

Dynamique classique de la théorie ϕ^4 hors d'équilibre

Rapport de stage en laboratoire

Hugo RICATEAU | *Étudiant en seconde année de Master de Physique Théorique, Centre International de Physique Fondamentale (ICFP), École Normale Supérieure, Paris*

Sous la supervision de

Leticia F. CUGLIANDOLO | *Université Pierre et Marie Curie – Paris 6, Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies (LPTHE), 4, Place Jussieu, Tour 13, 5ème étage, 75252 Paris Cedex 05, France*

Giulio BIROLI | *Institut de Physique Théorique (IPhT), CNRS URA 2306, CEA – Saclay, F-91191 Gif-sur-Yvette, France*



Illustration en couverture :

Représentation spatio-temporelle de la dynamique typique du champ ϕ , après une trempe, vers la phase de symétrie brisée.

Table des matières

Résumé	1
Abstract	1
1 Le modèle ϕ^4	2
1.1 Dynamique classique	2
1.2 Simulation numérique	3
1.2.1 Discrétisation	3
1.2.2 Intégration temporelle	4
1.2.3 Approximation spatiale	5
1.2.4 Conditions initiales	8
2 Dynamique hors d'équilibre	11
2.1 Trempe vers la phase de symétrie brisée – « coarsening »	11
2.2 Trempe vers la phase symétrique et pré - thermalisation	12
Conclusion	16
Références	17
A Validité des intégrateurs symplectiques	18
B Condition de COURANT – FRIEDRICHS – LEWY	20
C Tirage d'une configuration d'équilibre initiale	23
C.1 Le cas du champ conjugué, π	23
C.2 Le cas du champ, ϕ	23

Résumé

L'équilibre dans les systèmes complexes est une situation idéale mais qui fait plus figure d'exception que de règle dans la nature. Lorsque les paramètres d'un système physique varient, sa relaxation vers l'équilibre peut devenir extrêmement longue voire impossible. Ainsi, la compréhension de la dynamique hors d'équilibre des systèmes statistiques est un enjeu clé de leur description. Si la thermalisation d'un système trempé d'une phase symétrique vers une phase de symétrie brisée est un phénomène relativement bien compris, dit d'agglomération ou « coarsening », il n'en est pas de même de la dynamique d'une trempe ne brisant aucune des symétries du système. En effet, dans le cadre d'une dynamique quantique, il a récemment été mis en évidence un phénomène, encore mal compris, dont les manifestations sont similaires au « coarsening » sans toutefois en être, appelé pré - thermalisation [3, 5, 6]. Nous nous attacherons à montrer que son origine n'est certainement pas liée à la quantification puisqu'il est observable dans le cadre d'une dynamique purement classique. À cette fin, nous étudierons la dynamique (classique) hors d'équilibre de la théorie de champ scalaire ϕ^4 en dimension $d = 1 + 1$. En particulier, nous détaillerons la méthodologie employée pour simuler numériquement (via des intégrateurs symplectiques) la dynamique du champ. Puis nous rappellerons les idées relatives au « coarsening » avant de nous intéresser à la relaxation post-trempe dans la phase symétrique, afin de mettre en évidence l'existence de la pré - thermalisation dans une théorie classique.

Abstract

The equilibrium in complex systems is an ideal situation which is however more the exception than the rule in nature. When the parameters of a physical system vary, the relaxation to equilibrium can be extremely long even impossible. Thus, understanding the out-of-equilibrium dynamics of statistical systems is a key challenge to describe them. Though the thermalization of systems quenched from a symmetric phase to a phase of broken symmetry is a relatively well understood phenomenon, so called coarsening, the same does not apply to the quench dynamics which has no symmetry breaking phase. Indeed, in the quantum dynamics framework, a phenomenon has recently been shown which, even if still misunderstood, is called pre-thermalization and which presents similar evidences to coarsening without being it [3, 5, 6]. We will endeavor to show that the origin of this phenomenon is certainly not related to quantization since it is observable within a purely classical dynamics. For this purpose, we will investigate the (classical) out-of-equilibrium dynamics of the scalar field ϕ^4 -theory in $d = 1 + 1$ dimensions. We will particularly describe the methodology used to simulate (via symplectic integrators) the dynamics of the field numerically. Then we will recall the main ideas of coarsening before focusing on the post-quench relaxation in the symmetric phase : thus highlighting the existence of pre-thermalization in a classical theory.

1 Le modèle ϕ^4

1.1 Dynamique classique

On considère la théorie classique d'un champ scalaire ϕ , en dimension $d = 1 + 1$, dont l'action est donnée par

$$\mathcal{S}[\phi(x, t)] = \int dt dx \mathcal{L}(x, t) ,$$

avec la densité de lagrangien

$$\mathcal{L}(x, t) = \frac{\tilde{1}}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{r}{2} \phi^2 - \frac{g}{4!} \phi^4 ,$$

où $\mu \in \llbracket 0, 1 \rrbracket$ et $\tilde{1}$ est homogène à une énergie. Bien entendu, ce modèle n'est autre que la célèbre théorie ϕ^4 . On définit la métrique avec la signature $\eta_{\mu\nu} \equiv \text{diag}(1, -1)$ et on pose

$$x^0 = \frac{t}{\sqrt{\tilde{m}}} \quad \text{et} \quad x^1 = x .$$

La densité hamiltonienne \mathcal{H} , puis le Hamiltonien, sont alors donnés par

$$H[\phi(x, t)] = \int_{\mathbb{R}} dx \mathcal{H}(x, t) = \int_{\mathbb{R}} dx \left[\frac{m}{2} (\partial_t \phi)^2 + \frac{\tilde{1}}{2} (\partial_x \phi)^2 + \frac{r}{2} \phi^2 + \frac{g}{4!} \phi^4 \right] , \quad (1.1)$$

où $m = \tilde{1} \tilde{m}$ représente l'inertie du champ comme le suggère l'équation (1.2). Le principe de moindre action

$$\frac{\delta \mathcal{S}[\phi]}{\delta \phi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \partial_\mu \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_\mu \phi} = 0 ,$$

permet d'obtenir l'équation de la dynamique classique du champ ϕ

$$m \partial_t^2 \phi = \tilde{1} \partial_x^2 \phi - r \phi - \frac{g}{3!} \phi^3 . \quad (1.2)$$

On définit le moment conjugué du champ, π , par

$$\pi(x, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \partial_t \phi} = m \dot{\phi}(x, t) . \quad (1.3)$$

Le Hamiltonien (1.1) se réécrit alors en fonction des variables canoniques ϕ et π ,

$$H[\phi(x, t), \pi(x, t)] = \int_{\mathbb{R}} dx \left[\frac{\pi^2}{2m} + \frac{\tilde{1}}{2} (\partial_x \phi)^2 + \frac{r}{2} \phi^2 + \frac{g}{4!} \phi^4 \right] . \quad (1.4)$$

De même, l'équation du mouvement (1.2) devient :

$$\partial_t \pi = \tilde{1} \partial_x^2 \phi - r \phi - \frac{g}{3!} \phi^3 . \quad (1.5)$$

Les divers paramètres introduits ont pour dimensions

$$[H] = [\tilde{1}] = [\beta^{-1}] = \text{énergie} = \text{masse} \cdot \text{longueur}^2 \cdot \text{temps}^{-2} ,$$

$$[\phi] = \text{longueur}^{1/2} , \quad [\pi] = \text{masse} \cdot \text{longueur}^{1/2} \cdot \text{temps}^{-1} ,$$

$$[x] = \text{longueur} , \quad [t] = \text{temps} ,$$

$$[m] = \text{masse} ,$$

$$[r] = \text{masse} \cdot \text{temps}^{-2} ,$$

$$[g] = \text{masse} \cdot \text{longueur}^{-1} \cdot \text{temps}^{-2} ,$$

et dans toute la suite, ces unités seront sous entendues. De plus, on note que le choix d'une échelle de masse, de longueur et de temps, est suffisant pour spécifier les échelles de toutes les grandeurs définies.

Les équations du mouvement (1.3) et (1.5) que nous venons d'écrire, associées à des conditions aux limites et initiales, permettent une description parfaitement déterministe de la dynamique du champ. Malheureusement, mis à part quelques rares cas, nous ne sommes pas en mesure de résoudre analytiquement ces équations. N'ayant a priori aucune raison d'appliquer des méthodes perturbatives, nous allons voir comment résoudre numériquement les équations du mouvement.

1.2 Simulation numérique

1.2.1 Discrétisation

Afin de pouvoir intégrer numériquement les équations du mouvement (1.3) et (1.5), on commence par restreindre le système à une longueur finie, L . Le Hamiltonien (1.4) devient alors

$$H[\phi, \pi] = \int_0^L dx \mathcal{H}(x, t) = \int_0^L dx \left[\frac{\pi^2}{2m} + \frac{\tilde{1}}{2} (\partial_x \phi)^2 + \frac{r}{2} \phi^2 + \frac{g}{4!} \phi^4 \right]. \quad (1.6)$$

Puis, on discrétise le problème spatialement en posant

$$\phi_j(t) = \sqrt{\delta x} \phi(j\delta x, t) \quad \text{et} \quad \pi^j(t) = \sqrt{\delta x} \pi(j\delta x, t), \quad (1.7)$$

où δx est le pas de discrétisation spatiale et où $j \in \llbracket 0, N \rrbracket$ avec $N\delta x = L$. De plus, on pose

$$\lambda = \frac{g}{\delta x}. \quad (1.8)$$

Les règles de discrétisation sont données par :

$$\int dx \rightarrow \delta x \sum_{j=0}^N, \quad \phi \rightarrow \frac{\phi_j}{\sqrt{\delta x}}, \quad \pi \rightarrow \frac{\pi^j}{\sqrt{\delta x}}.$$

Et on approche la dérivée spatiale par le schéma de NEWTON :

$$\partial_x \phi(x, t)|_{x=j\delta x} \approx \frac{\phi(x + \delta x, t) - \phi(x, t)}{\delta x} \Big|_{x=j\delta x} \rightarrow \frac{\phi_{j+1}(t) - \phi_j(t)}{\delta x^{3/2}}. \quad (1.9)$$

On note que les paramètres discrétisés que nous venons d'introduire ont pour dimensions

$$\begin{aligned} [\phi_j] &= \text{longueur}, & [\pi^j] &= \text{masse} \cdot \text{longueur} \cdot \text{temps}^{-1}, \\ [\lambda] &= \text{masse} \cdot \text{longueur}^{-2} \cdot \text{temps}^{-2}. \end{aligned}$$

Finalement, le Hamiltonien (1.6) devient

$$H(\{\phi_j, \pi^j\}_{0 \leq j \leq N}) = \sum_{j=0}^N \left[\frac{\pi_j^2}{2m} + \frac{r}{2} \phi_j^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi_j^4 \right] + \frac{\tilde{1}}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\delta x} \right)^2, \quad (1.10)$$

$$= T(\{\pi^j\}_{0 \leq j \leq N}) + V(\{\phi_j\}_{0 \leq j \leq N}). \quad (1.11)$$

Si on pose

$$\vec{\phi}(t) = (\phi_j(t))_{0 \leq j \leq N} \quad \text{et} \quad \vec{\pi}(t) = (\pi^j(t))_{0 \leq j \leq N},$$

on a alors explicitement :

$$T(\vec{\pi}) = \frac{\vec{\pi}^2}{2m} \quad \text{et} \quad (1.12)$$

$$V(\vec{\phi}) = \frac{r\vec{\phi}^2}{2} + \frac{\lambda}{4!} \sum_{j=0}^N \phi_j^4 + \frac{\tilde{1}}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \left(\frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\delta x} \right)^2 . \quad (1.13)$$

Nous venons d'écrire un Hamiltonien (1.10) que nous sommes en mesure de simuler numériquement. Il décrit, à la limite continue, la théorie de champ qui nous intéresse en premier lieu. Nous allons maintenant voir comment intégrer cette version discrétisée du champ.

