

---

# Plusieurs échelles de longueur en physique :

## article de Kenneth G. Wilson

Chanut Valentin, Le Bon Louison, Roche Hector

---

### Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modèle d'Ising 2D</b>	<b>1</b>
<b>3</b>	<b>Application de la renormalisation au système d'ISING 1D et 2D</b>	<b>2</b>
3.1	Approche intuitive . . . . .	2
3.2	1D : Renormalisation 3 par 3 . . . . .	3
3.3	2D : Renormalisation 9 par 9 . . . . .	4
<b>4</b>	<b>Renormalisation sur un système de particules hexagonales sur réseau triangulaire</b>	<b>4</b>
4.1	Energie du système . . . . .	5
4.2	Métropolis . . . . .	5
4.3	Renormalisation . . . . .	6
4.4	Résultats . . . . .	6
<b>5</b>	<b>Universalité de cette approche et conclusion</b>	<b>7</b>

# 1 Introduction

L'article du lauréat du prix Nobel de physique de 1982 Kenneth G. Wilson, parle de la grande diversité d'échelles de taille ou de longueur présentes dans la structure de nombreux phénomènes (comme les océans, qui présentent des courants persistants sur des milliers de kilomètres, mais n'étant qu'un agrégat de molécules dont l'échelle caractéristique est d'environ  $10^{-8}$  centimètres. De la plus petite structure à la plus grande, il y a une étendue d'environ 17 ordres de grandeur. Ainsi, même si l'on connaît avec exactitude les interactions mises en jeu à l'échelle des constituants de ces phénomènes, essayer de comprendre comment ces dernières se manifestent à une plus grande échelle reste un défi calculatoire immense que même les plus puissants ordinateurs n'arrivent pas à réaliser.

En général, des événements distingués par une grande disparité de taille ont peu d'influence les uns sur les autres ; ils ne communiquent pas, et les phénomènes associés à chaque échelle peuvent être traités indépendamment. La réussite de presque toutes les théories pratiques en physique dépend de l'isolement d'une plage limitée d'échelles de longueur.

Cependant, il existe une classe de phénomènes où des événements à de nombreuses échelles de longueur contribuent de manière équivalente près du "point critique (l'eau développe des fluctuations de densité à toutes les échelles possibles à ce point critique aussi appelé "point triple"). En fait, au point critique, l'échelle des plus grandes fluctuations devient infinie, mais les plus petites fluctuations ne sont en aucun cas diminuées. Toute théorie qui décrit ces systèmes près de leurs points critiques doit prendre en compte l'ensemble du spectre des échelles de longueur.

L'article présente le groupe de renormalisation, utilisé pour traiter les problèmes ayant de multiples échelles de longueur. Le groupe de renormalisation n'est pas une théorie descriptive de la nature, mais une méthode générale pour construire des théories. Elle peut être appliquée non seulement à un fluide au point critique, mais aussi à un matériau ferromagnétique à la température où la magnétisation spontanée commence et autres. L'article souligne que certains de ces phénomènes, qui semblent superficiellement très distincts, sont identiques à un niveau plus profond. Par exemple, le comportement critique des fluides, des ferromagnétiques, des mélanges liquides et des alliages peuvent tous être décrits par une seule théorie, ce qui rend compte de la généralité et utilité de cette renormalisation.

## 2 Modèle d'Ising 2D

Ici nous appliquons la renormalisation aux systèmes dits ferromagnétiques, c'est-à-dire à un ensemble de  $N$  spins qui ont chacun un moment dipolaire magnétique. Nous pouvons, pour simplifier, supposer que ces moments ne prennent que deux valeurs,  $+1$  pour un spin up ou  $-1$  pour un down. Ainsi, nous pouvons définir l'aimantation du système  $M$  comme la somme algébrique des spins ups et des spins down  $M = N_{up} - N_{down}$ . Le matériau sera "magnétisé" si cette quantité est différente de 0. Pour simplifier, ils seront disposés dans un quadrillage 2D de pas  $a$ . L'hamiltonien d'interaction s'écrit alors :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - B \sum_{i=1}^N \sigma_i,$$

où :  $J_{ij}$  est la constante de couplage énergétique entre le spin  $i$  et  $j$ ,  $\sigma_i$  est la valeur du spin au site  $i$  et  $B$  le champ magnétique extérieur appliqué au système, orthogonal au plan du quadrillage.

