

PROJET DE THÈSE

THÉORIE CONSTRUCTIVE DES CHAMPS ET APPROCHE MONTE CARLO DIAGRAMMATIQUE
POUR LES FERMIONS CORRÉLÉS

Proposition de thèse déposée par Jérémie UNTERBERGER

Co-direction : Jérémie Unterberger (60%), Félix WERNER (40%)

Ecole Doctorale IAEM - Spécialité : Mathématiques

Projet 24983

Titre : Théorie constructive des champs et approche Monte Carlo diagrammatique pour les fermions corrélés

I Rattachement administratif des co-directeurs

J. Unterberger : IECL (Institut Elie Cartan de Lorraine, Université de Lorraine), maître de conférences en mathématiques. Equipe : ProbaStats.

F. Werner : LKB (Laboratoire Kastler Brossel, ENS / Sorbonne Université / Collège de France), chargé de recherche en physique. Equipe : Gaz de Fermi ultrafroids.

II Description succincte

Thématique.

Résolution numérique et étude théorique rigoureuse multi-échelles de modèles à N corps provenant de la théorie de la matière condensée.

Domaine.

De nature interdisciplinaire, le sujet le conduira à s'intéresser aux méthodes rigoureuses en théorie quantique des champs, incluant des aspects théoriques de nature notamment

mathématique (processus gaussiens et théorie des grandes déviations en probabilités, fibrés de jauge en géométrie), ainsi qu'à la théorie de la matière condensée (physique théorique), et qu'aux méthodes de Monte Carlo (probabilités appliquées).

Objectifs.

- Développement de nouvelles méthodes numériques de type Monte Carlo diagrammatique pour la résolution de problèmes à N corps, en utilisant le formalisme de la théorie constructive des champs.
- Résultats rigoureux sur le comportement grande échelle de modèles provenant de la théorie de la matière condensée, et test des nouvelles méthodes numériques sur ceux-ci.

Contexte.

- Du côté numérique, les méthodes de type DiagMC [1, 2] ont fait considérablement progresser la compréhension quantitative des phases des principaux modèles de fermions corrélés et de magnétisme quantique frustré, de leurs frontières, et des fonctions de Green associées [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10]. La méthode CDet développée récemment par R. Rossi [11] abaisse considérablement la complexité algorithmique, donc le temps de calcul, et permet d'explorer de plus grands ordres du développement, avec de meilleures garanties théoriques sur l'erreur. Les outils rigoureux développés en [12], qui donnent des bornes quasi optimales, s'insèrent naturellement dans ce contexte ; ils doivent permettre d'abaisser encore le temps de calcul, et de plus, d'explorer précisément le comportement des modèles à grande échelle dans le régime liquide de Fermi basse température.
- Du côté théorique, le travail récent [12] résout un problème fondamental abordé sans succès puis laissé de côté dans les années 90, qui est celui de 'construire' le modèle BCS, c'est-à-dire d'exhiber de manière quantitative la nature supraconductrice d'un modèle à partir de son hamiltonien microscopique. Il ouvre la voie à la 'construction' d'une série de modèles plus riches, dans lesquels de plus en plus de régimes physiques pourront être progressivement étudiés.

Outils.

- d'un point de vue numérique/probabilités appliquées : développement d'algorithmes de Monte Carlo de type Metropolis inspirés par la théorie constructive des champs [12, 13, 14, 15, 16, 17] pour des mesures sur des arbres multi-échelles ;
- d'un point de vue théorique : généralisation du travail [12] à des modèles reliés. Mathématiquement, les généralisations feront appel à des outils d'analyse fonctionnelle (normes d'opérateur), de probabilité (grandes déviations), de géométrie (invariance de jauge). Les outils et concepts traditionnels de théorie quantique des champs (intégrales fonctionnelles, renormalisation fixation de jauge, identités de Ward) seront également le pain quotidien de la thèse.

Résultats attendus.