1.2.2 Intégration temporelle

Les équations du mouvement (1.3) et (1.5) ne sont autres que les équations de HAMILTON pour le champ et son moment conjugué. On peut les écrire sous une forme symétrique en définissant le crochet de POISSON

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial \phi_j} \frac{\partial g}{\partial \pi^j} - \frac{\partial f}{\partial \pi^j} \frac{\partial g}{\partial \phi_j} .$$

La dynamique du champ discrétisé obéit alors à

$$\begin{pmatrix} \dot{\vec{\phi}}(t) \\ \dot{\vec{\pi}}(t) \end{pmatrix} = D_H \begin{pmatrix} \vec{\phi}(t) \\ \vec{\pi}(t) \end{pmatrix} ,$$

où $D_H = \{\cdot, H\}$ est un opérateur indépendant du temps. Ainsi, la solution de cette équation est

$$\begin{pmatrix} \vec{\phi}(t) \\ \vec{\pi}(t) \end{pmatrix} = e^{t D_H} \begin{pmatrix} \vec{\phi}(0) \\ \vec{\pi}(0) \end{pmatrix} .$$

L'opérateur $\exp(\Delta t D_H)$ n'est donc autre que l'opérateur d'évolution du champ. On a, en particulier,

$$\begin{pmatrix} \vec{\phi}(t + \Delta t) \\ \vec{\pi}(t + \Delta t) \end{pmatrix} = e^{\Delta t D_H} \begin{pmatrix} \vec{\phi}(t) \\ \vec{\pi}(t) \end{pmatrix} .$$

Par définition, cette opérateur est symplectique et préserve le volume

$$d\mathcal{V} = \bigwedge_{j=0}^N d\phi_j \wedge \bigwedge_{k=0}^N d\pi^k ,$$

dans l'espace (symplectique) des phases. On retrouve ainsi la propriété attendue selon laquelle il conserve le Hamiltonien H . La forme (1.11) incite à le décomposer en deux parties distinctes, agissant respectivement sur le champ discrétisé $\vec{\phi}$ et son moment conjugué $\vec{\pi}$. On pose alors

$$D_H = \{\cdot, H\} = \{\cdot, T\} + \{\cdot, V\} = D_T + D_V .$$

On a

$$\begin{aligned} D_T^2(\phi_i \pi^j) &= \{ \{ (\phi_i \pi^j), T \}, T \} = \{ (\dot{\phi}_i \ 0), T \} = 0 , \\ D_V^2(\phi_i \pi^j) &= \{ \{ (\phi_i \pi^j), V \}, V \} = \{ (0 \ \dot{\pi}^j), V \} = 0 , \end{aligned}$$

où, pour la dernière égalité, on a utilisé le principe selon lequel le système est conservatif (les équations du mouvement relient les π^j aux ϕ_k uniquement). Ainsi,

$$D_T^2 = D_V^2 = 0 ,$$

dont on déduit que $\forall t \in \mathbb{R}$,

$$e^{tD_T} \cdot = (1 + tD_T) \cdot \quad \text{et} \quad e^{tD_V} \cdot = (1 + tD_V) \cdot , \quad (1.14)$$

dont nous sommes capable d'expliciter l'action. N'étant pas en mesure d'intégrer les équations de HAMILTON, nous ne pouvons pas plus donner l'action de l'opérateur d'évolution. Toutefois, pour des pas de temps δt suffisamment petits, on l'approche par l'intégrateur symplectique¹ d'ordre n

$$S^{(n)}(\delta t) = \prod_{j=1}^k e^{c_j \delta t D_T} e^{d_j \delta t D_V} = e^{\delta t D_H + \mathcal{O}(\delta t^{n+1})} , \quad (1.15)$$

où les coefficients $\{c_j\}_{1 \leq j \leq k}$ et $\{d_j\}_{1 \leq j \leq k}$ sont en nombre suffisant (choix de k) et convenablement choisis afin de vérifier la dernière égalité. L'intégrateur symplectique d'ordre n est l'opérateur d'évolution *exact* d'un Hamiltonien \tilde{H} relié à H par

$$\tilde{H} = H + \mathcal{O}(\delta t^n) .$$

L'évolution sous $S^{(n)}$ conserve exactement \tilde{H} et décrit donc convenablement l'évolution approchée de H pour des pas de temps δt suffisamment petits.

Les coefficients $\{c_j\}_{1 \leq j \leq k}$ et $\{d_j\}_{1 \leq j \leq k}$ s'obtiennent par diverses méthodes² que l'on trouvera présentées en détails dans [12]. La TABLE 1 donne la forme explicite des premiers ordres de l'intégrateur symplectique.

Nous sommes désormais en mesure d'intégrer numériquement la dynamique approchée du champ. Et on présente dans l'annexe A un test de validité de l'algorithme. Toutefois, il nous faut également vérifier la pertinence de l'approximation spatiale.

1.2.3 Approximation spatiale

Nous allons maintenant nous intéresser au bien-fondé de la discrétisation spatiale du problème. Dans cet objectif, nous allons commencer par détailler l'obtention d'une solution particulière du modèle ϕ^4 : les solitons. On recherche une solution de l'équation (1.2) sous la forme

$$\phi(x, t) = \phi(u = x + ct) ,$$

où $c \in \mathbb{R}$ est la célérité du soliton tandis que le signe donne le sens de son déplacement. L'équation (1.2) devient alors

$$(mc^2 - \tilde{1}) \partial_u^2 \phi + r\phi + \frac{g}{3!} \phi^3 = 0 . \quad (1.16)$$

On se place dans la cas où le potentiel brise spontanément la symétrie \mathbb{Z}_2 , c'est à dire $g > 0$ et $r \leq 0$. Comme suggéré dans [9], on en cherche la solution sous la forme

$$\phi(u) = \eta \tanh \mu u ,$$

1. Qui est une forme symplectique car produit d'applications symplectiques.

2. Ces méthodes sont largement basées sur la formule de BAKER-CAMPBELL-HAUSDORFF. La contribution de YOSHIDA donne, en particulier, une méthode récursive pour obtenir analytiquement les coefficients à n'importe quel ordre n ainsi qu'une méthode numérique plus efficace (la méthode analytique a une complexité $3^{n-1} + 1$ contre 2^n pour la méthode numérique).

avec les conditions aux bords

$$\phi(u = \pm\infty) = \pm\sqrt{\frac{-6r}{g}}.$$

En injectant cette forme dans l'équation (1.16), il vient

$$\begin{aligned}\phi(x + ct) &= \sqrt{\frac{-6r}{g}} \tanh \left[\sqrt{\frac{r}{2(mc^2 - \tilde{1})}} (x + ct) \right], \\ \pi(x + ct) &= cmr \sqrt{\frac{3}{g(\tilde{1} - mc^2)}} \operatorname{sech}^2 \left[\sqrt{\frac{r}{2(mc^2 - \tilde{1})}} (x + ct) \right].\end{aligned}$$

Cette solution n'existe que si $mc^2 - \tilde{1} < 0$, ie $m > 0$ et

$$|c| < \sqrt{\frac{\tilde{1}}{m}}. \quad (1.17)$$

Dans le cas du champ continu, les conditions aux limites sont repoussées à l'infini ce qui n'est pas compatible avec la discrétisation. Cependant, on suppose que la solution converge suffisamment vite vers les conditions aux bords pour qu'on puisse les imposer à une distance finie. On suppose donc que

$$L \gg 2\sqrt{\frac{2(mc^2 - \tilde{1})}{r}}. \quad (1.18)$$

Sous couvert de cette hypothèse, on revient au champ discrétisé introduit en (1.7), à l'instant initial, le soliton est donné par

$$\phi_j(t = 0) = \sqrt{\frac{-6r}{\lambda}} \tanh \left[\delta x \left(j - \frac{N}{4} \right) \sqrt{\frac{r}{2(mc^2 - \tilde{1})}} \right], \quad (1.19)$$

$$\pi^j(t = 0) = cmr \sqrt{\frac{3}{\lambda(\tilde{1} - mc^2)}} \operatorname{sech}^2 \left[\delta x \left(j - \frac{N}{4} \right) \sqrt{\frac{r}{2(mc^2 - \tilde{1})}} \right]. \quad (1.20)$$

On souhaite vérifier la validité de l'approximation (1.9) du terme élastique. Dans cette objectif, nous allons propager une solution en soliton dans le système. L'approximation de l'évolution temporelle ayant déjà été mise à l'épreuve avec succès, il est légitime de supposer que les éventuelles erreurs de propagation ou de déformation du soliton sont directement imputables à l'approximation de la dérivée spatiale par le schéma de NEWTON. On représente sur la FIGURE 1 la propagation d'un soliton pour différentes finesses de discrétisation spatiale. On constate sans surprise que le raffinement du maillage assure un meilleur comportement du soliton (déformation mais aussi vitesse de propagation).

Afin de formaliser quantitativement l'influence du pas de discrétisation spatiale, on définit la variance de l'écart de la solution numérique après propagation à la solution analytique attendue :

$$\sigma_\phi^{(N)} = \sqrt{\frac{g}{-6r} \left\langle \left(\phi_j(T) - \phi_j^{\text{th}}(T) \right)^2 \right\rangle_N}, \quad (1.21)$$

où on discrétise spatialement sur N points. On représente sur la FIGURE 2, $\sigma_\phi^{(N)}$, qui caractérise l'erreur de comportement du soliton à la fin de la propagation, en fonction de la finesse spatiale du maillage. On constate que cette erreur tend à se réduire avec l'augmentation du nombre de points de discrétisation. On peut donc supposer que l'approximation du terme élastique par le schéma numérique

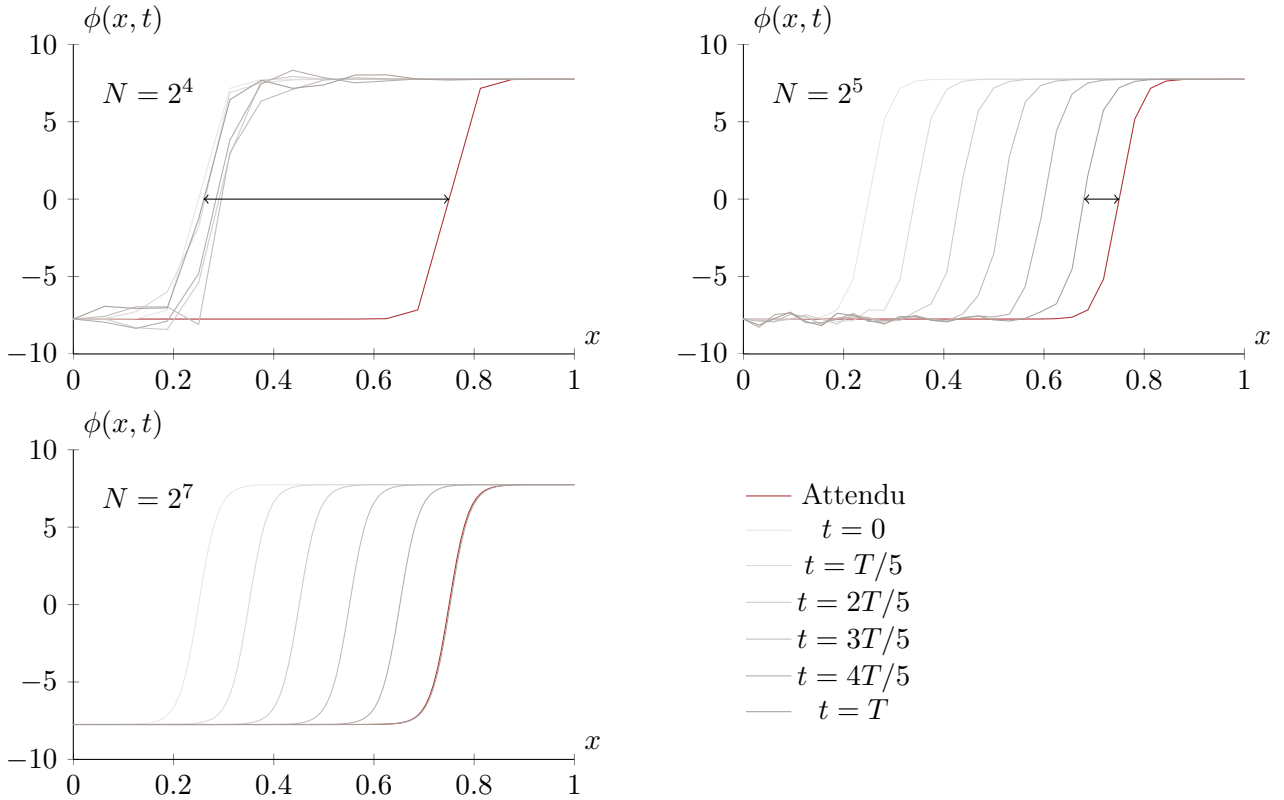


FIGURE 1 – Propagation du soliton initial pour différentes finesses de discrétisation spatiale. On a utilisé un pas de temps $\delta t = 10^{-4}$ sur un temps d'intégration $T = 1$. Les paramètres ont été choisis afin qu'ils vérifient la condition (1.18) et que le soliton se propage sur la moitié de l'intervalle (on ne fait pas rebondir le soliton contre le bord du domaine car la dynamique de ce phénomène est plus complexe que la simple propagation du soliton, sa vitesse de propagation devient alors variable, créant ainsi un écart à la solution attendue non imputable à la discrétisation spatiale) : $L = 1$, $c = L/2T = 1/2$, $m = 1$, $r = -1000$ et $\lambda = 100$