Ce dernier montre bien la tendance qu'ont les spins dans ces matériaux à s'aligner (minimisant l'énergie), ce qui est une conséquence de l'interaction effective à courte portée qui vient de l'antisymétrisation de la fonction d'onde spatiale fermionique et la répulsion coulombienne. Ainsi, à température  $T$  non nulle, il y a une compétition entre l'énergie d'agitation thermique et l'énergie d'interaction à courte portée.

Nous pouvons en fait supposer que la constante de couplage  $J_{ij}$  est la même pour tous les électrons, et qu'elle s'écrit comme  $J_{ij} = J$ . Par ailleurs, dans l'article, Wilson suppose  $J = \frac{1}{T}$ . En effet, la constante de couplage détermine la force avec laquelle deux spins voisins veulent s'aligner. Plus celle-ci est grande, plus la probabilité que les spins soient alignés  $P \propto \exp\left\{\frac{J}{k_b T}\right\}$  est grande. Il est clair également que plus la température est faible, plus cette probabilité augmente. La proposition de Wilson traduit cette équivalence qualitative, des rôles joués par  $J$  et  $T$ . On peut s'en convaincre en modélisant l'influence d'une variation du couplage à température fixée et vice versa sur l'aimantation.

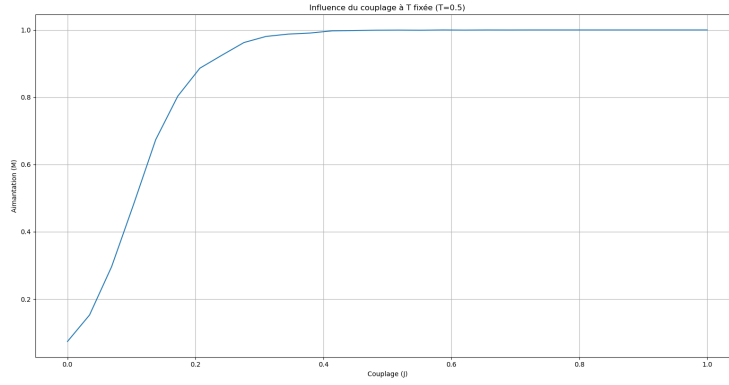


FIGURE 1 – Influence du couplage sur l'aimantation sur un modèle Ising 2D

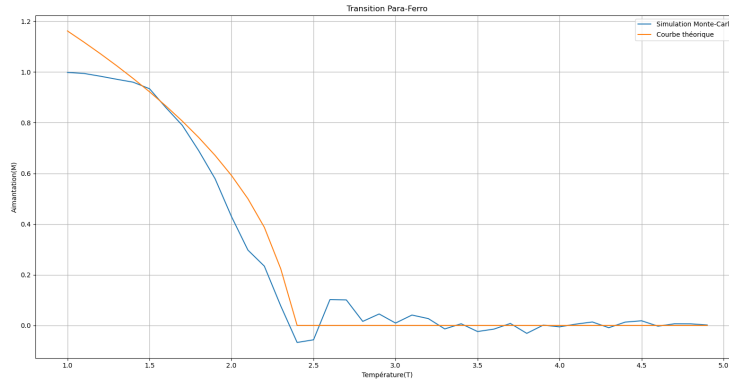


FIGURE 2 – Transition Para-Ferro (aimantation en fonction de la température)

Il est intéressant de regarder des grandeurs comme la *longueur de corrélation*  $\xi(T)$ , définie comme la distance maximale où une fluctuation d'un spin peut avoir un effet mesurable.

Lorsque la température se rapproche de la température critique, cette longueur devient (théoriquement) infinie. Un ordre à longue portée est apparu d'une interaction à courte portée ! L'aimantation est nulle, mais tous les spins sont corrélés, et il existe des fluctuations à toutes les échelles. Il est alors très sensible aux perturbations.

L'intérêt du système d'ISING à 2 dimensions est qu'il possède une solution analytique exacte due à Lars Onsager, et nous pouvons donc comparer les résultats de la renormalisation aux résultats théoriques à 1D.