Il est escompté que les méthodes numériques développées fassent mieux et plus vite que les méthodes DiagMC déjà connues, avec lesquelles une comparaison explicite sera établie. Ces nouvelles méthodes devraient permettre d'explorer précisément la théorie à basse énergie dans la limite grande échelle, ce qui serait une avancée majeure dans le domaine.

D'un point de vue théorique, on attend une construction mathématiquement rigoureuse de modèles de type Hubbard généralisant celui étudié en [12], et indispensables pour la comparaison avec les résultats de la physique expérimentale, notamment en dimension 3, à température positive, avec une surface de Fermi non sphérique, avec un champ électromagnétique, en temps réel...

Profil du candidat souhaité.

Le candidat aura eu une formation en physique théorique et/ou en théorie de la matière condensée. Il aura des capacités et un goût pour les mathématiques abstraites, et il sera motivé par un travail mêlant mathématiques et physique.

Un candidat (actuellement en stage M2 avec J. Unterberger, sur un sujet préliminaire au projet présent) s'est déclaré intéressé par le projet de thèse, et présente les aptitudes souhaitées. Le projet demeure néanmoins ouvert à d'autres candidatures.

III Description détaillée du projet

Problématique et état de l'art.

Un défi de longue date consiste à trouver une méthode de résolution des problèmes fermioniques à N corps dans la limite thermodynamique, dont on puisse contrôler la précision à la fois théoriquement et en pratique. Le modèle de Hubbard, sous sa version second-quantifiée en termes d'opérateurs de création/annihilation fermioniques $(c_{j,\sigma}^{(\dagger)})_{j \in \mathbb{Z}^d; \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}}$

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i,\uparrow} \hat{n}_{i,\downarrow} - \mu \sum_{i,\sigma} \hat{n}_{i,\sigma} \quad (1)$$

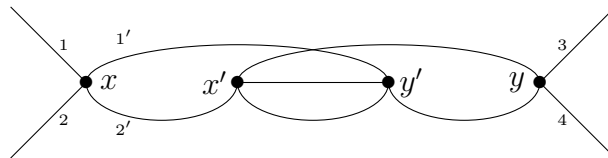
est l'un des modèles de référence, tant pour la simplicité du hamiltonien que pour la complexité de son diagramme de phases en fonction de la densité électronique (conjuguée à μ), allant de l'antiferromagnétisme à des phases supraconductrices variées typiques des supraconducteurs haute température dont il est supposé rendre compte, en passant par d'autres états plus exotiques et encore mal compris. Depuis une quinzaine d'années, on sait de plus le réaliser expérimentalement avec un gaz d'atomes froids piégés par des lasers

définissant des réseaux optiques (optical lattices), ce qui permet d'envisager de l'utiliser comme simulateur quantique [18].

De nombreuses méthodes existent pour trouver une solution approchée du modèle de Hubbard ; par solution, on entend notamment un calcul des fonctions de corrélation du modèle dans son état fondamental à l'équilibre à température $T \geq 0$, ou encore des corrélations dynamiques. Sans vouloir être exhaustif, mentionnons simplement trois des approches les plus reconnues aujourd'hui :

- l'approche de champ moyen dynamique (ou dynamical mean-field theory, DMFT), développée notamment par A. Georges *et al.* depuis le début des années 1990 [19]. Généralisation des méthodes de champ moyen de la physique statistique reposant sur l'idée de champ moyen auto-consistant ressenti en un site donné, elle est exacte en dimension infinie. En dimension 2 ou 3, l'erreur peut être réduite voire contrôlée en remplaçant le site de référence par un cluster de sites, au prix de calculs plus lourds, limités par le fameux problème de signe : en raison de l'antisymétrie fermionique, le temps de calcul (pour obtenir une erreur statistique donnée) augmente exponentiellement avec la taille du cluster.

