}$$

où

$$\begin{aligned}
C_{1,2}^t &= -\frac{i}{18} \partial_{p_1^0} \Gamma_{j,j,0}, \\
C_{1,2}^t &= -\frac{i}{18} \partial_{p_1^0} \Gamma_{0,j,j}, \\
C_{2,1}^s &= -\frac{i}{18} \partial_{p_1^j} \Gamma_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^s &= -\frac{i}{18} \partial_{p_1^j} \Gamma_{0,j,0}.
\end{aligned} \tag{D.15}$$

Les termes $\mathcal{O}(\partial^2)$ sont

$$\begin{aligned}
\Gamma_{0,0,0}^{00} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1}^2 \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{0,0,0}^{0,0} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{0,0,0}^{ab} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,b} C_{3,0}^{ss}, \\
\Gamma_{0,0,0}^{a,b} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,b} C_{3,0}^{s,s}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{00} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1}^2 \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{tt}, \\
\Gamma_{0,j,k}^{00} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1}^2 \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{tt}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{0,0} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{t,t}, \\
\Gamma_{j,0,k}^{0,0} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{t,t}, \\
\Gamma_{j,0,0}^{0a} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{st}, \\
\Gamma_{j,0,0}^{a,0} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{t,s}, \\
\Gamma_{j,0,0}^{0,a} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^a} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{s,t}, \\
\Gamma_{0,j,0}^{0a} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{st}, \\
\Gamma_{0,0,j}^{0,a} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^a} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(j,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{s,t}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{ab} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{a,b} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^b} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{0,j,k}^{ab} &= -\frac{1}{12} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(k,0)}, \\
\Gamma_{j,0,k}^{a,b} &= -\frac{1}{6} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^b} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(k,0)},
\end{aligned} \tag{D.16}$$

avec

$$\begin{aligned}
C_{3,0}^{ss} &= -\frac{1}{36} \Delta_{p_1} \Gamma_{0,0,0}, \\
C_{3,0}^{s,s} &= -\frac{1}{18} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^a} \Gamma_{0,0,0}, \\
C_{0,1}^{st} &= -\frac{1}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_j} \Gamma_j = -i \partial_{p^0} C_{0,1}^s, \\
C_{1,2}^{tt} &= -\frac{1}{36} \partial_{p_1^0}^2 \Gamma_{j,k,0}, \\
C_{1,2}^{tt} &= -\frac{1}{36} \partial_{p_1^0}^2 \Gamma_{0,j,k}, \\
C_{1,2}^{t,t} &= -\frac{1}{18} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^0} \Gamma_{j,k,0}, \\
C_{1,2}^{t,t} &= -\frac{1}{18} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^0} \Gamma_{j,0,k}, \\
C_{2,1}^{st} &= -\frac{1}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^j} \Gamma_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{t,s} &= -\frac{1}{18} \partial_{p_1^j} \partial_{p_2^0} \Gamma_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{t,s} &= -\frac{1}{18} \partial_{p_1^j} \partial_{p_2^0} \Gamma_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{s,t} &= -\frac{1}{18} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^j} \Gamma_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{st} &= -\frac{1}{36} \partial_{p_1^j} \partial_{p_1^0} \Gamma_{0,j,0}, \\
C_{2,1}^{s,t} &= -\frac{1}{18} \partial_{p_1^0} \partial_{p_2^j} \Gamma_{0,0,j}.
\end{aligned} \tag{D.17}$$

Les contributions à l'ordre $\mathcal{O}(\partial^3)$ proviennent de

$$\begin{aligned}
\Gamma_{0,0,0}^{000} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^3 \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{0,0,0}^{00,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{0,0,0}^{0ab} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,b} C_{3,0}^{tss}, \\
\Gamma_{0,0,0}^{0a,b} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,b} C_{3,0}^{ts,s}, \\
\Gamma_{0,0,0}^{ab,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,b} C_{3,0}^{ss,t}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{000} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^3 \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{ttt}, \\
\Gamma_{0,j,k}^{000} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^3 \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{ttt}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{00,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{tt,t}, \\
\Gamma_{j,0,k}^{00,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{t,tt}, \\
\Gamma_{0,j,k}^{00,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(k,0)} = \delta_{j,k} C_{1,2}^{tt,t}, \\
\Gamma_{j,0,0}^{00a} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{tts}, \\
\Gamma_{j,0,0}^{0a,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{t,ts}, \\
\Gamma_{j,0,0}^{a,00} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^0}^2 \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{tt,s}, \\
\Gamma_{0,j,0}^{0a,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{ts,t}, \\
\Gamma_{j,0,0}^{00,a} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^a} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{s,tt}, \\
\Gamma_{0,j,0}^{00a} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(0,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{tts}, \\
\Gamma_{0,0,j}^{00,a} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^a} \hat{\Gamma}_{(0,0),(0,0),(j,0)} = \delta_{a,j} C_{2,1}^{s,tt}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{0ab} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{ab,0} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{j,k,0}^{0a,b} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^b} \hat{\Gamma}_{(j,0),(k,0),(0,0)}, \\
\Gamma_{0,j,k}^{0ab} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(k,0)}, \\
\Gamma_{0,j,k}^{0a,b} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^b} \hat{\Gamma}_{(0,0),(j,0),(k,0)}, \\
\Gamma_{j,0,k}^{0a,b} &= \frac{i}{12} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^b} \hat{\Gamma}_{(j,0),(0,0),(k,0)}
\end{aligned} \tag{D.18}$$

où

$$\begin{aligned}
C_{3,0}^{tss} &= \frac{i}{108} \partial_1^0 \Delta_{p_1} \hat{\Gamma}_{0,0,0}, \\
C_{3,0}^{ts,s} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^a} \hat{\Gamma}_{0,0,0}, \\
C_{3,0}^{ss,t} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_j} \hat{\Gamma}_{0,0,0}, \\
C_{1,2}^{ttt} &= \frac{i}{108} \partial_{p_1^0}^3 \hat{\Gamma}_{j,k,0}, \\
C_{1,2}^{ttt} &= \frac{i}{108} \partial_{p_1^0}^3 \hat{\Gamma}_{0,j,k}, \\
C_{1,2}^{tt,t} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{j,k,0}, \\
C_{1,2}^{t,tt} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{j,0,k}, \\
C_{1,2}^{tt,t} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{j,0,k}, \\
C_{2,1}^{tts} &= \frac{i}{108} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{t,ts} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{tt,s} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^a} \partial_{p_1^0}^2 \hat{\Gamma}_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{ts,t} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0} \partial_{p_1^a} \partial_{p_2^0} \hat{\Gamma}_{0,j,0}, \\
C_{2,1}^{s,tt} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^a} \hat{\Gamma}_{j,0,0}, \\
C_{2,1}^{tts} &= \frac{i}{108} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_1^a} \hat{\Gamma}_{0,j,0}, \\
C_{2,1}^{s,tt} &= \frac{i}{36} \partial_{p_1^0}^2 \partial_{p_2^a} \hat{\Gamma}_{0,0,j}.
\end{aligned} \tag{D.19}$$