### 3 Application de la renormalisation au système d'ISING 1D et 2D

#### 3.1 Approche intuitive

La question se pose : Si l'échelle du système varie (sous l'action de la renormalisation), les interactions restent-elles à courte portée ? Les constantes qui couplent des électrons voisins changent-elles après renormalisation ?

Et dans la perspective  $K = \frac{1}{T}$  le système voit-il une température différente ? Pour se faire une idée de ces différentes dépendances on peut regarder l'influence du nombre de spins du système sur la température critique, puis de la constante de couplage sur la température critique.

Tout d'abord l'influence du nombre de spins peut être vu comme l'influence du rescaling de la renormalisation (en laissant  $J$  inchangé). On voit qu'augmenter le nombre de spins conduit à augmenter la température critique linéairement, de manière analogue diminuer la constante de

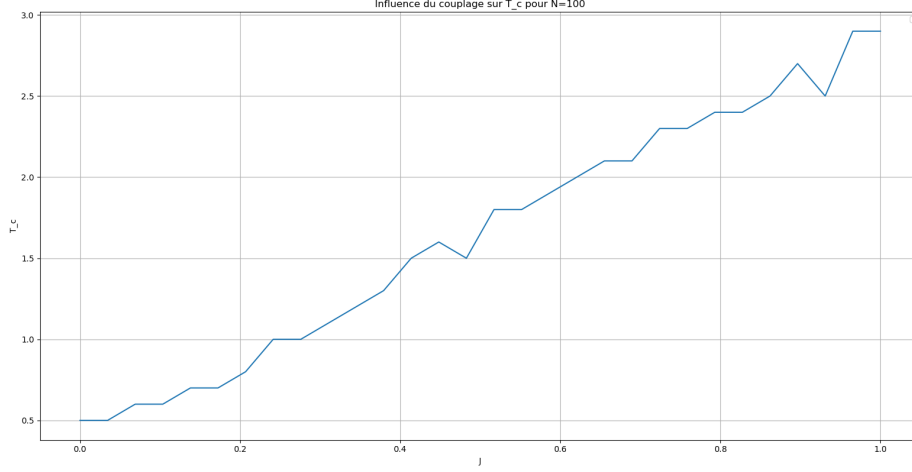


FIGURE 3 – Température critique en fonction du couplage

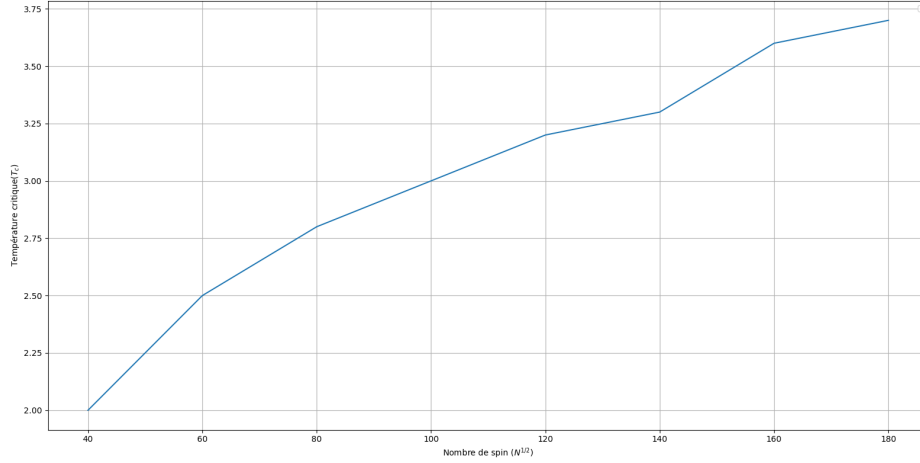


FIGURE 4 – température critique en fonction du nombre de spins pour J=1

couplage diminue  $T_c$  linéairement. Cette dépendance similaire de  $T_c$  dans le couplage et dans le changement du nombre de spin (vu comme une sorte rescaling) semble aller dans le sens de Wilson qui couple l'application du groupe de renormalisation à un changement de température effective et/ou des couplages au sein du système. Pour une étude plus précise du phénomène on se propose d'appliquer une renormalisation plus systématique.