de NEWTON est convergent et qu'en première approche il sera suffisant pour étudier la dynamique du champ, éventuellement au prix d'un grand nombre de points de discrétisation. Cependant il apparaît une limite dans la convergence : pour un pas de temps donné, δt , si le pas de discrétisation spatiale, $\delta x = L/N$, devient trop faible, la solution numérique diverge. Dans ce cas, ce n'est pas seulement l'erreur $\sigma_\phi^{(N)}$ qui augmente mais bel et bien la solution numérique qui n'est plus bornée. Les pas de temps et d'espace ne peuvent donc pas tendre à s'annuler de manière indépendante si l'on veut que la solution numérique ne diverge pas : cette contrainte est imposée par la condition de COURANT – FRIEDRICHS – LEWY (CFL),

$$\mathcal{C} = \frac{\delta t}{\sqrt{m} \delta x} \leq \mathcal{C}_{\text{crit}} = 0,10112359550561796 , \quad (1.22)$$

dont on donne plus de détails dans l'annexe B.

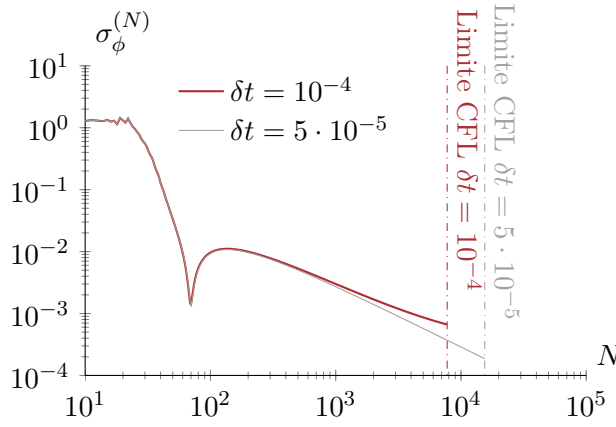


FIGURE 2 – Déformation d'un soliton en fonction du pas de discrétisation du schéma de NEWTON, suite à une propagation pendant $T = 1$, avec l'intégrateur symplectique d'ordre 4, pour des pas de temps $\delta t = 10^{-4}$ et $\delta t = 5 \cdot 10^{-5}$. On a utilisé les paramètres $L = 1$, $c = L/2T = 1/2$, $m = 1$, $r = -1000$ et $\lambda = 100$

À ce stade, nous sommes en mesure de simuler numériquement la dynamique classique du champ tout en contrôlant la pertinence des approximations nécessaires à cette tâche. Cependant, avant de pouvoir nous intéresser à la dynamique hors d'équilibre, il nous reste à nous pencher sur la question des conditions initiales.

1.2.4 Conditions initiales

On peut imaginer bien des moyens permettant de forcer un système hors d'équilibre mais ici, nous nous restreindrons au cas d'une dynamique de relaxation post trempe : on suppose le système à l'équilibre de BOLTZMANN décrit par un Hamiltonien

$$H_0[\phi, \pi] = \int_{\mathbb{R}} dx \left[\frac{\pi^2}{2m} + \frac{\tilde{1}}{2} (\partial_x \phi)^2 + \frac{r_0}{2} \phi^2 \right]. \quad (1.23)$$

Puis à l'instant initial, $t = 0$, on modifie brutalement le Hamiltonien, de (1.23) à (1.4) et on observe la dynamique hors d'équilibre avant la thermalisation.

On souhaite donc tirer une distribution aléatoire du champ et de son moment conjugué (une configuration) qui suit une loi de probabilité donnée par le facteur de BOLTZMANN³

$$P[\phi, \pi] = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_0[\phi, \pi]}, \quad (1.24)$$

où Z est la fonction de partition⁴ donnée par

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi e^{-\beta H_0[\phi, \pi]}.$$

Étant donnée la forme du Hamiltonien (1.23), la densité de probabilité (1.24) peut se récrire indépendamment pour le champ et son moment conjugué

$$P[\phi, \pi] = P[\phi].P[\pi],$$

avec

$$P[\phi] = \frac{1}{Z_\phi} \exp\left(-\beta \int dx \left[\frac{\tilde{1}}{2} (\partial_x \phi)^2 + \frac{r_0}{2} \phi^2 \right]\right), \quad (1.25)$$

$$P[\pi] = \frac{1}{Z_\pi} \exp\left(-\beta \int dx \frac{\pi^2}{2m}\right), \quad (1.26)$$

où

$$Z_\phi = \int \mathcal{D}\phi \exp\left(-\beta \int dx \left[\frac{\tilde{1}}{2} (\partial_x \phi)^2 + \frac{r_0}{2} \phi^2 \right]\right),$$

$$Z_\pi = \int \mathcal{D}\pi \exp\left(-\beta \int dx \frac{\pi^2}{2m}\right).$$

Ces densités de probabilité étant gaussiennes (H_0 est le modèle gaussien), nous sommes donc en mesure de tirer aléatoirement des configurations initiales suivant la loi (1.24). On donne en annexe C plus de détails sur la procédure employée en pratique pour obtenir de telles configurations et on représente sur la FIGURE 3 des configurations typiques du champ et de son moment conjugué.

Pour compléter la caractérisation de la distribution initiale, on donne les caractéristiques de la distribution initiale de l'énergie :

$$\langle E \rangle_{\mathcal{N}} = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}\phi \mathcal{D}\pi H_0[\phi, \pi] e^{-\beta H_0[\phi, \pi]} = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{N}{\beta},$$

$$\sigma_E^2 = \left\langle (E - \langle E \rangle_{\mathcal{N}})^2 \right\rangle_{\mathcal{N}} = \langle E^2 \rangle_{\mathcal{N}} - \langle E \rangle_{\mathcal{N}}^2 = \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} = \frac{N}{\beta^2},$$

$$\langle E_C \rangle_{\mathcal{N}} = -\frac{\partial \log Z_\pi}{\partial \beta} = \frac{N}{2\beta} = \frac{\langle E \rangle_{\mathcal{N}}}{2},$$

$$\sigma_{E_C}^2 = \frac{\partial^2 \log Z_\pi}{\partial \beta^2} = \frac{N}{2\beta^2}, = \frac{\sigma_E^2}{2}$$

$$\langle E_P \rangle_{\mathcal{N}} = -\frac{\partial \log Z_\phi}{\partial \beta} = \frac{N}{2\beta} = \frac{\langle E \rangle_{\mathcal{N}}}{2},$$

$$\sigma_{E_P}^2 = \frac{\partial^2 \log Z_\phi}{\partial \beta^2} = \frac{N}{2\beta^2} = \frac{\sigma_E^2}{2},$$

3. Dans un souci de clarté, on utilise ici la formulation continue. Toutefois, la discrétisation est traitée en détails dans l'annexe C.

4. Il ne sera pas nécessaire de la calculer explicitement car elle ne servira ici que de facteur de normalisation.

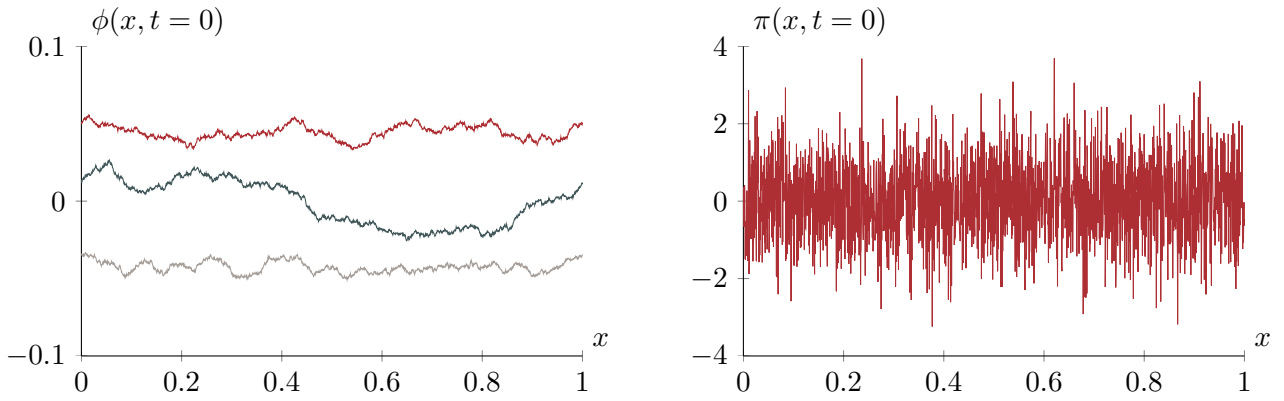


FIGURE 3 – Trois configurations typiques du champ ϕ (à gauche) et une configuration typique du champ conjugué π (à droite) à l'équilibre thermodynamique, avant la trempe, avec $r_0 = 1$, $m = 1$, $L = 1$, $N = 2^{11}$ et $\beta = 1$

où $\langle \cdot \rangle_{\mathcal{N}}$ est la moyenne statistique sur \mathcal{N} réalisations. On reconnaît bien le théorème d'équipartition de l'énergie.

Désormais, nous pouvons obtenir une configuration initiale à l'équilibre pour le modèle gaussien, puis intégrer numériquement les équations du mouvement du modèle ϕ^4 en maîtrisant les approximations inhérentes à la discrétisation. Ainsi, nous allons maintenant pouvoir nous intéresser à la dynamique hors d'équilibre de la théorie ϕ^4 suite à une trempe depuis un état d'équilibre du modèle gaussien (ajout du terme d'interaction). Dans un premier temps, nous étudierons le passage vers la phase de symétrie brisée, et nous rappellerons les idées relatives au « coarsening », puis dans un second temps le passage vers la phase symétrique où nous nous intéresserons à l'existence ou non d'un phénomène de pré - thermalisation dans le cadre d'une dynamique purement classique.

2 Dynamique hors d'équilibre

La trempe est un procédé très utilisé dans l'industrie métallurgique qui permet de modifier les propriétés mécaniques d'un matériau (notamment pour le traitement des métaux afin d'en augmenter la dureté). Elle consiste à refroidir plus ou moins brutalement une pièce mécanique initialement chauffée au dessus d'une température critique (à l'équilibre thermodynamique dans cette phase). Ce refroidissement brutal fige le matériau dans la phase haute température ou bien dans une phase métastable. Ces phases, hors d'équilibre, sont différentes de l'état normal à température ambiante et c'est ce « désordre gelé » qui modifie les propriétés mécaniques du matériau.

Plus généralement, on entend ici par « trempe », le fait de modifier brutalement des paramètres du système pour le placer hors d'équilibre. Comme nous l'indiquons déjà plus tôt, on considère que le système, décrit par le modèle gaussien, est à l'équilibre à l'instant initial. Puis, on étudie l'évolution temporelle dictée par les équations du mouvement classique de la théorie ϕ^4 . Dans un premier temps, nous allons considérer la trempe vers la phase où la symétrie \mathbb{Z}_2 est brisée spontanément. Ensuite, nous nous intéresserons au cas où cette symétrie est préservée.