Le lagrangien cubique final est

$$\begin{aligned}
L^{(3)} = & \Gamma_{0,0,0}(n - n^*)^3 + C_{1,2}(n - n^*)j^2 + \Gamma_{0,0,0}^0(n - n^*)^2\partial_0 n + 2C_{1,2}^t(n - n^*)j \cdot \partial_0 j + C_{1,2}^t j^2 \partial_0 n \\
& + C_{2,1}^s(n - n^*)^2 \nabla \cdot j + 2C_{2,1}^s(n - n^*)j \cdot \nabla n + 2\Gamma_{j,k,\ell}^a \partial_a j_j j_k j_\ell + 2\Gamma_{0,0,0}^{00}(n - n^*)^2 \partial_0^2 n \\
& + 2C_{3,0}^{ss}(n - n^*)^2 \Delta n + C_{3,0}^{s,s}(n - n^*)(\nabla n)^2 + C_{1,2}^{tt}(n - n^*)j \cdot \partial_0^2 j + C_{1,2}^{tt} \partial_0^2 n j^2 \\
& + C_{1,2}^{t,t}(n - n^*)(\partial_0 j)^2 + C_{1,2}^{t,t} \partial_0 n j \cdot \partial_0 j + C_{2,1}^{st}(n - n^*)^2 \partial_0 \nabla \cdot j + C_{2,1}^{t,s}(n - n^*) \partial_0 n \nabla \cdot j \\
& + C_{2,1}^{s,t}(n - n^*) \nabla n \cdot \partial_0 j + C_{2,1}^{st}(n - n^*) \partial_0 \nabla n \cdot j + 2C_{2,1}^{s,t} \partial_0 n \nabla n \cdot j + 2\Gamma_{j,k,0}^{ab}(n - n^*) \partial_a \partial_b j_j j_k \\
& + \Gamma_{j,k,0}^{a,b}(n - n^*) \partial_a j_j \partial_b j_k + \Gamma_{0,j,k}^{ab} \partial_a \partial_b n j_j j_k + \Gamma_{j,0,k}^{a,b} \partial_b n \partial_a j_j j_k + 2\Gamma_{0,0,0}^{000}(n - n^*)^2 \partial^3 n \\
& + 2\Gamma_{0,0,0}^{00,0}(n - n^*) \partial_0^2 n \partial_0 n + 6C_{3,0}^{tss}(n - n^*)^2 \Delta \partial_0 n + 2C_{3,0}^{ts,s}(n - n^*) \partial_0 \nabla n \cdot \nabla n \\
& + 2C_{3,0}^{ss,t} \Delta n \partial_0 n + 2C_{1,2}^{ttt}(n - n^*)j \cdot \partial^3 j + C_{1,2}^{ttt} \partial_0^3 n j^2 \\
& + 2C_{1,2}^{tt,t}(n - n^*) \partial_0^2 j \cdot \partial_0 j + C_{1,2}^{t,tt} \partial_0^2 j \cdot j \partial_0 n + 2C_{1,2}^{tt,t} \partial_0^2 n j \cdot \partial_0 j \\
& + 3C_{2,1}^{tts}(n - n^*)^2 \partial_0^2 \nabla \cdot j + 4C_{2,1}^{t,ts}(n - n^*) \partial_0 n \partial_0 \nabla \cdot j \\
& + 2C_{2,1}^{tt,s}(n - n^*) \partial_0^2 n \nabla \cdot j + 2C_{2,1}^{ts,t}(n - n^*) \partial_0 \nabla n \cdot \partial_0 j \\
& + 2C_{2,1}^{s,tt}(n - n^*) \partial_0^2 j \cdot \nabla n + 3C_{2,1}^{tts}(n - n^*)j \cdot \partial_0^2 \nabla n + 2C_{2,1}^{s,tt} \partial_0^2 n \nabla n \cdot j \\
& + 6\Gamma_{j,k,0}^{0ab}(n - n^*) \partial_0 \partial_a \partial_b j_j j_k + 2\Gamma_{j,k,0}^{ab,0}(n - n^*) \partial_a \partial_b j_j \partial_0 j_k + 4\Gamma_{j,k,0}^{0a,b}(n - n^*) \partial_0 \partial_a j_j \partial_b j_k \\
& + 3\Gamma_{0,j,k}^{0ab} j_j j_k \partial_0 \partial_a \partial_b n + 4\Gamma_{0,j,k}^{0a,b} j_k \partial_0 \partial_a n \partial_b j_j + 2\Gamma_{j,0,k}^{0a,b} j_k \partial_0 \partial_a j_j \partial_b n \tag{D.20}
\end{aligned}$$

D.1.3 Equation de continuité

La densité et le courant sont toujours sujets à vérifier l'équation de continuité (15.15) qui peut être utilisée pour simplifier la partie dépendante du courant par rapport à la densité. Le résultat est de la forme $L = L_n + L_j$ où

$$\begin{aligned}
L_n = & g + g_t \partial_0 n + \hat{g}_t \hat{\partial}_0 n + g_{tt} \partial_0^2 n + g_{t^2} (\partial_0 n)^2 + g_{ss} \Delta n + g_{s^2} (\nabla n)^2 + g_{ttt} \partial_0^3 n \\
& + \hat{g}_{ttt} \hat{\partial}_0^3 n + g_{tt,t} \partial_0^2 n \partial_0 n \\
& + \hat{g}_{tt,t} \partial_0^2 n \hat{\partial}_0 n + \hat{g}_{tss} \hat{\partial}_0 \Delta n + \hat{g}_{ts,s} \partial_0 \nabla n \cdot \nabla n + \hat{g}_{t,ss} 2C_{3,0}^{ss,t} \Delta n \partial_0 n \tag{D.21}
\end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned}
g &= \Gamma_0(n - n^*) + \Gamma_{0,0}(n - n^*)^2 + \Gamma_{0,0,0}(n - n^*)^3 \\
g_t &= -2C_{1,1}^s(n - n^*) - 3C_{2,1}^s(n - n^*)^2 \\
\hat{g}_t &= 2\Gamma_{0,0}^0(n - n^*) + 3\Gamma_{0,0,0}^0(n - n^*)^2 \\
g_{tt} &= (2\Gamma_{0,0}^{00} - 4C_{1,1}^{st})(n - n^*) + (3\Gamma_{0,0,0}^{00} - 6C_{2,1}^{st})(n - n^*)^2 \\
g_{t^2} &= (3\Gamma_{0,0,0}^{0,0} - 6C_{2,1}^{t,s})(n - n^*) + (6\Gamma_{0,0,0,0}^{0,0} - 6C_{3,1}^{t,s})(n - n^*)^2 \\
g_{ss} &= 2C_{2,0}^{ss}(n - n^*) + 3C_{3,0}^{ss}(n - n^*)^2 \\
g_{s^2} &= 3C_{3,0}^{s,s}(n - n^*) + 6C_{4,0}^{s,s}(n - n^*)^2 \\
g_{ttt} &= -2C_{1,1}^{tts}(n - n^*) - 3C_{2,1}^{tts}(n - n^*) - 6C_{1,1}^{tts}(n - n^*) \\
\hat{g}_{ttt} &= 2\Gamma_{0,0}^{000}(n - n^*) + 3\Gamma_{0,0,0}^{000}(n - n^*)^2 \\
g_{tt,t} &= -12C_{2,1}^{t,ts}(n - n^*) - 6C_{2,1}^{tt,s}(n - n^*) \\
\hat{g}_{tt,t} &= 6\Gamma_{0,0,0}^{00,0}(n - n^*) \\
\hat{g}_{tss} &= 6C_{2,0}^{tss}(n - n^*) + 9C_{3,0}^{tss}(n - n^*)^2 \\
\hat{g}_{ts,s} &= 48C_{3,0}^{ts,s}(n - n^*) \\
\hat{g}_{t,ss} &= 24C_{3,0}^{ss,t}(n - n^*)
\end{aligned} \tag{D.22}$$

et

$$\begin{aligned}
L_j &= G_{j,k}j_jj_k + \tilde{G}_{j,k}^a\partial_a j_jj_k + G_{tj} \cdot \hat{\partial}_0 j + G_{tt} \cdot \partial_0^2 j + G_{ttj} \cdot \partial_0^2 j + G_{t^2}(\partial_0 j)^2 \\
&+ \hat{G}_{j,k}^{0a}j_k\hat{\partial}_0\partial_a j_j + G_{j,k}^{ab}\partial_a\partial_b j_jj_k \\
&+ G_{j,k}^{a,b}\partial_a j_j\partial_b j_k + G_j^0\partial_0 j_j + G_a j_a + \hat{G}_{tttj} \cdot \hat{\partial}_0^3 j + \hat{G}_{tt,t}\partial_0^2 j \cdot \hat{\partial}_0 j \\
&+ \hat{G}_{j,k}^{0ab}\hat{\partial}_0\partial_a\partial_b j_jj_k + \hat{G}_{j,k}^{ab,0}\partial_a\partial_b j_j\hat{\partial}_0 j_k \\
&+ \hat{G}_{j,k}^{0a,b}\hat{\partial}_0\partial_a j_j\partial_b j_k
\end{aligned} \tag{D.23}$$