### 3.2 1D : Renormalisation 3 par 3

Pour cela nous avons codé ce système appliquant la "règle de la majorité", c'est-à-dire de prendre un triplet de spins (en 1D, et un carré de  $9 \times 9$  spins en 2D) consécutifs et de le remplacer par un spin up si plus de la moitié des spins sont up et inversement dans le cas contraire. Nous avons ensuite fait évoluer le système non renormalisé pour une valeur de la constante de couplage  $J=1$  fixée, et l'état renormalisé pour multiples valeurs de  $J'$ , pour voir quelle valeur de  $J'$  colle au mieux avec l'évolution non renormalisé, et nous avons tracé cela pour une chaîne de 2500 spins.

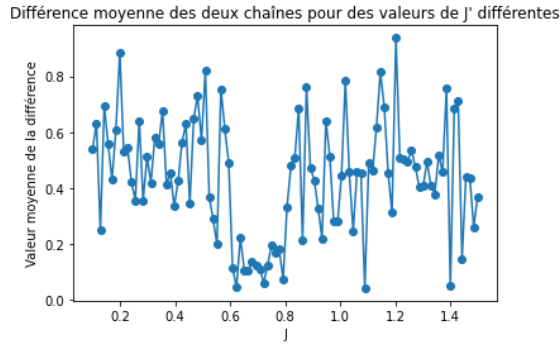


FIGURE 5 – Différence entre la chaîne non renormalisée de 2500 spins et la renormalisée

Dans la thèse que nous regarderons plus en détail plus tard de [Mme Lara Koehler](#), un lien exact peut s'établir en 1D pour la nouvelle constante de couplage pour la chaîne d'Ising 1D, la relation étant  $J' = \frac{1}{2} \log \cosh 2K$ . Les points fixes étant  $J = 0$  et  $J = -\infty$ . Pour  $J = 1$ , la valeur théorique est proche de  $K' = 0.69$ , ce qui est bien observé dans le graphe, même si la variance est extrêmement grande.

### 3.3 2D : Renormalisation 9 par 9

Nous avons fait de même pour un système de 30 spins par 30 spins mais aucune nouvelle valeur de la constante de couplage ne semble bien correspondre.

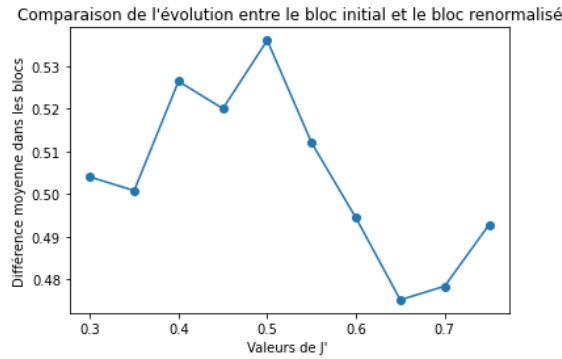


FIGURE 6 – Différence entre le bloc non renormalisé de 25 spins par 25 et le renormalisé

Cela est peut-être dû au faible nombre de spins, ou à la faible résolution des valeurs de  $J'$ . On observe que la variance est beaucoup plus faible que dans le modèle 1D. Une étude plus approfondie serait intéressante, où l'on pourrait essayer de voir s'il existe des estimations de la nouvelle constante de couplage pour rendre la recherche plus rapide, mais le programme que nous avons créé pour cela tourne trop longtemps. On se contente alors de nos résultats 1D.

## 4 Renormalisation sur un système de particules hexagonales sur réseau triangulaire

Cette partie s'inspire fortement des travaux de thèse de [Mme Lara Koehler](#) s'intitulant "Principles of self-assembly for particles with simple geometries and complex interactions". Dans les cellules, les protéines s'assemblent en agrégats de formes très diverses, Koehler suppose que cela est dû à la frustration géométrique. Pour confirmer cela, elle développe un modèle phénoménologique. Ce modèle est un modèle 2D créé pour essayer d'expliquer la diversité des formes des agrégats formés par des particules avec une géométrie simple (des hexagones ici) et des interactions complexes. Le point intéressant dans l'hexagone est qu'il peut présenter de la frustration géométrique. Cela nous permettra d'obtenir de nombreuses formes différentes Fig.7-8.