2.1 Trempe vers la phase de symétrie brisée – « coarsening »

Le « coarsening » est un phénomène relativement bien compris. Toutefois, nous ne prétendons pas en faire une présentation exhaustive et nous nous cantonnerons aux idées à l'origine de la similitude avec la pré - thermalisation.

On s'intéresse ici à la trempe décrite par la FIGURE 4. On simule alors la dynamique hors d'équilibre avec les méthodes présentées précédemment, et on utilise les paramètres

$$m = 1, \quad r_0 = -r = 10^4, \quad \lambda = 10^8, \quad L = 1, \quad N = 2^{11}, \quad \delta t = 2 \cdot 10^{-5}, \quad \beta = 10^{-1}, \quad \mathcal{N} = 7800.$$

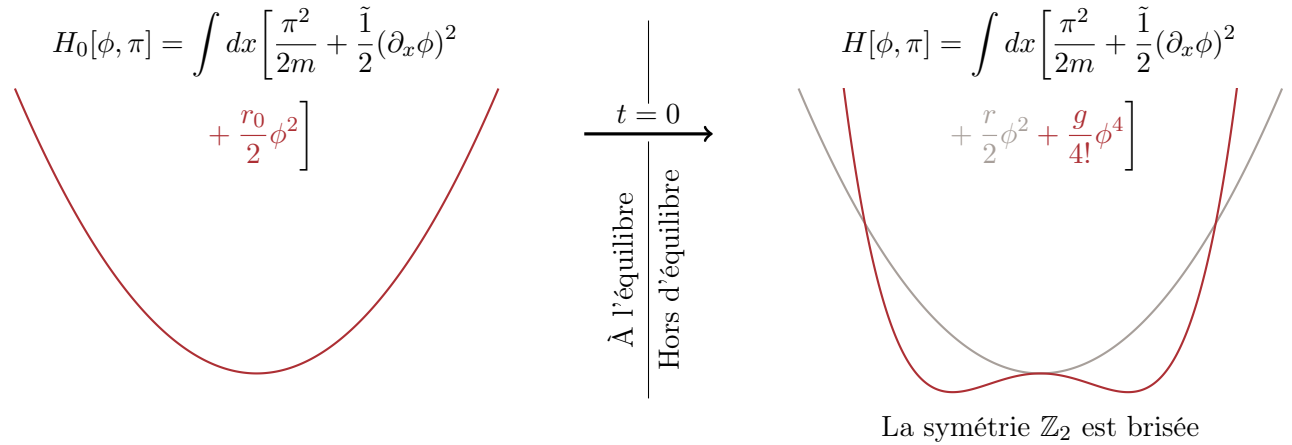


FIGURE 4 – Trempe vers la phase de symétrie brisée

Ainsi, on représente sur la FIGURE 5 les résultats obtenus : de haut en bas et en fonction du temps, on a :

- une configuration typique du champ,
- l'histogramme des valeurs du champ sur N points et \mathcal{N} réalisations,

- la moyenne sur les réalisations, de l'énergie totale, cinétique et potentielle (on y intègre l'énergie due au couplage entre voisins),
- la moyenne sur les réalisations,

$$n_p = \langle \tilde{\phi}_p \tilde{\phi}_{-p} \rangle_{\mathcal{N}} = \langle \tilde{\phi}_p \tilde{\phi}_p^* \rangle_{\mathcal{N}} = \langle |\tilde{\phi}_p|^2 \rangle_{\mathcal{N}},$$

qui représente l'analogie classique du nombre d'occupation du mode $k = p \delta k$,

- la moyenne sur les réalisations,

$$\langle \tilde{\pi}^p \tilde{\pi}^{-p} \rangle_{\mathcal{N}} = \langle \tilde{\pi}^p \tilde{\pi}^{p*} \rangle_{\mathcal{N}} = \langle |\tilde{\pi}^p|^2 \rangle_{\mathcal{N}},$$

qui ne doit plus dépendre de $k \equiv p$ dès lors que l'équation d'état est établie.

Les deux premiers tracés de la FIGURE 5 nous donnent une bonne représentation pour comprendre les différentes phases de la dynamique du champ : initialement le champ est, aux fluctuations près, sur le maximum local du potentiel. L'énergie est alors stockée sous les trois formes possibles : cinétique, potentielle et élastique (couplage entre voisins). Une première phase de la dynamique voit le champ se déséquilibrer et tomber pour partie dans le premier puits et, pour le reste, dans le second puits. Ainsi, le champ se sépare en domaines correspondant à l'un ou l'autre des minima du potentiel. L'énergie potentielle perdue est transférée aux fluctuations ainsi qu'au couplage entre voisins, principalement aux frontières des domaines. L'étape suivante de la dynamique est la croissance des domaines, qui s'agglomèrent pour s'élargir. C'est ce phénomène que l'on nomme « coarsening ». Puis, progressivement, l'un des domaines va disparaître au profit du second, créant ainsi une valeur moyenne spatiale du champ, $\langle \phi_j \rangle_N$, non nulle. L'énergie est alors stockée presque exclusivement sous forme cinétique et élastique. Bien entendu, si les fluctuations sont suffisantes par rapport à la profondeur du puits, rien n'empêche de voir réapparaître localement le domaine qui ne la pas emporté et même assister à un renversement de $\langle \phi_j \rangle_N$.

Le « coarsening » présente deux caractéristiques décisives montrant la similitude avec la pré - thermalisation : premièrement, l'existence de différentes échelles de temps. En effet, comme le montre la FIGURE 5, différentes observables peuvent thermaliser sur des échelles temporelles caractéristiques très différentes. Deuxièmement, la notion de dynamique en deux étapes : une dynamique rapide, qui comble la majeure partie de l'écart entre la valeur initiale et la valeur thermalisée d'une observable. Cette dynamique rapide est suivie par une dynamique bien plus lente qui conduit à sa thermalisation complète.

Nous avons présenté dans les grandes lignes les idées relatives au « coarsening » et nous allons maintenant développer la notion de pré - thermalisation. Nous allons voir apparaître les similitudes entre ces deux phénomènes bien que leur nature soit fondamentalement différente. En effet, même si la pré - thermalisation est encore mal comprise, la symétrie \mathbb{Z}_2 n'étant pas brisée, la notion de domaine n'a, à priori, plus lieu d'être.

2.2 Trempe vers la phase symétrique et pré - thermalisation

La notion de pré - thermalisation est notamment introduite dans [5] pour des problèmes de cosmologie, c'est à dire, dans le cadre d'une théorie quantique des champs, hors d'équilibre. On pourra compléter cette référence par [3, 4, 6] et, pour une approche statistique, par [1, 7, 10, 11].

La pré - thermalisation est caractérisée, d'une part, par l'existence d'échelles temporelles caractéristiques très différentes selon les observables. En particulier, l'établissement d'une équation d'état sur une échelle de temps considérablement plus courte que le temps nécessaire à la thermalisation du système (c'est à dire, pour que le nombre d'occupation ait atteint sa distribution stationnaire). D'autre part, la pré - thermalisation est caractérisée par une dynamique en plusieurs étapes : une première période

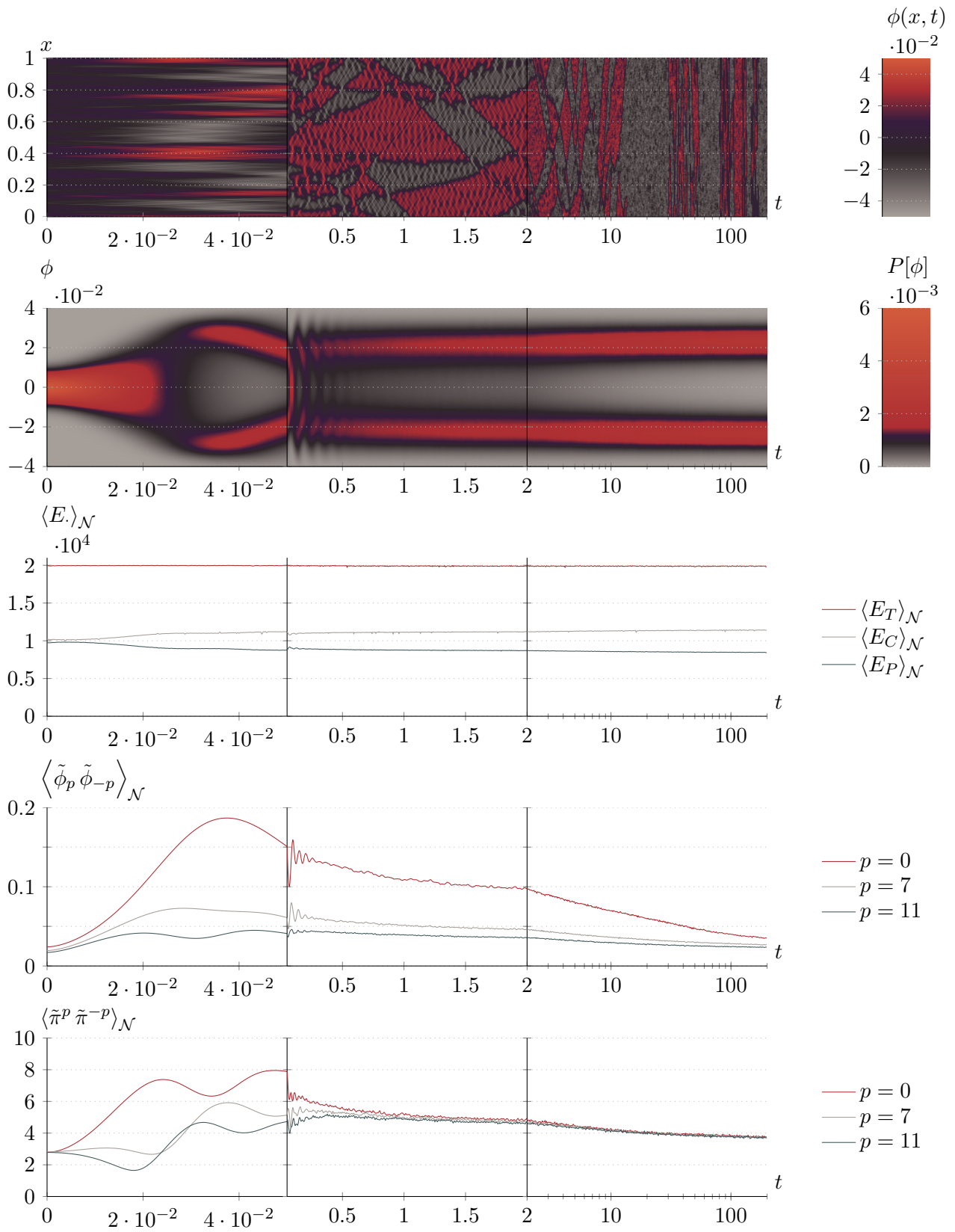


FIGURE 5 – Résultats des simulations de la dynamique hors d'équilibre dans la phase où la symétrie \mathbb{Z}_2 est spontanément brisée

de variation rapide, suivie d'une période bien plus longue, avant la thermalisation complète de l'observable. On reconnaît là une similitude déconcertante entre les manifestations de la pré-thermalisation et celle du « coarsening ». Toutefois, comme nous le disions déjà plus tôt, ces deux phénomènes n'ont apparemment pas d'origine commune.