- l'approche de Monte Carlo diagrammatique (ou DiagMC). Introduite à l'origine par N. Prokof'ev, B. Svistunov *et al.* [1], la méthode repose sur des développements en diagrammes de Feynmann de la théorie. Les calculs peuvent être faits directement dans la limite thermodynamique (i.e. pour un nombre infini de fermions), car seuls les diagrammes *connexes* contribuent, comme par exemple



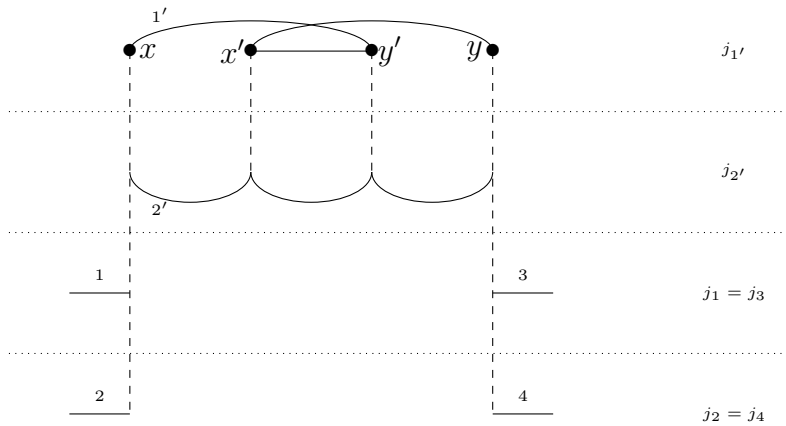
Dans le cadre de l'approche DiagMC conventionnelle, on simule à la fois la structure des diagrammes et les coordonnées internes aux diagrammes. Le nombre de diagrammes est $\sim n!$, où n est l'ordre du développement diagrammatique (*i.e.* le nombre maximal de vertex). L'antisymétrie fermionique se manifeste par le fait que la somme des contributions des diagrammes est petite devant la somme de leur valeur absolue, impliquant une augmentation du temps de calcul en $(n!)^2$. A contrario, l'approche récente dite CDet (connected determinantal diagrammatic Monte Carlo), dûe à R. Rossi, ancien étudiant de F. Werner et K. Van Houcke [11], se ramène au prix d'astuces combinatoires à calculer seulement des déterminants, économisant par la même occasion l'épineuse simulation des topologies des diagrammes et réduisant fortement le problème de signe, tout en remplaçant la complexité factorielle par une bien meilleure complexité exponentielle. Si le signe fermionique est un *problème* – limitant l'ordre atteignable, il est aussi un *atout* : il rend la série diagrammatique convergente (pour U pas trop grand et une température pas trop basse). Au final,

ce problème et cet atout se compense pour CDet, et le temps de calcul n'augmente qu'en loi de puissance avec l'inverse de l'erreur totale (erreur statistique + erreur de troncation à ordre fini) [20].

– l'approche dite FRG (functional renormalization group, ou groupe de renormalisation fonctionnel), développée par W. Metzner, M. Salmhofer et al. [21]. Celle-ci repose sur l'approche à la Callan-Symanzyk du groupe de renormalisation. L'équation différentielle pour les coefficients effectifs t, U de la théorie en fonction d'une échelle de cut-off infra-rouge, interprétée comme flot du groupe de renormalisation de Wilson, devient dans cette approche une équation différentielle pour les fonctions de corrélation à deux et quatre points. Fondée par principe sur des troncatures explicites et non justifiées (négligeant en général les fonctions internes à six points et plus), la méthode induit généralement des approximations non contrôlées.

D'un autre côté, les théoriciens s'intéressent depuis les années 70 à "construire" les modèles fondamentaux de physique théorique tels que le modèle de Hubbard. Différentes contributions, cf. par exemple [22], ont montré que la série des perturbations avait un rayon de convergence > 0 à température pas trop basse, résultat d'ailleurs central dans l'approche DiagMC. Les travaux des années 90, cf. [13, 14, 15, 16, 17], reposent sur des *développements en clusters multi-échelles*, caractéristique de l'*approche constructive en théorie des champs*. Le principe général est le suivant :