avec

$$\begin{aligned}
G_t &= 2C_{0,2}^t + 6C_{1,2}^t(n - n^*) + 12C_{2,2}^t(n - n^*)^2 + [6C_{1,2}^{t,t} + 24C_{2,2}^{t,t}(n - n^*)]\hat{\partial}_0 n + 3C_{1,2}^{tt,t}\hat{\partial}_0^2 n \\
\tilde{G}_{j,k}^a &= [6\Gamma_{j,0,k}^{a,b} + 24\Gamma_{j,0,k,0}^{a,b}(n - n^*)]\partial_b n + 12\Gamma_{0,j,k}^{0b,a}\partial_0\partial_b n \\
G_{tt} &= 2C_{0,2}^{tt} + 3C_{1,2}^{tt}(n - n^*) + 12C_{2,2}^{tt}(n - n^*)^2 + 6C_{1,2}^{t,tt}\hat{\partial}_0 n \\
G_{t^2} &= 3C_{1,2}^{t,t}(n - n^*) + 6C_{2,2}^{t,t}(n - n^*)^2 \\
G_j^{0a} &= 12\Gamma_{j,0,k}^{0a,b}\partial_b n \\
G_j^{ab} &= 2\Gamma_j^{ab} + 6\Gamma_{j,k,0}^{ab}(n - n^*) + 12\Gamma_{j,k,0,0}^{ab}(n - n^*)^2 \\
G_{j,k}^{a,b} &= 3\Gamma_{j,k,0}^{a,b}(n - n^*) + 6\Gamma_{j,k,0,0}^{a,b}(n - n^*)^2 \\
G_j^0 &= [6C_{2,1}^{s,t}(n - n^*) + 12C_{3,1}^{s,t}(n - n^*)^2]\partial_j n + 6C_{2,1}^{ts,t}(n - n^*)\partial_0\partial_j n \\
&\quad + [6C_{2,1}^{s,t} + 24C_{3,1}^{s,t}(n - n^*)]\partial_0 n \nabla n \\
G &= [2C_{1,1}^s + 6C_{2,1}^s(n - n^*) + 12C_{3,1}^s(n - n^*)^2]\nabla n + [4C_{1,1}^{st} + 12C_{2,1}^{st}(n - n^*) \\
&\quad + 24C_{3,1}^{st}(n - n^*)^2]\partial_0\partial_j n \\
&\quad - [6C_{1,1}^{tts} - 9C_{2,1}^{tts}(n - n^*)]\partial_0^2 \nabla n + 6C_{2,1}^{s,tt}\partial_0^2 n \nabla n \\
G_{tt}^a &= 6C_{2,1}^{s,tt}(n - n^*)\partial_a n \\
G_{ttt} &= 2C_{0,2}^{ttt} + 2C_{0,2}^{ttt} + 2C_{1,2}^{ttt}(n - n^*) \\
G_{tt,t} &= 6C_{1,2}^{tt,t}(n - n^*) \\
G_j^{0ab} &= 6\Gamma_{j,k}^{0ab} + 6\Gamma_{j,k,0}^{0ab}(n - n^*) \\
G_j^{0a,b} &= 12\Gamma_{j,k,0}^{0a,b}(n - n^*) \\
G_j^{ab,0} &= 12\Gamma_{j,k,0}^{ab,0}(n - n^*)
\end{aligned} \tag{D.24}$$

En accord avec les expressions à une boucle, les fonctions des coefficients G_j^0 , G et G_{tt}^a sont imaginaires purs et g_{ss} , g_{s^2} , \hat{g}_{tss} , $\hat{g}_{ts,s}$, $\hat{g}_{t,ss}$, $G_{j,k}^a$, $G_{j,k}^{0a}$, $G_{j,k}^{ab}$, $G_{j,k}^{a,b}$, $G_{j,k}^{0ab}$, $G_{j,k}^{0a,b}$, $G_{j,k}^{ab,0}$ sont complexes, la partie imaginaire étant proportionnelle à $\text{sgn}(E)$.

D.1.4 Invariance par "boost" galiléen

Seuls certains coefficients listés dans (D.24), peuvent prendre des valeurs arbitraires. Une condition évidente sur le lagrangien est que les dérivées temporelles doivent toujours être suivies d'autres contributions de telles manières à ce qu'elles puissent être remplacées par des dérivées convectives. L'invariance sous la seconde transformation dans (15.6) élimine les contributions provenant de l'action et contenant au moins deux puissances du courant sans dérivées spatio-temporelles agissant sur elles. Une expression A_j avec un courant simple sans dérivée spatio-temporelle ne sera licite que si chaque composante du vecteur A est une densité multipliée par une dérivée spatio-temporelle d'une fonction. En fait, un tel élément génère un terme de surface dans l'action effective sous "boost" galiléen. Notre lagrangien peut alors

être écrit comme (15.57)-(15.58) avec

$$\begin{aligned}
G_{j,k}^a &= \tilde{G}_{j,k}^a - \delta_{a,k} \frac{1}{n} G_j^0 = \frac{\gamma_{j,k}^a}{n}, \\
G_t &= \frac{\gamma_t}{n}, \\
G_{tt} &= \frac{\gamma_{tt}}{n}, \\
G_{j,k}^{0a} &= \frac{\gamma_j^{0a,k}}{n}, \\
G_{j,k}^{ab} &= \frac{\gamma_j^{ab,k}}{n}, \\
G &= \frac{\gamma}{n}, \\
G_{j,k}^{0ab} &= \frac{\gamma_j^{0ab,k}}{n},
\end{aligned} \tag{D.25}$$

et les coefficients $\gamma_{j,k}^a, \dots$ sont des constantes indépendantes de l'espace et du temps.

D.2 Equation du mouvement

On dérive dans cette section les équations du mouvement pour le lagrangien effectif (15.57)-(15.58). On considère d'abord l'équation du mouvement pour la densité. Les contributions provenant de L_n et L_j à (15.65) sont

$$\begin{aligned}
&G_{j,k}^{a'} \partial_a j_j j_k + G_{tj}^{j'} \cdot \hat{D}j + G_{ttj}^{j'} \cdot D^2j + G_{t^2}^{j'} (Dj)^2 + G_{j,k}^{ab'} \partial_a \partial_b j_j j_k \\
&+ G_{j,k}^{a,b'} \partial_a j_j \partial_b j_k + v^{0'} \cdot Dj + G' \cdot j \\
&+ G_{ttt}^{j'} \cdot \hat{D}j + G_{j,k}^{0ab'} \hat{D} \partial_a \partial_b j_j j_k g' + g'_t Dn + \hat{g}'_t \hat{D}n + g'_{tt} D^2n \\
&+ g'_{t^2} (Dn)^2 + g'_{ss} \Delta n + g'_{s^2} (\partial n)^2 \\
&+ g'_{ttt} D^3n + \hat{g}'_{ttt} \hat{D}^3n + \hat{g}'_{tss} \hat{D} \Delta n - D(g_t n + g_{t^2} Dn) + \hat{D}(\hat{g}_t n) - 2\partial_a (g_{s^2} \partial_a n) + D^2 g_{tt} + \frac{1}{2} \Delta g_{ss} \\
&+ \hat{D}^3 \hat{g}_{ttt} + \frac{1}{2} \Delta \hat{D} \hat{g}_{tss} - (g_t + g_{t^2} Dn) \frac{1}{n} v \cdot \partial n - \hat{g}_t \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} n - g_{tt} \frac{1}{n} v \cdot \partial Dn + D g_{tt} \frac{1}{n} v \cdot \partial n \\
&- \hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} D^2 n + D \hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} v \cdot \partial Dn - \hat{D} \hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} Dn - D^2 \hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} v \cdot \partial n - \hat{g}_{tss} \frac{1}{n} v \cdot \partial \partial_a \partial_b n,
\end{aligned} \tag{D.26}$$

et

$$\begin{aligned}
&-2G_{t^2} D j_k \frac{1}{n} v \cdot \partial j_k - (\tilde{G}_t j_k + V_k) \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} j_k - \tilde{G}_{tt} j_k \frac{1}{n} v \cdot \partial D j_k + D(\tilde{G}_{tt} j_k) \frac{1}{n} v \cdot \partial j_k \\
&- (\tilde{G}_{ttt} j_k) \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} D^2 j_k - \hat{D}(\tilde{G}_{ttt} j_k) \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} D j_k - D^2(\tilde{G}_{ttt} j_k) \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} j_k - \frac{1}{2} \tilde{G}_k^{0bc} j_j \frac{1}{n} v \cdot \hat{\partial} \partial_b \partial_c j_k,
\end{aligned} \tag{D.27}$$

respectivement, où le prime dénote la dérivée par rapport à la densité.