On s'intéresse désormais à la trempe décrite par la FIGURE 6. On simule alors la dynamique hors d'équilibre avec les paramètres

$$m = 1, \quad r_0 = r = 1, \quad \lambda = 10^8, \quad L = 1, \quad N = 2^{11}, \quad \delta t = 2 \cdot 10^{-5}, \quad \beta = 10^{-1}, \quad \mathcal{N} = 9400.$$

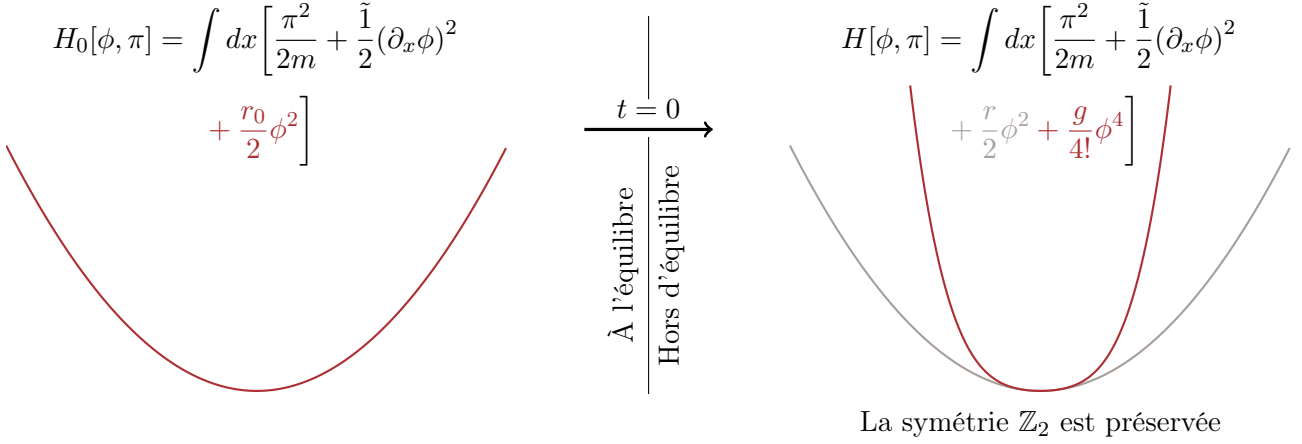


FIGURE 6 – Trempe vers la phase symétrique

On représente sur la FIGURE 7 les résultats obtenus : on trace les mêmes observables que sur la FIGURE 5, mais en plus on a appliqué une méthode de Monte-Carlo, à la suite de l'évolution temporelle, afin de vérifier si le système est thermalisé ou non. L'indice n correspond au nombre de fois où tous les points du champ (le champ et, indépendamment, son moment conjugué) ont eu la possibilité d'évoluer. Plus précisément, au rang n , on a appliqué la procédure de Monte - Carlo sur nN points du champ et de son moment conjugué.

Premièrement, on constate l'existence d'une dynamique en plusieurs étapes. En effet, les énergies cinétique et potentielle, pour lesquelles c'est particulièrement flagrant, réalisent la majeure partie de leur évolution sur un temps très court (de l'ordre de 10^{-1}) puis convergent lentement ($> 10^2$) vers leur valeur thermalisée, à savoir l'équipartition de l'énergie.

Ensuite, on constate que la première étape de la dynamique, qui comble la majeure partie de l'écart à la valeur d'équilibre, s'effectue sur des temps très différents selon les observables : elle s'étale sur un temps de 3 pour $\langle \tilde{\pi}^p \tilde{\pi}^{-p} \rangle_{\mathcal{N}}$ et $\langle \tilde{\phi}_p \tilde{\phi}_{-p} \rangle_{\mathcal{N}}$, contre seulement $2 \cdot 10^{-2}$ pour les $\langle E \rangle_{\mathcal{N}}$.

Enfin, on constate l'établissement d'une équation d'état sur un temps de l'ordre de 10^2 (traduit par le fait que $\langle \tilde{\pi}^p \tilde{\pi}^{-p} \rangle_{\mathcal{N}}$ ne dépend plus de $k \equiv p$) alors que le système n'est pas encore thermalisé. En effet, l'application de l'algorithme de Monte-Carlo le met clairement en évidence, en permettant une évolution significative de l'observable $\langle \tilde{\pi}^p \tilde{\pi}^{-p} \rangle_{\mathcal{N}}$.

Ces éléments, en adéquation avec les observations faites sur la pré-thermalisation dans le contexte quantique, nous portent à croire que c'est bien ce phénomène que nous avons observé ici, dans le cadre d'une dynamique purement classique.

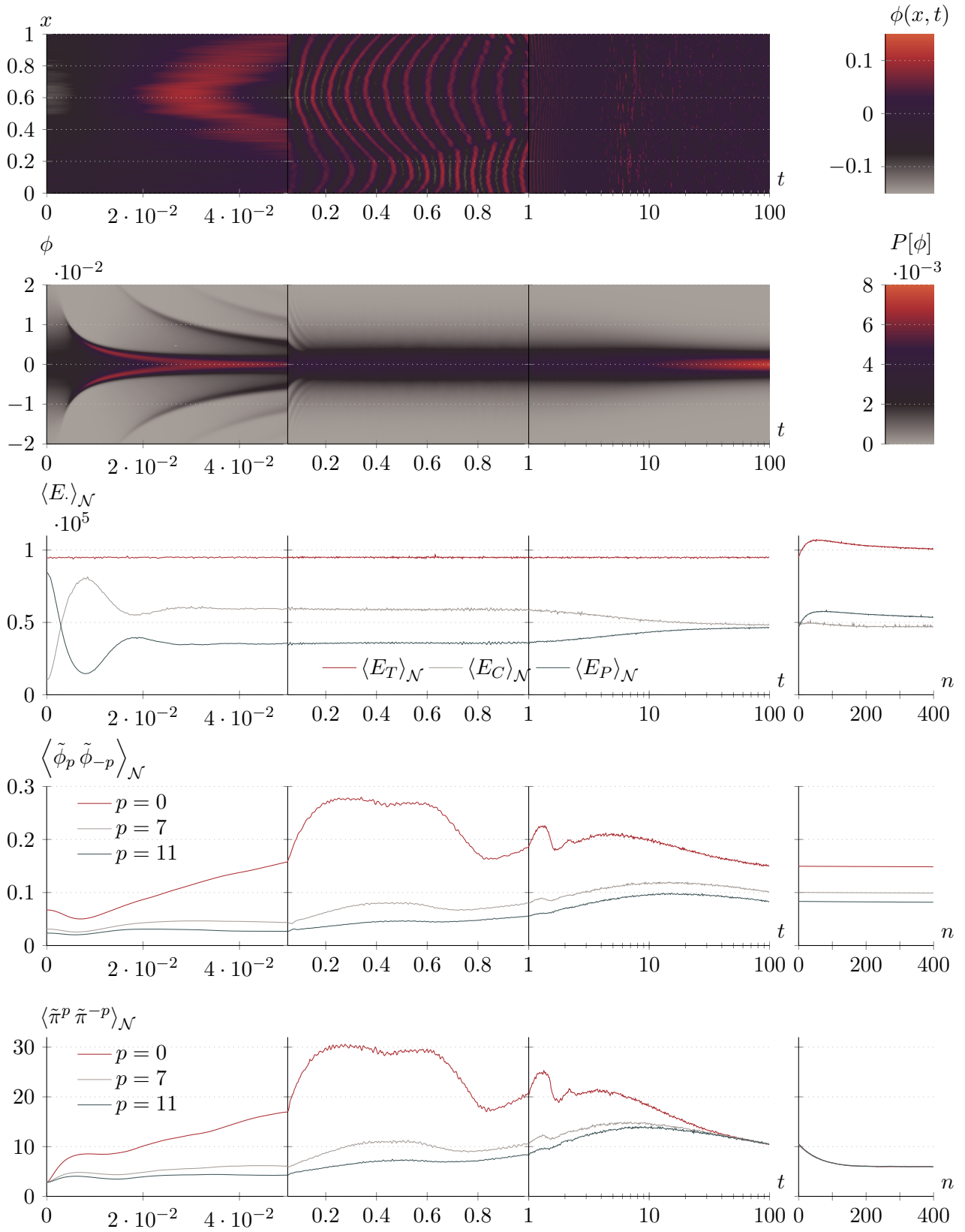


FIGURE 7 – Résultats des simulations de la dynamique hors d'équilibre dans la phase où la symétrie \mathbb{Z}_2 est préservée

Conclusion

Nous avons donc vu, dans un premier temps, comment simuler la dynamique classique du système tout en conservant un certain contrôle sur les approximations inhérentes à la numérisation. Ensuite, nous avons appliqué ces méthodes à la théorie de champ scalaire ϕ^4 en dimension $d = 1 + 1$ afin d'en étudier la dynamique hors d'équilibre ; et plus particulièrement, la dynamique post trempe avec des conditions initiales gaussiennes. Ainsi, nous avons pu mettre en évidence les similitudes entre les manifestations de la pré - thermalisation et celles du « coarsening ».

Ce qui nous intéresse en premier lieu, c'est d'avoir pu observer, dans le cadre d'une dynamique purement classique, le phénomène de pré - thermalisation, qui pour le moment avait uniquement été évoqué dans un contexte quantique. Ainsi, il semble que la pré - thermalisation ne soit pas liée à la quantification du problème. Cette première analyse nous donne quelques informations sur la nature de ce phénomène. Cependant, il serait nécessaire de comparer quantitativement dynamique classique et quantique afin d'être en mesure de conclure plus fermement. D'autre part, une exploration plus approfondie des similitudes entre « coarsening » et pré - thermalisation, notamment au travers des fonctions de corrélation à deux temps, semble également être une voie porteuse d'informations.

Références

- [1] G. AARTS, G. F. BONINI, AND C. WETTERICH, *On thermalization in classical scalar field theory*, Nuclear Physics B, 587 (2000), pp. 403 – 418.
- [2] G. ALLAIRE, *Analyse numérique et optimisation : une introduction à la modélisation mathématique et à la simulation numérique*, Mathématiques appliquées, École polytechnique, 3^e trimestre 2005, ch. 2.
- [3] J. BERGES, *Far-from-equilibrium quantum fields in particle physics and cosmology*, in Les Houches, aug 2012.
- [4] J. BERGES AND S. BORSÁNYI, *Nonequilibrium quantum fields from first principles*, The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei, 29 (2006), pp. 95 – 100.
- [5] J. BERGES, S. BORSÁNYI, AND C. WETTERICH, *Prethermalization*, Physical Review Letters, 93 (2004).
- [6] S. BORSÁNYI, *Thermal features far from equilibrium : Prethermalization*, in Strong and Electroweak Matter 2004, K. J. Eskola, K. Kainulainen, K. Kajantie, and K. Rummukainen, eds., Jan. 2005, pp. 241 – 245.
- [7] S. BORSÁNYI AND Z. SZÉP, *Relaxation of (2+1)-dimensional classical o(2) symmetric scalar fields*, Physics Letters B, 508 (2001), pp. 109 – 116.
- [8] R. COURANT, K. FRIEDRICHS, AND H. LEWY, *Über die partiellen differenzgleichungen der mathematischen physik*, Mathematische Annalen, 100 (1928), pp. 32 – 74.
- [9] T. DAUXOIS AND M. PEYRARD, *Physics of Solitons*, Cambridge University Press, june 2010, ch. 2, p. 70.
- [10] K. MARCUS, F. A. WOLF, AND M. ECKSTEIN, *Generalized gibbs ensemble prediction of prethermalization plateaus and their relation to nonthermal steady states in integrable systems*, Phys. Rev. B, 84 (2011), p. 054304.
- [11] M. SALLÉ, J. SMIT, AND J. C. VINK, *Staying thermal with hartree ensemble approximations*, Nuclear Physics B, 625 (2002), pp. 495 – 511.
- [12] H. YOSHIDA, *Construction of higher order symplectic integrators*, Physics Letters A, 150 (1990), pp. 262 – 268.