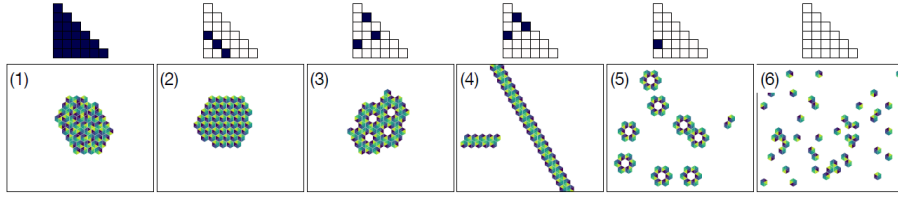


FIGURE 7 – Un bref glossaire des agrégats possibles en fonction de la carte d'interaction  $J$ . (Figure tirée de la thèse).

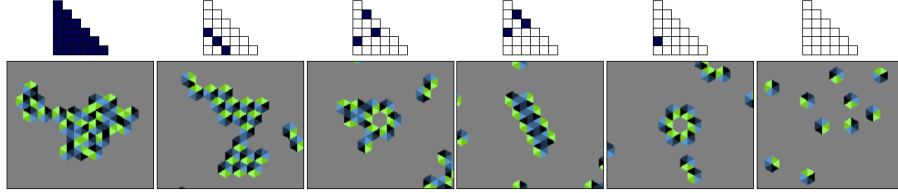


FIGURE 8 – Un bref glossaire des agrégats possibles en fonction de la carte d'interaction  $J$ . (Figure tirée de nous).

#### 4.1 Énergie du système

Les particules n'occupent pas tous les sites possibles, on introduit alors la fonction de Kronecker  $\delta_{a_j, b_j}$  égale à 1 si la face  $a$  de la particule au site  $i$  et que la face  $b$  de la particule au site  $j$  sont en contact et 0 sinon, on écrit l'énergie du système :

$$H = \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{a_i, b_j} J_{ab}$$

Où  $(J_{ab})$  est la matrice d'interaction qui contient les coûts énergétiques du contact entre une face  $a$  et une face  $b$  (cf. Fig.9).

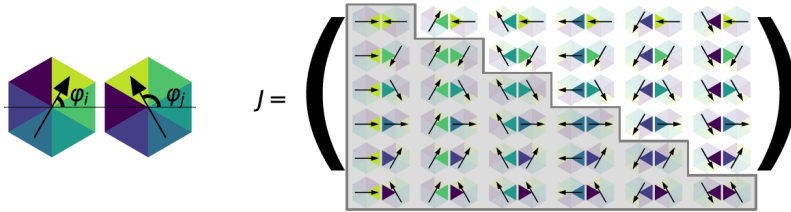


FIGURE 9 –  $J$  liste les façons possibles d'interactions entre deux particules et contient les énergies d'association pour chaque configuration

En notant  $N_{ab}$  le nombre d'apparition de la pair  $(a, b)$  dans notre système, qui vérifie l'équation :

$$N_{ab} = \sum_{\langle i, j \rangle} \delta_{a_i, b_j}$$

On réécrit alors notre Hamiltonien :

$$H = \sum_{a \leq b} N_{ab} J_{ab}$$

#### 4.2 Métropolis

Nous explorons l'espace des configurations les plus probables en suivant l'algorithme de métropolis. Au pas  $t$ , nous connaissons la position  $\{\mathbf{x}_i(t)\}$  ainsi que l'orientation  $\{\varphi_i(t)\}$  de chacune de nos particules. Afin de déterminer l'évolution de notre système, on choisi aléatoirement une particule  $i$  dans le système. Ensuite avec une probabilité 0.5, nous déplaçons la particule dans un des sites vides voisins ( $\mathbf{x}_i(t) \rightarrow \mathbf{x}'_i(t+1)$ ) ou bien, avec une probabilité 0.5, nous changeons l'orientation de la particule ( $\varphi_i(t) \rightarrow \varphi'_i(t+1)$ ) avec une probabilité uniforme selon les orientations  $\varphi'_i \neq \varphi_i$  possibles.

### 4.3 Renormalisation

Ici, nous utilisons la renormalisation comme outil d'exploration l'espace des paramètres à 21 dimensions (qui sont les paramètres  $J_{ab}$  de la matrice d'interaction). Nous cherchons alors les points fixes de la renormalisation. Dans ce système, nous n'avons aucune idée de la position des points critiques, c'est pourquoi nous n'utilisons pas la renormalisation afin d'extraire des exposants critiques mais bien pour explorer l'ensemble des phases possibles.