Les contributions similaires à l'équation du mouvement pour le courant

$$\begin{aligned} & (g_t + g_{t^2} Dn) \frac{1}{n} \partial_k n + \hat{g}_t \frac{1}{n} \hat{\partial}_k n + g_{tt} \frac{1}{n} \partial_k Dn - Dg_{tt} \frac{1}{n} \partial_k n + \hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} \hat{\partial}_k D^2 n - D\hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} \hat{\partial}_k n \\ & + \hat{D}\hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} \hat{\partial}_k Dn + D^2 \hat{g}_{ttt} \frac{1}{n} \hat{\partial}_k n + \frac{1}{2} \hat{g}_{tss} \frac{1}{n} \hat{\Delta} \partial_k n, \end{aligned} \quad (\text{D.28})$$

et

$$\begin{aligned} & G_{j,k}^a \partial_a j_a + \tilde{G}_t \hat{D} j_k + \tilde{G}_{tt} D^2 j_k + G_{j,k}^{ab} \partial_a \partial_b j_j + G_k + G_{ttt} \hat{D}^3 j_k + G_{j,k}^{0ab} \hat{D} \partial_a \partial_b j_j \\ & - 2DG_{t^2} D j_k - 2G_{t^2} D^2 j_k + \hat{D} \tilde{G}_t j_k + \tilde{G}_t \hat{D} j_k + \hat{D} V_k + D^2 \tilde{G}_{tt} j_k + 2D\tilde{G}_{tt} D j_k + G_{tt} D^2 j_k + \hat{D}^3 G_{ttt} j_k \\ & + 3\hat{D}^2 G_{ttt} \hat{D} j_k + 3\hat{D} G_{ttt} \hat{D}^2 j_k + G_{ttt} \hat{D}^3 j_k - \partial_\ell G_{k,m}^\ell j_m - G_{k,m}^\ell \partial_\ell j_m - \partial_\ell G_{j,k}^{a,\ell} \partial_a j_j - G_{j,k}^{a,\ell} \partial_\ell \partial_a j_j \\ & + 2G_{t^2} D j_j \partial_k j_j - \tilde{G}_{tt} j_j \partial_k j_j + \frac{1}{2} G_j^{0bc}{}_{,\ell} j_\ell \partial_k \partial_b \partial_c j_j. \end{aligned} \quad (\text{D.29})$$

D.2.1 Ordre principal

Les contributions à l'ordre principal à l'ordre $\mathcal{O}(j^0)$, $\mathcal{O}(D)$ et $\mathcal{O}(\partial^2)$ provenant de (D.26)-(D.27) pour la densité sont exhibés dans l'équation (15.80). Les contributions à l'ordre principal des expressions (D.28)-(D.29) à l'équation du mouvement pour le courant peuvent être écrites au moyen d'un multiplicateur de Lagrange

$$0 = \hat{K}_{a,k}{}^{0(0)} \hat{D} j_k + \Re K_{a,k}{}^{bc(0)} \partial_b \partial_c j_k + \partial_a \lambda, \quad (\text{D.30})$$

où

$$\begin{aligned} \hat{K}_{k,a}{}^{0(0)} &= 4\delta_{a,k} C_{0,2}{}^t, \\ K_{k,a}{}^{bc(0)} &= 2(\Gamma_{a,k}^{bc} + \Gamma_{k,a}^{bc}). \end{aligned} \quad (\text{D.31})$$

On récrit l'équation (D.30) comme

$$0 = \hat{D} j_a + \Re L_{a,k}{}^{bc(0)} \partial_b \partial_c j_k + \frac{1}{4C_{0,2}} \partial_a \lambda, \quad (\text{D.32})$$

où

$$L_{k,a}{}^{bc(0)} = \frac{\Gamma_{a,k}^{bc} + \Gamma_{k,a}^{bc}}{2C_{0,2}}. \quad (\text{D.33})$$

On considérera les expressions formelles de chacun des coefficients de l'équation (D.32). Considérons d'abord $2C_{0,2}$. On décompose la fonction de courant à deux points en une partie transverse et une partie longitudinale

$$\Gamma_p^{k,a} = \frac{p^k p^a}{p^2} \Gamma^L + \left(\delta_{k,a} - \frac{p^k p^a}{p^2} \right) \Gamma^T \quad (\text{D.34})$$

et on substitue cette forme dans la première des équations (D.6). Le résultat est l'expression

$$2C_{0,2}{}^t = \frac{1}{3}i\hbar\partial_E(2\Gamma^T + \Gamma^L). \quad (\text{D.35})$$

L'inversion dans (D.61) simultanément avec les équations (D.63) produit

$$2i\hbar\partial_E(2\Gamma^T + \Gamma^L) = -6i\hbar\frac{\partial_E\tilde{G}^T}{(\tilde{G}^L)^2}. \quad (\text{D.36})$$

Pour le calcul du numérateur dans (D.33), On doit exprimer la dernière relation dans les équations (D.7) en termes des composantes longitudinales et transverses de la fonction de courant à deux points. A cette fin, on obtient

$$\Gamma_p^{k,a} = \delta_{k,a}\Gamma_{p^0,p^2}^d + p^k p^a \Gamma_{p^0,p^2}^t \quad (\text{D.37})$$

où

$$\begin{aligned} \Gamma^d &= \Gamma^T \\ \Gamma^t &= \frac{1}{p^2}(\Gamma^L - \Gamma^T) \end{aligned} \quad (\text{D.38})$$

et on trouve

$$\partial_{p^b}\partial_{p^c}\Gamma_{(k,0),a} + \partial_{p^b}\partial_{p^c}\Gamma_{(a,0),k} = 4\delta_{k,a}\delta_{b,c}\partial_{p^2}\Gamma^d + 2(\delta_{c,k}\delta_{b,a} + \delta_{c,a}\delta_{b,k})\Gamma^t \quad (\text{D.39})$$

En utilisant encore les équations (D.63) on trouve

$$\frac{1}{p^2}(\Gamma^L - \Gamma^T) = \frac{(\tilde{G}^{st})^2}{\tilde{G}^{tt}(\tilde{G}^L)^2} + \frac{\partial_{\mathbf{p}^2}\tilde{G}^T - \partial_{\mathbf{p}^2}\tilde{G}^L}{(\tilde{G}^L)^2}, \quad (\text{D.40})$$

ce qui avec les équations (D.35) et (D.36) mène à

$$L_{a,k}{}^{bc(0)} = \text{sgn}(E)\frac{i}{\hbar}\delta_{k,a}\delta_{b,c}\frac{\partial_{\mathbf{p}^2}\tilde{G}^T}{\partial_E\tilde{G}^T} - \text{sgn}(E)\frac{i}{2\hbar}(\delta_{c,k}\delta_{b,a} + \delta_{c,a}\delta_{b,k})\left(\frac{(\tilde{G}^{st})^2}{\tilde{G}^{tt}\partial_E\tilde{G}^T} + \frac{\partial_{\mathbf{p}^2}\tilde{G}^T - \partial_{\mathbf{p}^2}\tilde{G}^L}{\partial_E\tilde{G}^T}\right) \quad (\text{D.41})$$

Les résultats explicites à une boucle peuvent être trouvées au moyen des équations (D.58),

$$\begin{aligned} L_{a,k}{}^{bc(0)} &= -\frac{\delta_{k,a}\delta_{b,c}}{\int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}} \left[\frac{1}{\gamma} \int_q q^2 \left(\frac{E_q}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2(E_q^2 + 2\gamma^2)}{6m^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right) \right. \\ &\quad \left. + i\text{sgn}(E) \int_q q^2 \left(-\frac{1}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2 E_q^3}{3m^2 \gamma^2 (E_q^2 + \gamma^2)^3} \right) \right] \\ &\quad + \frac{1}{6\hbar\gamma m^2} (\delta_{c,k}\delta_{b,a} + \delta_{c,a}\delta_{b,k}) \left(\frac{m^2 \int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2}}{3 \int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2}} - \frac{(\int_q \frac{q^2 E_q}{(E_q^2 + \gamma^2)^2})^2}{\int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2} \int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2}} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.42})$$

D.3 Approximation à une boucle

On présente dans cette section le calcul perturbatif à l'ordre principal des fonctions de vertex $\tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{b}}$ où les interactions sont prises en compte en retenant un temps de vie fini τ_{micr} pour les excitations fermioniques élémentaires. La fonction de Green $\tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{b}}$ peut être déterminée dans un premier temps et son inverse dans une seconde étape.