A Validité des intégrateurs symplectiques

Afin de vérifier la justesse de l'approximation numérique qui intervient dans l'intégration des équations de HAMILTON du champ et de son moment conjugué, on explicite l'action des opérateurs intervenant dans $S^{(n)}$: en utilisant (1.14), il vient

$$e^{c_i \delta t D_T} \begin{pmatrix} \vec{\phi}(t) \\ \vec{\pi}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\phi_j(t) + c_i \delta t \frac{\partial T}{\partial \pi^j}(\vec{\pi}(t)) \right)_{0 \leq j \leq N} \\ \vec{\pi}(t) \end{pmatrix},$$

$$e^{d_i \delta t D_V} \begin{pmatrix} \vec{\phi}(t) \\ \vec{\pi}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{\phi}(t) \\ \left(\pi^j(t) - d_i \delta t \frac{\partial V}{\partial \phi_j}(\vec{\phi}(t)) \right)_{0 \leq j \leq N} \end{pmatrix},$$

où la dérivée du terme cinétique, T , et respectivement du terme potentiel, V , est obtenue de (1.12) et respectivement (1.13) :

$$\frac{\partial T}{\partial \pi^j}(\vec{\pi}) = \frac{\pi^j}{m},$$

$$\frac{\partial V}{\partial \phi_j}(\vec{\phi}) = r\phi_j + \frac{\lambda}{3!}\phi_j^3 - \tilde{1} \frac{\phi_{j+1} - 2\phi_j + \phi_{j-1}}{\delta x^2}.$$

Pour tester la validité de l'algorithme, nous allons le mettre à l'épreuve sur un système dynamique dont la solution analytique est bien connue : l'oscillateur harmonique. Dans un premier temps, on ne teste que la partie intégration temporelle de l'algorithme (non vérifions la validité de la discrétisation spatiale ultérieurement). On considère un unique oscillateur harmonique unidimensionnel dont le Hamiltonien est donné par

$$H = T(\pi) + V(\phi), \quad T(\pi) = \frac{\pi^2}{2m}, \quad V(\phi) = \frac{r\phi^2}{2}, \quad \frac{\partial T}{\partial \pi} = \frac{\pi}{m} \quad \text{et} \quad \frac{\partial V}{\partial \phi} = r\phi.$$

Nous allons tester des intégrateurs symplectiques d'ordre $n = 1$ à 4 et, à titre de comparaison, la méthode RUNGE – KUTTA à l'ordre 4 (RK4) dont le schéma pour l'oscillateur harmonique considéré est donné par

$$\phi(t + \delta t) = \left[1 + \frac{r}{2}\delta t^2 \left(\frac{r}{12}\delta t^2 - 1 \right) \right] \phi(t) - \delta t \left(\frac{r}{12}\delta t^2 - 1 \right) \frac{\pi(t)}{m},$$

$$\pi(t + \delta t) = \left[1 + \frac{r}{2}\delta t^2 \left(\frac{r}{12}\delta t^2 - 1 \right) \right] \frac{\pi(t)}{m} + \delta t \left(\frac{r}{12}\delta t^2 - 1 \right) \phi(t).$$

Pour les différentes méthodes d'intégration ($\cdot = \{(1), (2), (3), (4), \text{RK4}\}$), on définit sur la durée de la simulation, T :

- σ_ϕ^\cdot , la variance de l'écart de la solution numérique à la solution analytique

$$\sigma_\phi^\cdot = \frac{1}{\phi_0} \sqrt{\left\langle (\phi^{\text{exacte}}(t) - \phi^\cdot(t))^2 \right\rangle_T}, \quad (\text{A.27})$$

- σ_E^\cdot , la variance de l'écart de l'énergie, calculée avec la solution numérique, par rapport à l'énergie initiale

$$\sigma_E^\cdot = \frac{1}{E_0} \sqrt{\left\langle (E_0 - E^\cdot(t))^2 \right\rangle_T}, \quad (\text{A.28})$$

où ϕ_0 et E_0 sont les conditions initiales respectivement en champ et énergie, et où $\langle \cdot \rangle_T$ représente la moyenne temporelle sur une période T .

On représente sur la FIGURE 8 ces variances en fonction du pas de temps en échelle log-log. On observe que les erreurs tendent bien à s'annuler avec le pas de temps, assurant ainsi une convergence certaine des différentes méthodes numériques. D'autre part, on constate sans surprise que plus l'ordre de l'intégrateur symplectique est élevé, meilleure est la convergence. Ensuite, pour un ordre donné (intégrateur symplectique d'ordre 4 et schéma RK4), il apparaît que l'intégrateur symplectique assure une bien meilleure conservation de l'énergie qu'une méthode de différences finies. Ce qui correspond à la démarche suivie pour construire les intégrateurs symplectiques. Enfin, pour l'intégrateur symplectique d'ordre 4, l'erreur commise sur l'énergie est de l'ordre 10^{-12} fois l'énergie initiale pour un pas de temps $\delta t = 10^{-4}$ sur un temps d'intégration $T = 1$. Une telle précision semble suffisante en première approximation. Cependant, elle pourra être améliorée en cas de nécessité en calculant par une des méthodes exposées dans [12] les intégrateurs d'ordre supérieur⁵. L'intégrateur d'ordre 4 n'est que 2.5 fois plus long à calculer que celui d'ordre 1 (cinq exponentielles pour l'ordre 4 contre deux pour l'ordre 1). Dans la suite, nous utiliserons donc l'intégrateur symplectique d'ordre 4 pour l'évolution temporelle.

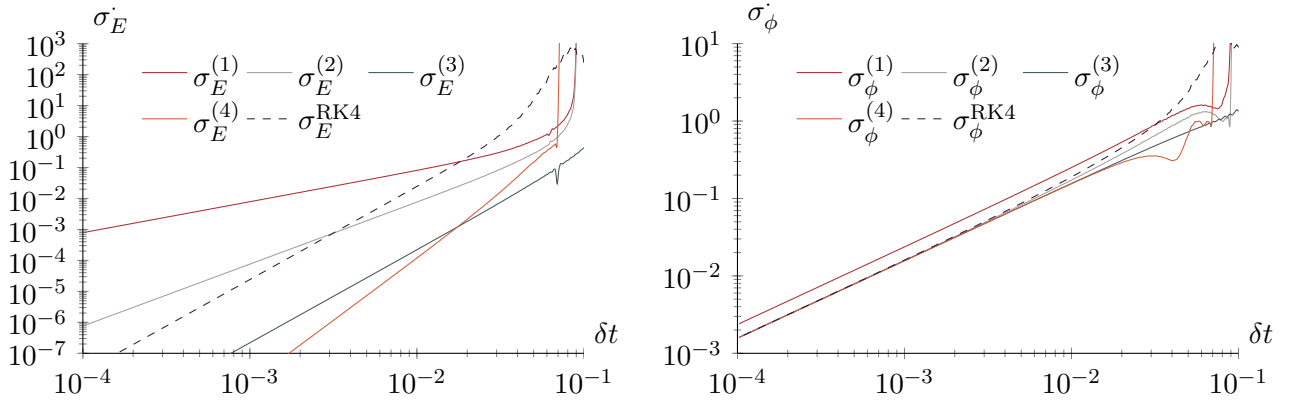


FIGURE 8 – Erreur moyenne commise sur l'énergie, σ_E (à gauche) et sur le champ, σ_ϕ (à droite) en fonction du pas de temps, pour une intégration de l'oscillateur harmonique sur une période $T = 1$, avec des intégrateurs symplectiques d'ordre $n = 1$ à 4 et une méthode RUNGE – KUTTA d'ordre 4. On a utilisé les paramètres $m = 1$ et $r = 500$

5. Toutefois, il faut garder à l'esprit que les représentations des nombres utilisées (long double) dans le programme (rédigé en C) ne possède une mantisse que de 21 chiffres significatifs et il ne faut donc pas espérer obtenir une erreur meilleure que 10^{-21} fois l'énergie initiale.

Ordre 1	$c_1 = d_1 = 1$	$(k = 1)$
$S^{(1)}(\delta t) = e^{c_1 \delta t D_T} e^{d_1 \delta t D_V} = e^{\delta t D_H + \mathcal{O}(\delta t^2)}$		
Ordre 2	$c_1 = c_2 = \frac{1}{2}, \quad d_1 = 1, \quad d_2 = 0$	$(k = 2)$
$S^{(2)}(\delta t) = e^{c_1 \delta t D_T} e^{d_1 \delta t D_V} e^{c_2 \delta t D_T} = e^{\delta t D_H + \mathcal{O}(\delta t^3)}$		
Ordre 3	$c_1 = 1, \quad c_2 = -c_3 = -\frac{2}{3}, \quad d_1 = -\frac{1}{24}, \quad d_2 = \frac{3}{4}, \quad d_3 = \frac{7}{24}$	$(k = 3)$
$S^{(3)}(\delta t) = e^{c_1 \delta t D_T} e^{d_1 \delta t D_V} e^{c_2 \delta t D_T} e^{d_2 \delta t D_V} e^{c_3 \delta t D_T} e^{d_3 \delta t D_V} = e^{\delta t D_H + \mathcal{O}(\delta t^4)}$		
Ordre 4	$c_1 = c_4 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}, \quad c_2 = c_3 = \frac{1 - 2^{1/3}}{2(2 - 2^{1/3})}, \quad d_1 = d_3 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}},$ $d_2 = -\frac{2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad d_4 = 0$	$(k = 4)$
$S^{(4)}(\delta t) = e^{c_1 \delta t D_T} e^{d_1 \delta t D_V} e^{c_2 \delta t D_T} e^{d_2 \delta t D_V} e^{c_3 \delta t D_T} e^{d_3 \delta t D_V} e^{c_4 \delta t D_T} = e^{\delta t D_H + \mathcal{O}(\delta t^5)}$		

TABLE 1 – Forme explicite des premiers ordres de l'intégrateur symplectique

B Condition de COURANT – FRIEDRICHS – LEWY

Comme nous l'avons constaté, les pas de temps et d'espace ne peuvent pas tendre à s'annuler de manière indépendante et nous allons expliciter par la méthode de VON NEUMANN, en s'inspirant largement de [2], la contrainte qu'ils doivent vérifier pour que la solution numérique ne diverge pas. On définit le nombre de COURANT, sans unités,

$$\mathcal{C} = \frac{\delta t}{\sqrt{m} \delta x}, \quad (\text{B.29})$$

où $1/\sqrt{m}$ est la vitesse maximale de l'information dans le système. En effet, l'équation de la dynamique du champ (1.2), est une équation d'onde munie d'un terme potentiel (non linéaire) qui n'influe pas sur la vitesse maximale de propagation. La condition de COURANT – FRIEDRICHS – LEWY [8], ou condition CFL, assure la non divergence de la solution numérique si

$$\mathcal{C} \leq \mathcal{C}_{\text{crit}}, \quad (\text{B.30})$$

où $\mathcal{C}_{\text{crit}}$ est une constante qui dépend uniquement de la nature de l'équation considérée et du schéma numérique utilisé (intégrateur symplectique et approximation de NEWTON). Lorsque que l'on approche l'équation de la dynamique (1.2) par un schéma numérique, le terme potentiel reste exact et n'influe donc pas sur l'éventuelle stabilité de l'approximation. On calcule donc le coefficient CFL critique, $\mathcal{C}_{\text{crit}}$, pour l'équation ($r = 0, \lambda = 0$)

$$m \partial_t^2 \phi = \partial_t \pi = \tilde{1} \partial_x^2 \phi.$$

Afin d'explicitier le schéma numérique, on retourne à la version discrétisée

$$\phi_j^n = \sqrt{\delta x} \phi(j\delta x, n\delta t) \quad \text{et} \quad \pi^{j,n} = \sqrt{\delta x} \pi(j\delta x, n\delta t),$$

de transformée de FOURIER spatiale discrète donnée par

$$\phi_j^n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{\phi}_k^n e^{\frac{2i\pi kj}{N}} \quad \text{et} \quad \pi^{j,n} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \tilde{\pi}^{k,n} e^{\frac{2i\pi kj}{N}} .$$