Quelles sont les règles de renormalisation ? Etant donné que les particules peuvent se déplacer et quelles possèdent 6 orientations possibles, on voit tout de suite qu'une règle de la majorité comme pour le modèle d'Ising n'est pas possible. Nous devons alors construire une règle et choisir une quantité que l'on souhaite conserver.

Commençons par décrire notre système après renormalisation, le système après renormalisation sera constitué d'un site sur trois, et on conserve les particules qui sont situées sur les sites que l'on conserve, on "oublie" les autres particules. Ensuite, afin de construire notre quantité conservée, nous définissons les premiers voisins de contacts ainsi que les seconds voisins de contact dans la figure Fig.10. Maintenant, donnons nous une carte d'interaction  $J$  qui définit le coût énergétique des contact entre les faces (c.f. Fig.9), nous pouvons alors trouver une configuration à l'équilibre grâce à l'algorithme de Métropolis. Une fois à l'équilibre, on calcule alors la matrice de densité de premiers voisins  $c$  qui compte le nombre de faces en contact en considérant les premiers voisins ainsi que la matrice de densité de seconds voisins (de contact)  $d$ . Vu que nous souhaitons trouver les différentes formes d'agrégats, nous souhaitons conserver les moyennes des matrice de densités de voisins au cours de la renormalisation.

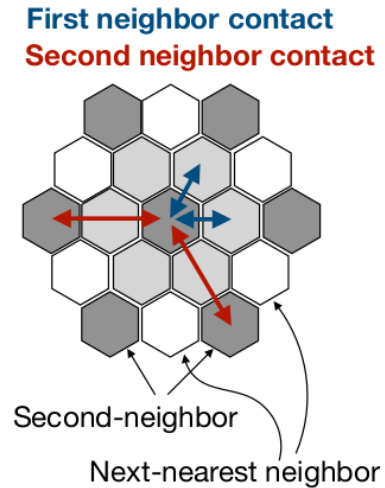


FIGURE 10 – Les premiers voisins de contact sont les hexagones gris clair et les second voisins de contact sont les hexagones gris foncés. Nous oublions les seconds voisins en blanc car la face en contact avec la particule du milieu est mal définie.

Partons d'une configuration initiale ainsi que d'une carte d'interaction  $J$ . Nous implémentons une étape de renormalisation comme suit :

1. On détermine la configuration à l'équilibre en utilisant une simulation de Monte-Carlo. Nous mesurons la moyenne de la matrice de densité de seconds voisins  $\langle d \rangle_J$  à l'équilibre.
2. On détermine la carte d'interaction renormalisée  $J'$  pour laquelle la moyenne de la matrice de densité de premiers voisins  $\langle c \rangle_{J'}$  est égale à  $\langle d \rangle_J$ , dans un système 4 fois plus petits avec 4 fois moins de particules.

Il est clair que nous n'allons pas chercher à bidouiller à la main les 21 paramètres de  $J'$  afin de trouver notre nouvelle carte d'interaction, nous allons résoudre ce problème numériquement en effectuant une descente de gradient sur la fonction  $f : \mathcal{M}_{6,6}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$  définie comme suit :

$$f(J') = \frac{1}{2\|c_0\|^2} \|\langle c \rangle_{J'} - d\|^2$$

Où  $d$  est la matrice visée (i.e.  $\langle d \rangle_J$ ) et  $c_0 = \langle c \rangle_{J'=0}$ .

### 4.4 Résultats

Dans cette section, nous choisissons au hasard une carte d'interaction suivant une loi normale de moyenne  $\mu = -2.5 kT$  et d'écart type  $\sigma = 10 kT$  et procédons à une étape de renormalisation telle que décrite dans la section précédente.

On voit, sur les Fig.11-12, que la condition  $\langle d \rangle_J \simeq \langle c \rangle_{J'}$  est plutôt bien vérifiée, cela garanti que la géométrie des agrégats est conservée lors de la renormalisation. Cela nous permettrait de réitérer le processus afin de trouver des points fixes de la renormalisation.