D.3.1 $\tilde{G}_{\tilde{a},\tilde{b}}$

En raison de l'invariance rotationnelle, la transformée de Fourier de la fonction de Green est de la forme

$$\tilde{G}_p^{\mu,\nu} = \begin{pmatrix} \tilde{G}^{tt}(p^0, p^2) & p\tilde{G}^{ts}(p^0, p^2) \\ p\tilde{G}^{ts}(p^0, p^2) & \tilde{G}^{j,k}(p^0, p^2) \end{pmatrix} \quad (\text{D.43})$$

Afin de faciliter l'inversion, les composantes spatiales seront décomposées en partie transverse et longitudinale.

$$\tilde{G}^{j,k} = T^{j,k}\tilde{G}^T + L^{j,k}\tilde{G}^L, \quad (\text{D.44})$$

où

$$L^{j,k} = \frac{p^j p^k}{p^2}, \quad T^{j,k} = \delta^{j,k} - L^{j,k}. \quad (\text{D.45})$$

Les fonctions de Green

$$\begin{aligned} \tilde{G}_p^{0,0} &= -i\hbar \int_r G_r G_{p+r}, \\ \tilde{G}_p^{0,j} &= -\frac{i\hbar^2}{m} \int_r G_r G_{p+r} \left(r_j + \frac{p_j}{2} \right), \\ \tilde{G}_p^{j,0} &= -\frac{i\hbar^2}{m} \int_r G_r G_{p+r} \left(r_j + \frac{p_j}{2} \right), \\ \tilde{G}_p^{j,k} &= -\frac{i\hbar^3}{m^2} \int_r G_r G_{p+r} \left(r_j + \frac{p_j}{2} \right) \left(r_k + \frac{p_k}{2} \right) \end{aligned} \quad (\text{D.46})$$

seront calculées en effectuant une rotation de Wick des énergies imaginaires

$$\tilde{G}_p^{\mu,\nu} = \int_{q,F} \frac{F_{p,q}^{\mu,\nu}}{[i(F+E) - E_{q+p} + i\gamma(F+E)][iF - E_q + i\gamma(F)]} \quad (\text{D.47})$$

où l'énergie d'une seule particule

$$E_p = \frac{\hbar^2 p^2}{2m} - \mu, \quad (\text{D.48})$$

est donné en termes de masse effective m et de potentiel chimique μ ,

$$F_{p,q}^{0,0} = 1, \quad F_{p,q}^{0,j} = \frac{\hbar}{m} \left(q_j + \frac{p_j}{2} \right), \quad F_{p,q}^{j,k} = \frac{\hbar^2}{m^2} \left(q_j + \frac{p_j}{2} \right) \left(q_k + \frac{p_k}{2} \right) \quad (\text{D.49})$$

La partie imaginaire des excitations élémentaires, $\gamma_E = \text{sgn}(E)\gamma$ avec $\gamma = \hbar/\tau_{\text{micr}}$ représente les interactions. Le résultat final sera retrouvé par une continuation analytique au temps réel, $E \rightarrow -iE$, à la fin du calcul. Afin d'être en mesure d'utiliser la méthode des intégrales de contour, l'intégrale de l'équation (D.47) qui a un intégrand non-analytique en énergie peut être écrit comme

$$\tilde{G}_p^{\mu,\nu} = \int_{q,F} \int d\lambda d\rho \delta_\gamma(\lambda - E_q) \delta_\gamma(\rho - E_{q+p}) \frac{F_{p,q}^{\mu,\nu}}{(i(F+E) - \rho)(iF - \lambda)} \quad (\text{D.50})$$

au moyen d'une distribution de Dirac régularisée (15.47). Les intégrations sur l'énergie ainsi que sur les paramètres spectraux peuvent être facilement déterminés au moyen d'une intégration de contour, ce qui donne

$$\begin{aligned} \tilde{G}_p^{\mu,\nu} = \frac{\gamma}{\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} & \left[\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda \Theta(-\lambda - E_q)}{(\lambda^2 + \gamma^2)[\lambda - E_{q+p} + E_q + i(E + \gamma_E)]} \right. \\ & \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda \Theta(-\lambda - E_{q+p})}{(\lambda^2 + \gamma^2)[\lambda + E_{q+p} - E_q - i(E + \gamma_E)]} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.51})$$

L'intégration sur le paramètre spectral restant donne

$$\begin{aligned} \Re \tilde{G}_p^{\mu,\nu} = \frac{\gamma}{\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} & \left[\frac{1}{[D^2 + (2\gamma_E + E)^2](D^2 + E^2)} \left(\frac{D^2}{2} - E\gamma_E - \frac{E^2}{2} \right) \right. \\ & \ln \frac{[E_{q+p}^2 + (E + \gamma_E)^2][E_q^2 + (E + \gamma_E)^2]}{(E_q^2 + \gamma_E^2)(E_{q+p}^2 + \gamma_E^2)} \\ & + D \left(\frac{D^2 + E^2}{\gamma_E} + 2(E + \gamma_E) \right) \left(\arctan \frac{E_q}{\gamma_E} - \arctan \frac{E_{q+p}}{\gamma_E} \right) \\ & \left. - 2D(E + \gamma_E) \left(\arctan \frac{E_{q+p}}{E + \gamma_E} - \arctan \frac{E_q}{E + \gamma_E} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.52})$$

et

$$\begin{aligned} \Im \tilde{G}_p^{\mu,\nu} = (E + \gamma_E) \frac{\gamma}{\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} & \left[\frac{1}{[D^2 + (2\gamma_E + E)^2](D^2 + E^2)} D \ln \frac{[E_{q+p}^2 + (E + \gamma_E)^2](E_{q+p}^2 + \gamma_E^2)}{[E_q^2 + (E + \gamma_E)^2](E_q^2 + \gamma_E^2)} \right. \\ & + \left(\frac{D^2 + E^2}{\gamma_E} + 2E \right) \left(\arctan \frac{E_q}{\gamma_E} - \arctan \frac{E_{q+p}}{\gamma_E} \right) \\ & \left. + \frac{D^2 - 2E\gamma_E - E^2}{E + \gamma_E} \left(\arctan \frac{E_{q+p}}{E + \gamma_E} - \arctan \frac{E_q}{E + \gamma_E} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{D.53})$$

où $D = E_{q+p} - E_q$.

Les expressions (D.52)-(D.53) sont encore trop compliquées, et on va donc les évaluer dans quelques cas particuliers qui seront suffisants pour la détermination des

coefficients dans le lagrangien effectif (15.57)-(15.58). Le cas le plus simple est celui où on pose $E = p = 0$,

$$\tilde{G}_{E=p=0}^{\mu,\nu} = \frac{2\gamma}{\pi} \int_q F_{p=0,q}^{\mu,\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda \Theta(-\lambda - E_q) \lambda}{(\lambda^2 + \gamma^2)^2} = -\frac{\gamma}{\pi} \int_q \frac{F_{p=0,q}^{\mu,\nu}}{E_q^2 + \gamma^2} \quad (\text{D.54})$$

La dépendance des impulsions à l'ordre principal peut être obtenu en insérant l'intégrand de (D.51) dans p . On trouve après un calcul long mais direct

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{E=0}^{\mu,\nu} &= \tilde{G}_{p=E=0}^{\mu,\nu} + \frac{\gamma}{\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} \left[\frac{DE_q}{(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{D^2(E_q^2 + 2\gamma^2)}{2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right] \\ &\quad + i\gamma_E \frac{\gamma}{\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} \left[-\frac{D}{(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{D^2 E_q^3}{\gamma^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right] \end{aligned} \quad (\text{D.55})$$

jusqu'à l'ordre $\mathcal{O}(p^2)$. Les dérivées par rapport à l'énergie peuvent être obtenues en posant $p = 0$ dans l'équation (D.51),

$$\tilde{G}_{p=0}^{\mu,\nu} = \frac{2\gamma}{\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\lambda p(\lambda + E_q) \lambda}{(\lambda^2 + \gamma^2)[(\lambda^2 + (E + \gamma_E)^2)]} \quad (\text{D.56})$$

et en effectuant une rotation de Wick inverse et en l'évaluant pour E

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{p=0}^{\mu,\nu} &= -\frac{\gamma}{(-iE)(-iE + 2\gamma_E)\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} \ln \left(1 + \frac{(-iE)(-iE + 2\gamma_E)}{E_q^2 + \gamma_E^2} \right) \\ &= -\frac{\gamma}{\pi} \int_q F_{p,q}^{\mu,\nu} \left(\frac{1}{E_q^2 + \gamma_E^2} + \frac{iE(-iE + 2\gamma_E)}{2(E_q^2 + \gamma_E^2)^2} \right) + \mathcal{O}(E^2) \end{aligned} \quad (\text{D.57})$$