Ainsi, pour obtenir l'expression du schéma numérique d'un mode donné dans l'espace de FOURIER, on utilise les règles de remplacement

$$\phi_{j+l}^{n+m} \rightarrow \tilde{\phi}_k^{n+m} e^{\frac{2i\pi kl}{N}} \quad \text{et} \quad \pi^{n+m,j+l} \rightarrow \tilde{\pi}^{n+m,k} e^{\frac{2i\pi kl}{N}} ,$$

il vient,

$$\tilde{\Phi}_k^{n+1} = \left(\frac{\tilde{\phi}_k^{n+1}}{\frac{\delta t \tilde{\pi}^{k,n+1}}{m}} \right) = A_k \cdot \left(\frac{\tilde{\phi}_k^n}{\frac{\delta t \tilde{\pi}^{k,n}}{m}} \right) = A_k \cdot \tilde{\Phi}_k^n ,$$

où la matrice 2×2 , A_k , n'est autre que le schéma numérique du mode k donné par

$$(A_k)_{11} = \frac{1}{117649} \left[-76832 \left(2^{1/3} - 2 \right)^2 \mathcal{C}^2 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N} \right) + 50176 \times 2^{1/3} \left(4 \times 2^{1/3} - 5 \right) \mathcal{C}^4 \sin^4 \left(\frac{\pi k}{N} \right) \right. \\ \left. + 117649 + 32768 \left(2^{1/3} + 2 \left(1 - 2^{2/3} \right) \right) \mathcal{C}^6 \sin^6 \left(\frac{\pi k}{N} \right) \right] ,$$

$$(A_k)_{12} = \frac{4}{823543} \left[-117649 \left(2^{1/3} - 2 \right) + 64 \mathcal{C}^2 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N} \right) \left\{ 256 \left(2^{1/3} + 2 \left(1 - 2^{2/3} \right) \right) \mathcal{C}^4 \sin^4 \left(\frac{\pi k}{N} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + 784 \left(3 \left(2^{2/3} - 2^{1/3} \right) - 1 \right) \mathcal{C}^2 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N} \right) - 2401 \left(2^{1/3} - 1 \right)^2 \right\} \right] ,$$

$$(A_k)_{21} = \frac{16 \mathcal{C}^2}{16807} \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N} \right) \left[2401 \left(2^{1/3} - 2 \right) + 3136 \left(2^{1/3} - 1 \right)^2 \mathcal{C}^2 \sin^2 \left(\frac{\pi k}{N} \right) \right. \\ \left. + 1024 \left(2^{1/3} + 2 \left(1 - 2^{2/3} \right) \right) \mathcal{C}^4 \sin^4 \left(\frac{\pi k}{N} \right) \right] ,$$

$$(A_k)_{22} = (A_k)_{11} .$$

Par récursion, on a

$$\tilde{\Phi}_k^n = (A_k)^n \cdot \tilde{\Phi}_k^0 .$$

Ainsi, la solution numérique ne diverge pas pourvu que

$$\forall k \in \llbracket 0, N/2 \rrbracket , \quad \|A_k\|_p \leq 1 , \quad (\text{B.31})$$

où $\|\cdot\|_p$ est la p -norme d'une matrice, définie pour $A \in \mathcal{M}_{n \times n}(\mathbb{C})$ et $\Phi \in \mathbb{C}^n$ par

$$\|A\|_p = \sup_{\Phi \neq 0} \frac{\|A\Phi\|_p}{\|\Phi\|_p} ,$$

et où on rappelle la définition de la p -norme d'un vecteur :

$$\|\Phi\|_p = \left(\sum_{j=1}^n |\Phi \cdot \vec{e}_j|^p \right)^{1/p} .$$

En particulier, les normes les plus courantes sont données par

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |A_{ij}| ,$$

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |A_{ij}| ,$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^t A)} ,$$

où $\rho(A)$ est le rayon spectral de la matrice A , défini par

$$\rho(A) = \max_{1 \leq j \leq n} |\lambda_j| ,$$

avec $\{\lambda_j\}_{1 \leq j \leq n}$ les valeurs propres de A .

Étant donné la forme peu compacte de la matrice A_k , nous ne donnerons pas ses normes explicitement. Cependant, on constate facilement que $\max_k \|A_k\|_p - 1$ est un polynôme en \mathcal{C}^6 dont on peut obtenir les racines au moins numériquement. On obtient alors, quelle que soit la norme considérée (1, 2 ou ∞), la condition suffisante (non nécessaire) à la non divergence de la solution numérique : la condition CFL

$$\mathcal{C} = \frac{\delta t}{\sqrt{m} \delta x} \leq \mathcal{C}_{\text{crit}} = 0,10112359550561796 . \quad (1.22)$$

6. Son expression analytique n'est à priori pas simple à obtenir à cause du maximum sur k

C Tirage d'une configuration d'équilibre initiale

Nous avons vu dans la section 1.2.4 que l'on peut obtenir une configuration initiale qui est un état d'équilibre du Hamiltonien (1.23) à condition de choisir le champ ϕ et son moment conjugué π , suivant les distributions de probabilités

$$P[\phi] = \frac{1}{Z_\phi} \exp\left(-\beta \int dx \left[\frac{1}{2} (\partial_x \phi)^2 + \frac{r_0}{2} \phi^2 \right]\right), \quad (1.25)$$

$$P[\pi] = \frac{1}{Z_\pi} \exp\left(-\beta \int dx \frac{\pi^2}{2m}\right). \quad (1.26)$$

Nous allons présenter ici la méthode employée en pratique pour obtenir de telles configurations.

C.1 Le cas du champ conjugué, π

La densité de probabilité (1.26) étant Gaussienne, il ne reste plus qu'à revenir au champ discrétisé introduit en (1.7) pour être en mesure d'en tirer une configuration initiale. La densité de probabilité de ce dernier devient

$$P\left(\{\pi^j\}_{0 \leq j \leq N}\right) = \frac{1}{Z_{\{\pi^j\}}} \exp\left(-\frac{\beta}{2m} \sum_{j=0}^N \pi^{j2}\right).$$

Les différents points de discrétisation du champ n'étant pas couplés les uns aux autres, on en déduit la densité de probabilité en chaque point

$$P(\pi^j) = Z_{\{\pi^j\}}^{-\frac{1}{N+1}} \exp\left(-\frac{\beta}{2m} \pi^{j2}\right). \quad (C.32)$$

La génération de nombres aléatoires gaussiens ne posant aucun problème, nous sommes donc en mesure de générer aléatoirement le champ conjugué discrétisé, $\{\pi^j\}_{0 \leq j \leq N}$, à l'équilibre de BOLTZMANN : on tire $N + 1$ ($N + 2$ si N est pair) nombres aléatoires ζ_j de densité de probabilité uniforme sur $[0, 1]$ et on obtient les points du champ par paires avec les relations

$$\pi^j = \sqrt{\frac{-2m \log \zeta_j}{\beta}} \cos(2\pi \zeta_{j+1}), \quad (C.33)$$

$$\pi^{j+1} = \sqrt{\frac{-2m \log \zeta_j}{\beta}} \sin(2\pi \zeta_{j+1}). \quad (C.34)$$

De plus, si on souhaite imposer les conditions aux limites périodiques, on a la contrainte $\pi^N = \pi^0$. On rappelle qu'on a représenté une configuration typique obtenue par ce biais sur la FIGURE 3.

C.2 Le cas du champ, ϕ

Il est un peu plus complexe car la densité de probabilité (1.25) fait intervenir une dérivée spatiale du champ qui couple chaque point à ses voisins. La procédure utilisée pour le champ conjugué n'est donc pas identiquement applicable. Toutefois, on contourne aisément ce problème en passant dans l'espace de FOURIER et on pose $\tilde{\phi}(k, t)$ la transformée de FOURIER spatiale de $\phi(x, t)$ avec les conventions

$$\tilde{\phi}(k, t) = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} \phi(x, t) e^{-ikx} \quad \text{et} \quad \phi(x, t) = \int \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\phi}(k, t) e^{ikx}.$$

Tout calcul fait, la densité de probabilité pour le champ $\tilde{\phi}$ est donnée par

$$P\left[\tilde{\phi}(k, t=0)\right] = \frac{1}{Z_{\tilde{\phi}}} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \int dk [r_0 + \tilde{1} k^2] \tilde{\phi}(k, 0) \tilde{\phi}(-k, 0)\right).$$

Le champ dans l'espace direct étant réel, on a la contrainte dans l'espace de FOURIER $\tilde{\phi}(k, t) = \tilde{\phi}^*(-k, t)$. Dont on déduit que

$$P\left[\tilde{\phi}\right] = \frac{1}{Z_{\tilde{\phi}}} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \int dk [r_0 + \tilde{1} k^2] \left|\tilde{\phi}(k, 0)\right|^2\right). \quad (\text{C.35})$$

Cette densité de probabilité est une Gaussienne dont la largeur va en diminuant avec les modes de hautes fréquences. Puis on discrétise le champ dans l'espace de FOURIER de manière analogue à ce qui a été fait en (1.7) : $\tilde{\phi}(k, t) \rightarrow \tilde{\phi}_p(t) = \sqrt{\delta k} \tilde{\phi}(p \delta k, t)$. Cette discrétisation implique la périodisation dans l'espace direct, c'est à dire qu'on considère les conditions aux limites périodiques pour le champ : $\phi(x=0, t) = \phi(x=L, t)$. Cette condition, ainsi que la cohérence des conventions utilisées pour la transformée de FOURIER et la transformée de FOURIER discrète, imposent

$$\delta k = \frac{2\pi}{L}.$$

Le champ dans l'espace direct est lui aussi discrétisé, imposant une $(2\pi/\delta x)$ – périodisation du spectre, c'est à dire la contrainte $\tilde{\phi}_0 = \tilde{\phi}_N$.

Ainsi, les configurations

$$\{\phi_j\}_{0 \leq j \leq N} \quad \text{et} \quad \{\tilde{\phi}_p\}_{0 \leq p \leq N},$$

sont données par seulement

$$\{\phi_j\}_{0 \leq j < N} \quad \text{et} \quad \{\tilde{\phi}_p\}_{0 \leq p < N},$$

avec les contraintes de périodicité

$$\phi_0 = \phi_N \quad \text{et} \quad \tilde{\phi}_0 = \tilde{\phi}_N,$$

et sont reliés l'une à l'autre par la transformée de FOURIER discrète :

$$\tilde{\phi}_p(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=0}^{N-1} \phi_j(t) e^{-\frac{2i\pi j p}{N}} \quad \text{et} \quad \phi_j(t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{p=0}^{N-1} \tilde{\phi}_p(t) e^{\frac{2i\pi j p}{N}}.$$

Nous calculerons cette dernière par l'algorithme de transformée de FOURIER rapide (FFT) qui impose un nombre d'échantillons en puissance de 2, ie $N = 2^m$.

De plus, le champ dans l'espace direct doit être réel, imposant les contraintes supplémentaires

$$\tilde{\phi}_p = \tilde{\phi}_{N-p}^*, \quad \tilde{\phi}_0 \in \mathbb{R} \quad \text{et} \quad \tilde{\phi}_{\frac{N}{2}} \in \mathbb{R}.$$

D'autre part, la procédure de discrétisation se résume par les règles suivantes :

$$\int dk \rightarrow \delta k \sum_{p=0}^{N-1}, \quad k \rightarrow p \delta k, \quad \tilde{\phi}(k, t) \rightarrow \frac{\tilde{\phi}_p(t)}{\sqrt{\delta k}},$$

dont on déduit la densité de probabilité pour le champ discrétisé dans l'espace de FOURIER

$$P\left(\left\{\tilde{\phi}_p\right\}_{0 \leq p \leq N/2}\right) = \frac{1}{Z_{\{\tilde{\phi}_p\}}} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{p=0}^{N-1} [r_0 + \tilde{1} p^2 \delta k^2] \left|\tilde{\phi}_p\right|^2\right).$$

Le passage dans l'espace de FOURIER a permis de découpler les points de discrétisation du champ les uns des autres. On peut donc écrire la densité de probabilité de la transformée de FOURIER du champ en chaque point de discrétisation

$$P(\tilde{\phi}_p) = Z_{\{\tilde{\phi}_p\}}^{-\frac{1}{N}} \exp\left(-\frac{\beta}{2}[r_0 + \tilde{1} p^2 \delta k^2] |\tilde{\phi}_p|^2\right), \quad (\text{C.36})$$

$$= Z_{\{\tilde{\phi}_p\}}^{-\frac{1}{N}} \exp\left(-\frac{\beta}{2}[r_0 + \Gamma_p^F] |\tilde{\phi}_p|^2\right) = Z_{\{\tilde{\phi}_p\}}^{-\frac{1}{N}} \exp\left(-\frac{1}{2 \Sigma_p^F} |\tilde{\phi}_p|^2\right). \quad (\text{C.37})$$

On note qu'elle ne contraint que le module du nombre aléatoire tandis que sa phase, elle, reste libre. Nous la tirerons donc aléatoirement avec une densité de probabilité uniforme sur $[0, 2\pi]$.