– les champs sont décomposés en échelles dyadiques d'énergie (décomposition dite de Littlewood-Paley en analyse des ondelettes) ; les diagrammes de Feynman sont alors "éclatés" en introduisant une échelle $j \in \mathbb{N}$ pour chaque propagateur, par exemple (pour le diagramme de l'exemple ci-dessus)



avec des échelles croissantes $j'_1 < j'_2 < j_1 < j_2$ en se rapprochant de la singularité infra-rouge définie par la surface de Fermi ;

– dans chaque échelle j , on fait un *développement cluster*, conduisant à réécrire les fonctions à n points comme somme de contributions indexées par des *arbres de cubes* de côté 2^j reliés par des propagateurs. La somme peut se représenter sous la forme mathématiquement très esthétique dite *formule de Brydges-Kennedy(-Abdesselam-Rivasseau)* [23, 24].

Ces développements possèdent l'avantage majeur de dégager des sommes convergentes de contributions (contributions attachées à des *arbres multi-échelles*) dont l'ordre de grandeur dominant est facilement calculable, ainsi que de définir précisément un algorithme de renormalisation. Ils ont permis de s'approcher de l'échelle d'énergie associée à Δ , sans toutefois la dépasser.

L'article [12] constitue à ce titre une avancée majeure, puisqu'il a permis d'aller au-delà de cette échelle et de décrire la théorie sans aucun cut-off infra-rouge. Il repose sur plusieurs innovations, notamment :

– une compréhension précise des facteurs $1/N$ dépendant de l'échelle apparaissant dans le développement, liés à la courbure de la sphère de Fermi, montrant explicitement que les diagrammes "échelles" (ladder diagrams), bien connus dans l'approximation de champ moyen pour produire la divergence infra-rouge responsable de l'apparition des états liés, sont bien les diagrammes dominants ;

– une resommation explicite des diagrammes "squelettes" ou "deux-particules irréductibles" en un noyau de Bethe-Salpeter non perturbatif, en termes duquel les interactions entre paires de Cooper sont calculées dans la limite infra-rouge (limite de grande échelle).

La combinatoire algébrique utilisée pour la preuve présente d'une certaine manière à la fois les avantages de l'approche CDet (absence de problème de signe en raison de l'utilisation de bornes déterminantales), et ceux de l'approche DiagMC conventionnelle (choix explicite de "canaux" de développement de diagrammes connexes). Pour cette raison, il est naturel de chercher à les implémenter dans des régimes physiques intéressants, où la constante de couplage n'est plus petite, mais où les séries restent néanmoins convergentes.

Projet de thèse.

Le projet comporte une partie numérique et une partie théorique.

La partie numérique consistera à implémenter le formalisme constructif utilisé en [12] à la manière d’algorithmes de Monte Carlo diagrammatiques, et à les tester, d’abord pour de petites constantes de couplage, pour lesquelles des résultats théoriques mathématiquement rigoureux existent, puis pour des constantes d’ordre 1. On introduira une chaîne de Markov sur les arbres multi-échelles définie à l’aide d’un algorithme de type Metropolis, schématiquement,

$$p(\mathcal{T} \rightarrow \mathcal{T}') \propto \min\left(1, \frac{\mathcal{P}(\mathcal{T}')}{\mathcal{P}(\mathcal{T})}\right) \quad (2)$$

où \mathcal{P} est une mesure de probabilité sur les arbres multi-échelles proportionnelle aux poids de l’ordre de grandeur dominant de la contribution associée (cf. supra). L’étude théorique des propriétés de convergence de l’algorithme présente en elle-même un intérêt comme modèle de probabilité appliquée, et pourra intéresser directement l’équipe ProbaStats de l’IECL. On s’attend à ce que le temps d’auto-corrélation soit borné par une puissance de l’ordre n du développement. Pour l’implémentation (en Fortran, C ou C++), le doctorant s’appuiera sur l’expertise développée à l’ENS par F. Werner et K. Van Houcke. Il commencera par l’étude dans le cas mono-échelle. Des clusters informatiques seront mis à disposition par l’Université de Lorraine et le LKB. Il sera amené à comparer ses résultats (temps de calcul, précision) avec ceux de l’approche CDet [11, 25, 26]. Les directeurs de la thèse envisagent éventuellement – si les premiers pas sont concluants – de recruter dans un proche avenir un autre doctorant ou post-doc travaillant plus spécifiquement sur les aspects numériques.