Les résultats de (D.55), (D.57) permettent d'obtenir $\partial_E \tilde{G}^{ts} = 0$ et

$$\begin{aligned}
\tilde{G}^{tt} &= -\frac{\gamma}{\pi} \int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2} \\
\partial_E \tilde{G}^{tt} &= \frac{i\gamma\gamma_E}{\pi} \int_q \frac{1}{(E_q^2 + \gamma^2)^2} \\
\partial_{p^2} \tilde{G}^{tt} &= \frac{\gamma}{\pi} \int_q \left[\frac{E_q}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2(E_q^2 + 2\gamma^2)}{6m^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right] + i\gamma_E \frac{\gamma}{\pi} \int_q \left[-\frac{1}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2 E_q^3}{3m^2\gamma^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right] \\
\tilde{G}^{ts} &= \frac{\hbar\gamma}{m\pi} \int_q \frac{q^2 E_q}{3m(E_q^2 + \gamma^2)^2} \\
\tilde{G}^T &= -\frac{\hbar^2\gamma}{3m^2\pi} \int_q \frac{q^2}{E_q^2 + \gamma^2} \\
&= \tilde{G}^L \\
\partial_{p^2} \tilde{G}^T &= \frac{\hbar^2\gamma}{3m^2\pi} \int_q q^2 \left(\frac{E_q}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2(E_q^2 + 2\gamma^2)}{6m^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right) \\
&\quad + i\gamma_E \frac{\hbar^2\gamma}{3m^2\pi} \int_q q^2 \left(-\frac{1}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2 E_q^3}{3m^2\gamma^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right) \\
\partial_{p^2} \tilde{G}^L &= -\frac{\hbar^2\gamma}{4m^2\pi} \int_q \frac{1}{E_q^2 + \gamma^2} + \frac{\hbar^2\gamma}{3m^2\pi} \int_q q^2 \left(\frac{E_q}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2(E_q^2 + 2\gamma^2)}{6m^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right) \\
&\quad + i\gamma_E \frac{\hbar^2\gamma}{3m^2\pi} \int_q q^2 \left(-\frac{1}{2m(E_q^2 + \gamma^2)^2} + \frac{q^2 E_q^3}{3m^2\gamma^2(E_q^2 + \gamma^2)^3} \right) \\
\partial_E \tilde{G}^T &= -\frac{i\hbar^2\gamma\gamma_E}{3m^2\pi} \int_q \frac{q^2}{(E_q^2 + \gamma^2)^2} \\
&= \partial_E \tilde{G}^L
\end{aligned} \tag{D.58}$$

Les intégrales de boucles sont divergentes et requièrent une régularisation. La coupure dans l'espace des impulsions est implémentée en contraignant l'intégration pour $|q| \leq 2\pi/\ell_0$. Dans notre approche simplifiée de la dépendance en échelle, on choisit la coupure dans le régime hydrodynamique

$$\ell_0 = \tau_{micr} v_F = \frac{\hbar^2}{m\gamma} \left(\frac{3n}{4\pi} \right)^{1/3}. \tag{D.59}$$

Ce schéma est consistant tant que $2\pi/\ell_0 > k_F$, c'est à dire

$$\tau_{micr} < \frac{\hbar\pi}{\mu} = \frac{2\pi m}{\hbar} \left(\frac{4\pi}{3n} \right)^{2/3}. \tag{D.60}$$

D.3.2 $\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b}}$

La fonction de vertex à deux points $\Gamma_{\tilde{a},\tilde{b}}$ est obtenue d'après (15.9) en inversant $\tilde{G}^{\mu,\nu}$,

$$\delta_{p+q,0} \begin{pmatrix} \Gamma^{tt} & p\Gamma^{ts} \\ p\Gamma^{ts} & T\Gamma^T + L\Gamma^L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{G}^{tt} & p\tilde{G}^{ts} \\ p\tilde{G}^{st} & T\tilde{G}^T + L\tilde{G}^L \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{\tilde{G}^L}{D} & -p\frac{\tilde{G}^{ts}}{D} \\ -p\frac{\tilde{G}^{st}}{D} & \frac{1}{\tilde{G}^T}T + \frac{\tilde{G}^{tt}}{D}L \end{pmatrix} \quad (\text{D.61})$$

où $D = \tilde{G}^{tt}\tilde{G}^L - \hat{p}^2\tilde{G}^{st}\tilde{G}^{ts}$. Afin de déterminer les dérivées des fonctions de vertex nécessaires, on écrit

$$\begin{aligned} \Gamma^{tt} &= (\tilde{G}^L + p^2\partial_{p^2}\tilde{G}^L + E\partial_E\tilde{G}^L)(D^{-1} + p^2\partial_{p^2}D^{-1} + E\partial_ED^{-1}) \\ \Gamma^{ts} &= -\tilde{G}^{ts}(D^{-1} + p^2\partial_{p^2}D^{-1} + E\partial_ED^{-1}) \\ \Gamma^T &= \frac{1}{\tilde{G}^T + p^2\partial_{p^2}\tilde{G}^T + E\partial_E\tilde{G}^T + \frac{E^2}{2}\partial_E^2\tilde{G}^T} \\ \Gamma^L &= (\tilde{G}^{tt} + E\partial_E\tilde{G}^{tt} + p^2\partial_{p^2}\tilde{G}^{tt})(D^{-1} + p^2\partial_{p^2}D^{-1} + E\partial_ED^{-1}) \end{aligned} \quad (\text{D.62})$$

ce qui donne après avoir pris en compte (D.58)

$$\begin{aligned} \Gamma^{tt} &= \tilde{G}^L D^{-1} \\ \partial_{p^2}\Gamma^{tt} &= \tilde{G}^L \partial_{p^2}D^{-1} + D^{-1}\partial_{p^2}\tilde{G}^L \\ \partial_E\Gamma^{tt} &= \tilde{G}^L \partial_E D^{-1} + D^{-1}\partial_E\tilde{G}^L \\ \Gamma^{ts} &= -\tilde{G}^{ts} D^{-1} \\ \partial_{p^2}\Gamma^{ts} &= -\tilde{G}^{ts} \partial_{p^2}D^{-1} \\ \partial_E\Gamma^{ts} &= -\tilde{G}^{ts} \partial_E D^{-1} \\ \Gamma^T &= \frac{1}{\tilde{G}^T} \\ \partial_{p^2}\Gamma^T &= -\frac{\partial_{p^2}\tilde{G}^T}{(\tilde{G}^T)^2} \\ \partial_E\Gamma^T &= -\frac{\partial_E\tilde{G}^T}{(\tilde{G}^T)^2} \\ \Gamma^L &= \tilde{G}^{tt} D^{-1} \\ \partial_{p^2}\Gamma^L &= \tilde{G}^{tt} \partial_{p^2}D^{-1} + D^{-1}\partial_{p^2}\tilde{G}^{tt} \\ \partial_E\Gamma^L &= \tilde{G}^{tt} \partial_E D^{-1} + D^{-1}\partial_E\tilde{G}^{tt} \end{aligned} \quad (\text{D.63})$$

Bibliographie

- [1] K. G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975)
- [2] A. Lesne, M. Laguës *Invariances d'échelle, Des changements d'états à la turbulence*, Belin 2003
- [3] A. Lesne, *Méthodes de renormalisation, Phénomènes critiques, Chaos, Structures fractales*, Eyrolles Sciences 1996
- [4] R. Livi, A. Vulpiani, *L'héritage de Kolmogorov en physique*, Belin 2003
- [5] René Thom, *Stabilité structurelle et morphogénèse*, W.A. Benjamin Inc. New York, 1972
- [6] René Thom, *Modèles mathématiques de la morphogénèse*, W.A. Union Générale d'Editions, Paris, 1974
- [7] M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, CNRS Editions, 2002
- [8] Nigel Goldenfeld, *Lectures on phase transitions and the renormalization group*, Perseus Publishing, 1992
- [9] G. Toulouse, P. Pfeuty, *Introduction au groupe de renormalisation et à ses applications*, Presses universitaires de Grenoble, 1975
- [10] K. Huang, *Quantum Field Theory, from operators to path integrals*, Wiley-Interscience, 1998
- [11] L.P. Kadanoff, *Statistical Physics, Statics, Dynamics and Renormalization*, World Scientific, 2000
- [12] D.J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, World Scientific, seconde édition, 1997
- [13] K. Huang, *Statistical Mechanics*, Wiley-Interscience, 1987
- [14] R.P. Feynman, *Statistical Mechanics*, Perseus Books, Cambridge, Massachussets, 1998
- [15] M. Fischer, Rev. Mod. Phys. **46**, page 597-616 (1974)
- [16] S.K. Ma, *Modern Theory of Critical Phenomena*, Benjamin, Reading Mass (1976)
- [17] R. Godement, *Algèbre*, Collection "Enseignements des sciences", Vol. 5, Hermann, Paris, (1978)
- [18] R. Godement, *Algebra*, Prentice Hall, (1991)