Finalement, en associant la densité de probabilité (C.36) aux contraintes exposées précédemment, puis via une FFT, nous sommes en mesure d'en déduire une configuration du champ discrétisé $\{\phi_j\}_{0 \leq j < N}$ à l'équilibre de BOLTZMANN : on tire $N/2 + 1$ nombres aléatoires $\{\xi_p\}_{0 \leq p \leq N/2}$ de densité de probabilité uniforme sur $[0, 1]$ ainsi que $N/2 - 1$ nombres aléatoires $\{\varphi_p\}_{0 < p < N/2}$ de densité de probabilité uniforme sur $[0, 1]$ et on obtient les points du champ par paires avec les relations

$$\tilde{\phi}_0 = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_0}{\beta r_0}} \cos\left(2\pi \xi_{\frac{N}{2}}\right), \quad (\text{C.38})$$

$$\tilde{\phi}_{\frac{N}{2}} = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_0}{\beta [r_0 + \tilde{1} N^2 \delta k^2 / 4]}} \sin\left(2\pi \xi_{\frac{N}{2}}\right), \quad (\text{C.39})$$

puis, pour $0 < p < N/2$,

$$\tilde{\phi}_p = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_p}{\beta [r_0 + \tilde{1} p^2 \delta k^2]}} \cos(2\pi \xi_{p+1}) e^{2i\pi \varphi_p}, \quad (\text{C.40})$$

$$\tilde{\phi}_{p+1} = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_p}{\beta [r_0 + \tilde{1} (p+1)^2 \delta k^2]}} \sin(2\pi \xi_{p+1}) e^{2i\pi \varphi_{p+1}}, \quad (\text{C.41})$$

$$\tilde{\phi}_{N-p} = \tilde{\phi}_p^*. \quad (\text{C.42})$$

On remarque que les N points indépendants du champ, $\{\phi_j\}_{0 \leq j < N}$, sont bien donnés par $N/2 + 1 + N/2 - 1 = N$ variables aléatoires indépendantes, de densité de probabilité uniforme sur $[0, 1]$.

Cette procédure, bien que rigoureuse, ne fonctionne pas dans les faits : l'équipartition de l'énergie n'est pas satisfaite et les configurations ainsi obtenues ne sont pas à l'équilibre. La raison de cet échec tient au fait qu'en discrétisant le champ dans l'espace de FOURIER, on ne tient pas compte de l'approximation de NEWTON pour le terme élastique. Le Hamiltonien discrétisé étant calculé avec cette approximation, le champ donné par la densité de probabilité (C.36) ne peut en être une configuration d'équilibre. On reprend donc la démarche précédente en discrétisant dans l'espace direct afin de prendre en compte l'approximation de NEWTON et ainsi obtenir une distribution de probabilité compatible avec la version discrétisée du Hamiltonien (1.23). Suivant la procédure de discrétisation (1.7), on obtient de (1.25),

$$P(\{\phi_j\}_{0 \leq j < N}) = \frac{1}{Z_{\{\phi_j\}}} \exp\left(-\frac{\beta}{2} \sum_{j=0}^{N-1} \left[\left(\frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{\delta x}\right)^2 + r_0 \phi_j^2 \right]\right),$$

puis par transformation de FOURIER discrète, il vient

$$P(\tilde{\phi}_p) = Z_{\{\tilde{\phi}_p\}}^{-\frac{1}{N}} \exp\left(-\frac{\beta}{2}\left[r_0 + \tilde{2} \frac{1 - \cos \frac{2\pi p}{N}}{\delta x^2}\right] |\tilde{\phi}_p|^2\right) \underset{p \rightarrow 0}{\sim} \quad (\text{C.36}), \quad (\text{C.43})$$

$$= Z_{\{\tilde{\phi}_p\}}^{-\frac{1}{N}} \exp\left(-\frac{\beta}{2}[r_0 + \Gamma_p^D] |\tilde{\phi}_p|^2\right) = Z_{\{\tilde{\phi}_p\}}^{-\frac{1}{N}} \exp\left(-\frac{1}{2\Sigma_p^D} |\tilde{\phi}_p|^2\right). \quad (\text{C.44})$$

On constate sans surprise que l'approximation de NEWTON modifie principalement les modes de hautes fréquences. Et on représente sur la FIGURE 9 les caractéristiques des distributions gaussiennes (C.37) et (C.44) mettant ainsi en évidence cette caractéristique.

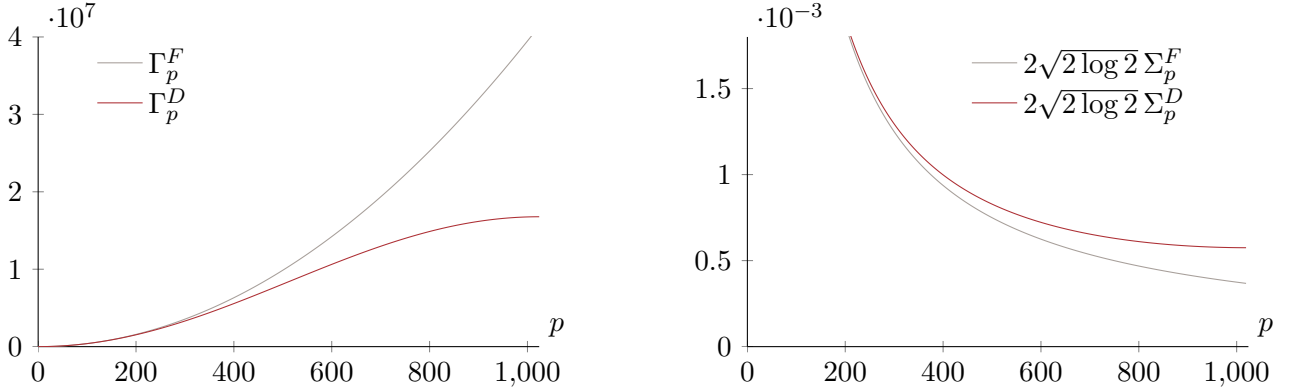


FIGURE 9 – Caractéristiques des distributions gaussiennes définies par (C.37), discrétisation dans l'espace de FOURIER, et (C.44) discrétisation dans l'espace direct compatible avec l'approximation de NEWTON : la dépendance en p (à gauche) et la largeur à mi-hauteur (à droite).

Les relations (C.38) à (C.42) deviennent

$$\tilde{\phi}_0 = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_0}{\beta r_0}} \cos\left(2\pi \xi_{\frac{N}{2}}\right), \quad (\text{C.45})$$

$$\tilde{\phi}_{\frac{N}{2}} = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_0}{\beta [r_0 + \tilde{4}/\delta x^2]}} \sin\left(2\pi \xi_{\frac{N}{2}}\right), \quad (\text{C.46})$$

puis, pour $0 < p < N/2$,

$$\tilde{\phi}_p = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_p}{\beta [r_0 + \tilde{2}(1 - \cos(2\pi p/N))/\delta x^2]}} \cos(2\pi \xi_{p+1}) e^{2i\pi \varphi_p}, \quad (\text{C.47})$$

$$\tilde{\phi}_{p+1} = \sqrt{\frac{-2 \log \xi_p}{\beta [r_0 + \tilde{2}(1 - \cos(2\pi(p+1)/N))/\delta x^2]}} \sin(2\pi \xi_{p+1}) e^{2i\pi \varphi_{p+1}}, \quad (\text{C.48})$$

$$\tilde{\phi}_{N-p} = \tilde{\phi}_p^*. \quad (\text{C.49})$$

Ainsi, en utilisant ces relations puis par application d'une FFT, nous sommes en mesure de tirer une configuration d'équilibre du Hamiltonien (1.23) discrétisé qui vérifie donc bien l'équipartition de l'énergie. On rappelle qu'on a représenté sur la FIGURE 3 une configuration typique obtenue par ce

biais.

On représente sur la FIGURE 10 les densités de probabilités théoriques (C.32) et (C.36) ainsi que les histogrammes en π^j , ϕ_j , $\tilde{\phi}_{p=0}$ et $\tilde{\phi}_{p=N/2}$ de configurations obtenues numériquement. La concordance manifeste entre les distributions théoriques et simulées conforte la validité de l'algorithme. Nous sommes donc bien en mesure de tirer aléatoirement une configuration dont la densité de probabilité correspond à l'équilibre de BOLTZMANN du Hamiltonien (1.23).

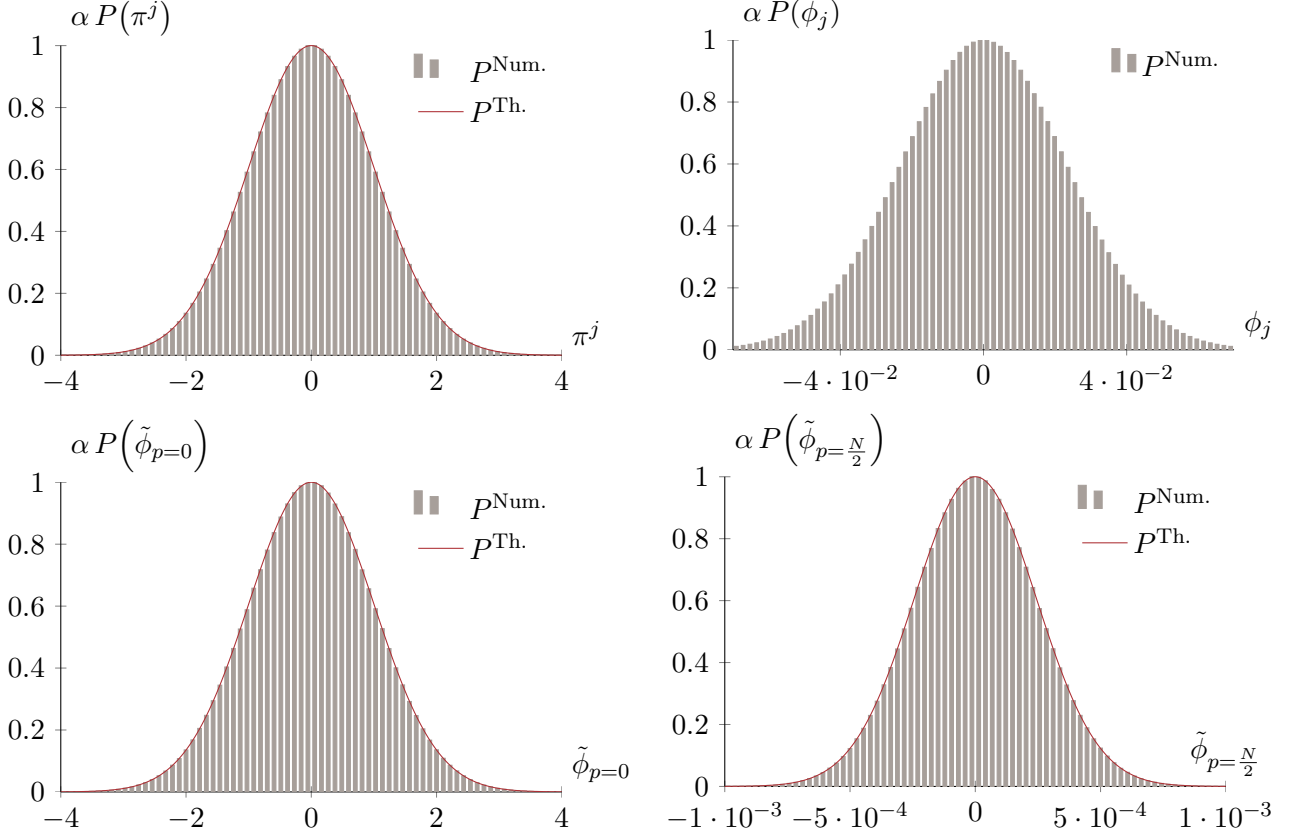


FIGURE 10 – Densités de probabilités théoriques et simulées obtenue sur $\mathcal{N} = 10^7$ tirages de configurations initiales avec les paramètres $N = 2^{11}$, $r_0 = 1$, $m = 1$, $L = 1$ et $\beta = 1$. À chaque tirage de configuration, on ajoute $N + 1$ π^j et ϕ_j à leurs histogrammes respectifs et une valeur aux histogrammes de $\tilde{\phi}_{p=0}$ et $\tilde{\phi}_{p=N/2}$. Les deux histogrammes de la première ligne sont donc obtenus avec $\mathcal{N}(N + 1)$ valeurs contre seulement \mathcal{N} pour ceux de la seconde ligne