La partie théorique consistera à développer dans toutes les directions possibles les résultats mathématiquement rigoureux prouvés en [12]. Parmi les possibilités physiquement intéressantes, la théorie en dimension 3, à température positive ; les modèles sur réseau, dont la surface de Fermi est non invariante par rotation ; et puis (nettement plus difficile mais fondamental pour les applications, et en tant qu’enjeu pour la physique théorique), le cas du temps réel (du point de vue de l’analyse mathématique, c’est un passage de l’elliptique à l’hyperbolique), et le cas d’une interaction avec un champ électromagnétique, pour lequel une compréhension physico-géométrique des théories de jauge sera indispensable.

Le candidat pourra valoriser ses résultats tant auprès des physiciens spécialistes des méthodes numériques pour les fermions corrélés (incluant la “Simons collaboration on the many-electron problem”), en particulier la communauté du Monte Carlo diagrammatique (N. Prokof’ev, E. Kozik, M. Ferrero, E. Gull, O. Parcollet, X. Waintal, L. Pollet ...),

qu'auprès de la communauté de la théorie constructive des champs en physique mathématique, notamment dans les équipes présentes à Paris (V. Rivasseau, J. Magnen), Bonn (M. Disertori), Heidelberg (M. Salmhofer), Tübingen (M. Porta) et Zürich (J. Fröhlich, B. Schlein).

Déroulement de la thèse.

Après une phase d'apprentissage portant à la fois sur les méthodes DiagMC et sur les méthodes constructives en théorie des champs, il est prévu que la première année soit consacrée à une phase préliminaire d'implémentation sur ordinateur de nouveaux algorithmes de Monte Carlo développés suivant la logique constructive. En fonction des résultats obtenus, la suite de la thèse pourra évoluer vers une direction plus spécifiquement numérique, ou bien vers une direction plus théorique.

Références

- [1] K. Van Houcke, E. Kozik, N. Prokof'ev, and B. Svistunov. *Diagrammatic Monte Carlo*, in Computer Simulation Studies in Condensed Matter Physics XXI. CSP-2008. Eds. D.P. Landau, S.P. Lewis, and H.B. Schüttler, Physics Procedia **6**, 95, 2010.
- [2] E. Kozik, K. Van Houcke, E. Gull, L. Pollet, N. Prokof'ev, B. Svistunov, and M. Troyer, "Diagrammatic monte carlo for correlated fermions," *Europhys. Lett.*, vol. 90, p. 10004, 2010.
- [3] K. Van Houcke, F. Werner, E. Kozik, N. Prokof'ev, B. Svistunov, M. J. H. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk, A. Schirotzek, and M. W. Zwierlein, "Feynman diagrams versus fermi-gas feynman emulator," *Nature Phys.*, vol. 8, p. 366, 2012.
- [4] Y. Deng, E. Kozik, N. V. Prokof'ev, and B. V. Svistunov, "Emergent BCS regime of the two-dimensional fermionic Hubbard model : Ground-state phase diagram," *Europhys. Lett.*, vol. 110, p. 57001, 2015.
- [5] W. Wu, M. Ferrero, A. Georges, and E. Kozik, "Controlling Feynman diagrammatic expansions : Physical nature of the pseudogap in the two-dimensional Hubbard model," *Phys. Rev. B*, vol. 96, p. 041105, 2017.
- [6] J. Gukelberger, E. Kozik, L. Pollet, N. Prokof'ev, M. Sigrist, B. Svistunov, and M. Troyer, "*p*-Wave Superfluidity by Spin-Nematic Fermi Surface Deformation," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 195301, 2014.
- [7] S. Kulagin, N. Prokof'ev, O. Starykh, B. Svistunov, and C. Varney, "Bold diagrammatic monte carlo method applied to fermionized frustrated spins," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 110, p. 070601, 2013.