- [19] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, Institute of Physics Publishing, Bristol and Philadelphia (2001)
- [20] J. Fuchs, C. Schweigert, *Symmetries, Lie Algebras and Representations*, Cambridge University Press (1997)
- [21] G. Jona-Lasinio, *Nuovo Cimento* **26 B** (1975)
- [22] E. Schrödinger, *Ann. Physik* **79**, 489 (1926)
- [23] W. Kohn, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1253 (1999)
- [24] J. A. Pople, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1267 (1999)
- [25] R. M. Dreizler and E. K. U. Gross, *Density Functional Theory* (Springer, Berlin, 1990)
- [26] R. G. Parr and W. Yang, *Density-Functional Theory of Atoms and Molecules* (Oxford University Press, Oxford, 1989)
- [27] R. D. Mattuck, *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem* (Dover Publications Inc., second edition)
- [28] W. Koch and M. C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory* (John Wiley & Sons, New York, 2001)
- [29] R. O. Jones and O. Gunnarsson, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 689 (1989)
- [30] J. M. Seminario (Ed.), *Recent Developments and Applications of Modern DFT* (Elsevier, Amsterdam, 1996)
- [31] R. F. Nalewajski (Ed.), *Density Functional Theory I -IV* (Springer, Topics in Current Chemistry Vols. 180-183, 1996)
- [32] V. I. Anisimov (Ed.), *Strong Coulomb Correlations in Electronic Structure Calculations : Beyond the Local Density Approximation* (Gordon & Breach, 1999)
- [33] N. H. March, *Electron Density Theory of Atoms and Molecules* (Academic Press, London, 1992)
- [34] B. B. Laird, R. B. Ross, and T. Ziegler (Eds.), *Chemical Applications of Density Functional Theory*, (American Chemical Society, 1996)
- [35] D. Joulbert (Ed.), *Density Functionals : Theory and Applications* (Springer Lecture Notes in Physics Vol. 500, 1998)
- [36] C. Fiolhais, F. Nogueira and M. Marques (Eds.), *A Primer in Density Functional Theory* (Springer Lecture Notes in Physics Vol. 620, 2003)
- [37] J. F. Dobson, G. Vignale, and M. P. Das (Eds.), *Density Functional Theory : Recent Progress and New Directions* (Plenum, New York, 1998)
- [38] H. Eschrig, *The Fundamentals of Density Functional Theory* (Teubner, Leipzig, 1996)
- [39] E. K. U. Gross and R. M. Dreizler (Eds.), *Density Functional Theory* (Plenum, New York, 1995)
- [40] N. Argaman and G. Makov, *Am. J. Phys.* **68**, 69 (2000)

- [41] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics* (Springer, New York, 1979)
- [42] E. K. U. Gross, E. Runge, O. Heinonen, *Many Particle Theory* (Adam Hilger, 1992)
- [43] A. Szabo and N. S. Ostlund, *Modern Quantum Chemistry* (McGraw-Hill, New York, 1989)
- [44] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. **136**, B864 (1964)
- [45] M. Levy, Phys. Rev. A **26**, 1200 (1982)
- [46] E. H. Lieb in *Density Functional Methods in Physics*, edited by R. M. Dreizler and J. da Providencia, (Plenum, New York, 1985)
- [47] N. H. March, *Self-consistent fields in atoms* (Pergamon Press, Oxford, 1975)
- [48] H. Eschrig and W. E. Pickett, Solid State Commun. **118**, 123 (2001)
- [49] K. Capelle and G. Vignale, Phys. Rev. Lett. **86**, 5546 (2001)
- [50] K. Capelle and G. Vignale, Phys. Rev. B **65**, 113106 (2002)
- [51] N. Argaman and G. Makov, Phys. Rev. B **66**, 052413 (2002)
- [52] N. Gidopoulos in *The fundamentals of density matrix and density functional theory in atoms, molecules, and solids*, N. Gidopoulos and S. Wilson eds. (Kluwer Series 'Progress in Theoretical Chemistry and Physics', 2003)
- [53] L. W. Wang and M. P. Teter, Phys. Rev. B **45**, 13196 (1992)
- [54] M. Foley and P. A. Madden, Phys. Rev. B **53**, 10589 (1996)
- [55] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965)
- [56] M. Lüders, A. Ernst, W. M. Temmerman, Z. Szotek, and P. J. Durham, J. Phys. Cond. Mat. **13**, 8587 (2001).
- [57] O. K. Andersen, Phys. Rev. B **12**, 3060 (1975)
- [58] O. K. Andersen, O. Jepsen and D. Glözel in *Highlights of Condensed Matter Theory*, F. Bassani, F. Funi and M. P. Tosi, eds. (North Holland, Amsterdam, 1985)
- [59] U. von Barth and L. Hedin, J. Phys. C **5**, 1629 (1972)
- [60] O. Gunnarsson and B. Lundqvist, Phys. Rev. B **13**, 4274 (1976)
- [61] D. M. Ceperley and B. J. Alder, Phys. Rev. Lett. **45**, 566 (1980)
- [62] S. H. Vosko, L. Wilk, and M. Nusair, Can. J. Phys. **58**, 1200 (1980)
- [63] J. P. Perdew and A. Zunger, Phys. Rev. B **23**, 5048 (1981)
- [64] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B **45**, 13244 (1993)
- [65] J. P. Perdew and Y. Wang, Phys. Rev. B **33**, 8800 (1986)
- [66] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996) *ibid* **78**, 1396(E) (1997)
- [67] C. Lee, W. Yang, and R. G. Parr, Phys. Rev. B **37**, 785 (1988)

- [68] C. Filippi, C. J. Umrigar, and M. Taut, *J. Chem. Phys.* **100**, 1290 (1994)
- [69] P. Ziesche, S. Kurth, and J. P. Perdew, *Comp. Mat. Sci.* **11**, 122 (1998)
- [70] A. K. Rajagopal and J. Callaway, *Phys. Rev. B* **7**, 1912 (1973)
- [71] A. H. Mac Donald and S. H. Vosko, *J. Phys. C* **12**, 2977 (1979)
- [72] G. Vignale and M. Rasolt, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2360 (1987)
- [73] G. Vignale and M. Rasolt, *Phys. Rev. B* **37**, 10685 (1988)
- [74] M. Ferconi and G. Vignale, *Phys. Rev. B* **50**, 14722 (1997)
- [75] M. Bannocletti, H. Ebert, and E. K. U. Gross, *Europhys. Lett.* **40**, 545 (1997)
- [76] A. M. Lee, N. C. Handy, and S. M. Colwell, *J. Chem. Phys.* **103**, 10095 (1996)
- [77] K. Capelle, *Phys. Rev. B* **65**, 100515 (2002)
- [78] K. Capelle and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1872 (1997)
- [79] E. Runge and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997 (1984)
- [80] R. van Leeuwen, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3863 (1999)
- [81] E. K. U. Gross, J. F. Dobson, and M. Petersilka in Ref. [31]. K. Burke and E. K. U. Gross in Ref. [35].
- [82] C. Le Bris, E. Cancès, *Cours du DEA M²SAΦ de Simulation Moléculaire 1999-2000, Université de Versailles*
- [83] R. Baer and M. Head-Gordon, *J. Chem. Phys.* **109**, 10159 (1998)
- [84] R. Baer and M. Head-Gordon, *Phys. Rev. B* **58**, 15296 (1998)
- [85] H. Feshbach, *Annals of Physics*, **19**, 287-313 (1962)
- [86] J. Rau, cond-mat/9607198, (1996)
- [87] J. Muller, J. Rau, *Phys. Lett. B* 386 (1996) 274
- [88] P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev. B* **136**, 864 (1964)
- [89] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **140**, 1133 (1965)
- [90] K. Capelle, cond-mat/0211443, (2003)
- [91] S. Goedecker, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 1085 (1999)
- [92] S. Y. Wu, C. S. Jayanthi, *Phys. Rep.* **358**, 1 (2002)
- [93] S. Goedecker and L. Colombo, *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994) 122
- [94] S. Goedecker, *J. Comp. Phys.* **118**, 261 (1995)
- [95] S. Goedecker and M. Teter, *Phys. Rev. B* **51**, 9455 (1995)
- [96] S. Goedecker, *Phys. Rev. B* **48**, 17573 (1993)
- [97] D. Nicholson, X.-G. Zhang, *Phys. Rev. B* **56**, 12805 (1997)
- [98] F. Gagel, *J. Comp. Phys.* **139**, 399 (1998)
- [99] X-P. Li, W. Nunes, D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **47**, 10891 (1993)
- [100] F. Mauri, G. Galli, R. Car, *Phys. Rev. B* **47**, 9973 (1993)
- [101] F. Mauri, G. Galli *Phys. Rev. B* **50**, 4316 (1993)