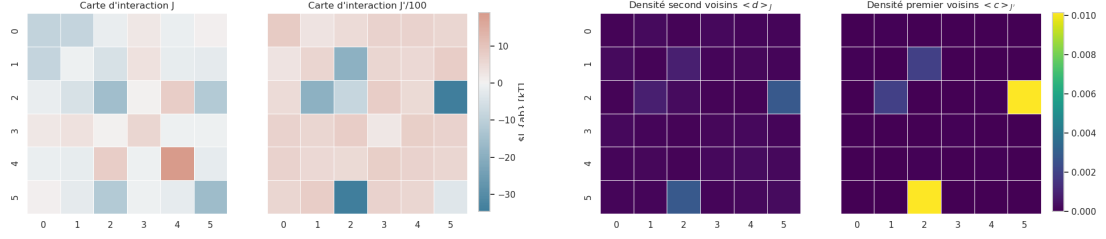


FIGURE 11 – Une étape de renormalisation sur un système de taille  $256 * 256$ , composé de 7 281 particules

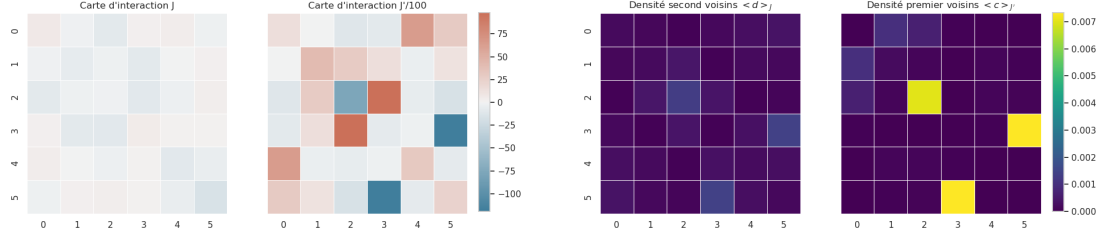


FIGURE 12 – Une étape de renormalisation sur un système de taille  $256 * 256$ , composé de 7 281 particules

## 5 Universalité de cette approche et conclusion

Nous avons vu que la renormalisation est une méthode numérique permettant d'extraire les exposants critiques de certains systèmes (Wilson). L'article parle aussi de l'étude de points critiques pour les relations entre anciennes et nouvelles constantes de couplage. En examinant de nombreuses trajectoires de ce type dans l'espace des paramètres, la topographie de la surface elle-même peut être cartographiée dans la petite région entourant le point de selle qui correspond au point critique. La pente de la surface détermine la façon dont le système approche le point fixe et comment il s'en éloigne. En connaissant la pente, on peut calculer comment les propriétés du système varient lorsque le couplage initial et la température initiale sont modifiés. C'est précisément l'information recherchée pour comprendre les phénomènes critiques. Cela permet de comprendre toutes les propriétés critiques et donc à déterminer les valeurs des exposants critiques. Il est aussi intéressant de remarquer que la renormalisation peut aussi être utilisée dans des systèmes complexes où nous n'avons à priori aucun renseignement sur les points critiques pour explorer les différentes phases qu'un système peut présenter.

De plus, la plupart des systèmes sont déterminés par deux principales grandeurs : la dimension de l'espace (notée "d") et la dimension du paramètre d'ordre (notée "n"). Ces paramètres sont cruciaux pour définir la surface critique dans l'espace des paramètres et déterminer les exposants critiques. Les systèmes avec des valeurs identiques de d et n appartiennent à la même classe d'universalité, partageant des propriétés critiques similaires, ce qui rend cette approche de renormalisation encore plus puissante car encore plus universelle.

Lorsque les exposants critiques prennent des valeurs non entières, cela suggère une connexion entre les propriétés géométriques exprimées par d et n, indiquant que les détails complexes distinguant différentes structures physiques sont moins cruciaux que les valeurs de ces paramètres. De plus, la méthode connue comme l'expansion epsilon permet des variations continues de d et n, fournissant des perspectives sur le comportement des systèmes à mesure que les dimensions spatiales changent.

Ainsi, les méthodes modernes de groupe de renormalisation offrent une alternative aux approches de champ moyen et ont été appliquées avec succès pour traiter des phénomènes critiques difficiles. Elles fournissent une manière plus puissante et précise de comprendre les propriétés des systèmes physiques aux points critiques et aux transitions de phase.