- [8] Y. Huang, K. Chen, Y. Deng, N. Prokof'ev, and B. Svistunov, "Spin-Ice State of the Quantum Heisenberg Antiferromagnet on the Pyrochlore Lattice," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 116, p. 177203, 2016.
- [9] A. S. Mishchenko, N. Nagaosa, and N. Prokof'ev, "Diagrammatic monte carlo method for many-polaron problems," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 166402, 2014.
- [10] I. Tupitsyn and N. Prokof'ev, "Stability of dirac liquids with strong coulomb interaction," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 118, p. 026403, 2017.
- [11] R. Rossi, "Determinant diagrammatic monte carlo in the thermodynamic limit," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 119, p. 045701, 2017.
- [12] J. Magnen and J. Unterberger, "A mathematical derivation of zero-temperature 2d superconductivity from microscopic bardeen-cooper-schrieffer model," *preprint arXiv : 1902.02337*, 2019.
- [13] M. Disertori and V. Rivasseau, "Rigorous proof of fermi liquid behavior for jellium two-dimensional interacting fermions," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 85, p. 361, 2000.
- [14] M. Disertori and V. Rivasseau, "Interacting fermi liquid in two dimensions at finite temperature. part i : Convergent attributions," *Commun. Math. Phys.*, vol. 215, p. 251290, 2000.
- [15] M. Disertori and V. Rivasseau, "Interacting fermi liquid in two dimensions at finite temperature. part ii : Renormalization," *Commun. Math. Phys.*, vol. 215, p. 291341, 2000.
- [16] J. Feldman, J. Magnen, V. Rivasseau, and E. Trubowitz, "Ward identities and a perturbative analysis of a u(1) goldstone boson in a many fermion system," *Helv. Phys. Acta*, vol. 66, p. 498550, 1993.
- [17] J. Feldman, J. Magnen, V. Rivasseau, and E. Trubowitz, "An infinite volume expansion for many fermions green's functions," *Helv. Phys. Acta*, vol. 65, p. 679, 1992.
- [18] A. Mazurenko, C. S. Chiu, G. Ji, M. F. Parsons, M. Kanász-Nagy, R. Schmidt, F. Grusdt, E. Demler, D. Greif, and M. Greiner, "A cold-atom Fermi-Hubbard antiferromagnet," *Nature*, vol. 545, p. 462, 2017.
- [19] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rozenberg, "Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 68, pp. 13–125, Jan 1996.
- [20] R. Rossi, N. Prokof'ev, B. Svistunov, K. Van Houcke, and F. Werner, "Polynomial complexity despite the fermionic sign," *Europhys. Lett.*, vol. 118, no. 1, p. 10004, 2017.
- [21] W. Metzner, M. Salmhofer, C. Honerkamp, and V. Meden, "Functional renormalization group approach to correlated fermion systems," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 84, 2012.

- [22] M. Salmhofer, “Continuous renormalization for fermions and fermi liquid theory,” *Commun. Math. Phys.*, vol. 194, p. 249, 1997.
- [23] A. Abdesselam and V. Rivasseau, “Explicit fermionic tree expansions,” *Lett. Math. Phys.*, vol. 44, p. 77, 1998.
- [24] A. Abdesselam and V. Rivasseau, “Trees, forests and jungles : A botanical garden for cluster expansions,” *Lecture Notes in Physics*, vol. 446, 1995.
- [25] F. Simkovic and E. Kozik, “Determinant monte carlo for irreducible feynman diagrams in the strongly correlated regime,” *preprint arXiv : 1712.10001*.
- [26] A. Moutenet, W. Wu, and M. Ferrero, “Determinant monte carlo algorithms for dynamical quantities in fermionic systems,” *Phys. Rev. B*, vol. 97, p. 085117, Feb 2018.