- [102] P. Ordejon, D. Drabold, M. Grumbach, R. Martin, Phys. Rev. B **48**, 14646 (1993)
- [103] P. Ordejon, D. Drabold, M. Grumbach, R. Martin, M.P. Grumbach, Phys. Rev. B **51**, 1456 (1995)
- [104] J. Kim, F. Mauri, G. Galli, Phys. Rev. B **52**, 1640 (1995)
- [105] J. Soler et al, J. Phys Condens Matter **14** 2745 (2002)
- [106] E. Artacho, J. Soler Phys. Rev. B **67**, 100101 (2003)
- [107] W. Hierse, E. Stechel, Phys. Rev. B **50**, 17811 (1994)
- [108] E. Hernandez, M. Gillan, Phys. Rev. B **51**, 10157 (1995)
- [109] W. Yang, Phys. Rev. Lett. **66**, 1438 (1991)
- [110] W. Yang, J. Chem. Phys. **94**, 1208 (1991)
- [111] Q. Zhao, W. Yang, J. Chem. Phys. **102**, 9598 (1995)
- [112] W. Kohn, Chem. Phys. Lett. **208**, 167 (1993)
- [113] J. des Cloizeaux, Phys. Rev. **135**, (1964) ; ibid (1964) A698
- [114] W. Kohn, Phys. Rev. **115**, 809 (1959)
- [115] W. Kohn, Int. J. Quart. Chem. **56**, 229 (1995)
- [116] S. Ismail-Beigi, T. Arias, Phys. Rev. Lett. **82**, 2127 (1999)
- [117] S. Goedecker and O. Ivanov, Solid State Commun. **105**, 665 (1998)
- [118] W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **21** (1968) 13
- [119] W. Kohn, Phys. Rev. Lett. **76** (1996) 3168
- [120] R. Baer and M. Head-Gordon, Phys. Rev. Lett. **79** (1997) 3962
- [121] R. Baer and M. Head-Gordon, J. Chem. Phys. **107**, 10003 (1997)
- [122] L. Jay, H. Kim, Y. Saad, J.R Chelikowsky, Computer Physics Communication **118**, issue 1 (1999)
- [123] G. H. Golub and C. F. Van Loan, *Matrix computations*, 3rd ed., (John Hopkins University Press, Baltimore, 1996), p. 591
- [124] V. B. Larin, Technichskaya Kibernetika **1**, 210 (1992)
- [125] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical Recipes in C++*, 2nd ed., 2001, p. 60
- [126] A. S. Householder, *The theory of matrices in numerical analysis*, Dover Publications, Inc. New-York, 1975, p. 94
- [127] P.G. Ciarlet, *Introduction à l'analyse numérique matricielle et à l'optimisation*, Dunod, Paris 1998
- [128] J.F. Bonnans, J.C. gilbert, C. Maréchal, C. Sagastizàbal, *Optimisation numérique, Aspects théoriques et pratiques*, SMAI, Springer 1997
- [129] V. Pan, and J. Reif, *Proceedings of the Seventeenth Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, 1985

- [130] P.W Atkins and R.S Friedman, *Molecular Quantum Mechanics*, 3rd ed., (Oxford University Press, 1997), p. 267
- [131] A. Kenoufi, J. Polonyi, Phys. Rev. B **70**, 205105 (2004)
- [132] MATLAB Student Version Release 13, The MathWorks
- [133] P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, Review of Modern Physics, Vol. 57, No. 2, April 1985
- [134] A. Voter, J. Kress, and R. Silver, Phys. Rev. B **53**, 12733 (1996)
- [135] S. R. White and R. M. Noack, Phys. Rev. Lett. **68** (1982) 3487
- [136] S. R. White, Phys. Rev. B **48**, 10345 (1993)
- [137] H. Brezis, *Analyse fonctionnelle, Théorie et applications*, Masson 1983
- [138] A. Dahan Dalmedico, J.-L. Chabert, K. Chemla, *Chaos et déterminisme*, Editions du Seuil (1992)
- [139] Duchon and R. Robert. Inertial energy dissipation for weak solutions of incompressible Euler and Navier-Stokes equations. Nonlinearity, 13 (1) : 249-255, 2000
- [140] J.Y Chemin, *Gazette des mathématiciens*, supplément au numéro 84 (2000)
- [141] L. Onsager, Statistical hydrodynamics, Nuovo Cimento, 6 (2), p. 279-287, 1949
- [142] R. Robert, *Statistical hydrodynamics. Handbook of mathematical fluid mechanics*, vol. 2, Friedlander and Serre editors, 2003
- [143] U. Frisch, *Turbulence*, Cambridge University Press, second edition 2001
- [144] E. Guyon, J-P. Hulin, L. Petit, *Hydrodynamique physique*, Editions du CNRS, EDP Sciences, nouvelle édition 2001
- [145] P. Manneville, *Instabilités, chaos et turbulence*, Les Editions de l'Ecole Polytechnique, 2003
- [146] C. Bailly, G. Comte-Bellot, *Turbulence*, Editions du CNRS, 2003
- [147] L. Landau, E. Lifchitz, *Physique Théorique, Mécanique des Fluides*, Editions Mir, 1989
- [148] P. Chassaing, *Turbulence en mécanique des fluides*, Cepaduès-Editions, 2000
- [149] *Quelques méthodes systématiques d'approximation en turbulence homogène*, Thèse de spécialité, Nice 1977
- [150] *Résultats exacts et perturbatifs en mécanique statistique des fluides*, Thèse, Nice 1983
- [151] D. Forster, D.R Nelson, M.J Stephen, Phys. Rev. A **16**, 732 (1977)
- [152] S.A. Orszag, J. Fluid Mech. **41**, 363 (1970)
- [153] V. Yakhot, S.A. Orszag, J.Sci.Comp. **1**, 3 (1986)
- [154] V. Yakhot, S.A. Orszag, Phys. Fluids **30**, 3 (1987)
- [155] V. Yakhot, S.A. Orszag, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.) **2**, 417 (1987)
- [156] R.H. Kraichnan, Phys. Fluids **5**, 497 (1959)

- [157] R.H. Kraichnan, Phys. Fluids **11**, 945 (1971)
- [158] R.H. Kraichnan, J. Fluid Mech. **47**, 525 (1971)
- [159] J.R. Herring, R.H. Kraichnan, *Statistical Models and turbulence*, M. Rosenblatt et C. Van Atta, Eds. Springer-Verlag, 148, (1972)
- [160] R.H. Kraichnan, J. Atmos. Sci. **33**, 1521 (1976)
- [161] C.E. Leith, J. Atmos. Sci. **28**, 145 (1971)
- [162] Groupe de Renormalisation et Turbulence, Danièle Carati, Université Libre de Bruxelles, février 1991
- [163] K.G. Wilson, J. Kogut, Phys. Rep. **C12**, 77 (1974); K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- [164] A. O. Caldeira, A. J. Leggett, Phys. Rev. **A31**, 1059 (1985).
- [165] J. Polonyi, Phys. Rev. **B66**, 014202 (2003).
- [166] C. Eckart, Phys. Rev. **54**, 920 (1938); C.C. Lin, *International School of Physics E. Fermi (XXI)*, G. Careri, ed. (Academic Press, N.Y. 1963);
- [167] R. Jackiw, V.P. Nair, S.Y. Pi, A.P. Polychronakos, J.Phys. **A37**, R327-R432 (2004).
- [168] L. P. Kadanoff, P. C. Martin, Ann. Phys. **24**, 419 (1963);
- [169] J. Polonyi, Central Eur. J. Phys. **1**, 1 (2002).
- [170] J. Alexandre, V. Branchina, J. Polonyi, Phys. Lett. **B445**, 351 (1999).
- [171] J. von Delft, H. Schoeller, cond-mat/9805275.
- [172] F. Englert, C. de Dominicis, J. Math. Phys. **8** 2143 (1967); Nouv. Cim. **53A**, 1007 (1968).
- [173] R. M. Dreizler, E. K. U. Gross, *Density Functional Theory*, (Springer, Berlin, 1990).
- [174] J. Polonyi, K. Sailer, Phys. Rev. **B66**, 155113 (2002).
- [175] J. P. Boon, S. Yip, *Molecular Hydrodynamics*, (McGraw-Hill, New York, 1980).