Master 2 de mathématiques : Analyse, Modélisation, Simulation
Parcours : Modélisation Simulation

Etude numérique des équations « BMW » du groupe de renormalisation non perturbatif

Gaétan Facchinetti
Encadré par : Bertrand Delamotte et Nicolas Dupuis

Laboratoire de Physique Théorique de la Matièe Condensée,

Université Paris-Saclay,Ecole Nationale Supérieure des Techniques Avancées,
Ecole Normale Supérieure de Cachan, Université Versailles Saint Quentin

27 février - 28 juillet 2017

Table des matières

1 Introduction

1.1 Transitions de phases

En thermodynamique on appelle phase un milieu possédant des propriétés physiques et chimiques homogènes. Or, en modifiant certains paramètres (comme la témpérature, la pression, etc.) un système peut changer de phase lors de ce que l'on appelle une transition de phase. Ces transitions sont particulièrement étudiées [1]. [3, 6, 2, 9, 11, 10, 7, 4, 5, 8]

1.2 Un peu de thermodynamique et de physique statistique

Considérons un système à P corps (particules, spins, etc.) dans un volume à d dimensions Ω. On considère alors que l'ensemble des degrés de liberté de ces P corps peuvent être décrit grâce à une fonction $\boldsymbol{\varphi} : \mathbf{r} \in \Omega \to \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}^d$, telle que $\boldsymbol{\varphi} \in \left(\mathcal{C}^\infty(\Omega)\right)^d$

La dynamique du système est alors régie par un hamiltonien $H[\boldsymbol{\varphi}]$ [1]. Avec le formalisme canonique de la physique statistique nous savons que nous pouvons connaitre toutes l'information sur les propriétées macroscopiques du système en étudiant sa fonction de partition $\mathcal{Z}$ définie par l'expression

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\boldsymbol{\varphi} \, \exp\left\{-\beta H[\boldsymbol{\varphi}]\right\}, \tag{1}$$

où $\beta = 1/(k_B T)$. Cette intégrale est une intégrale fonctionnelle ... (note sur sa définition) sur l'ensemble des champs $\boldsymbol{\varphi}$ permis par le système (on peut aussi voir cela comme une somme continue sur l'ensemble des configurations possibles du système). Malheureusement elle ne peut pas être, de manière générale, calculée et nous l'utiliserons simplement pour extraire des grandeurs qui elles peuvent être à la fois calculée et observée expérimentalement comme détaillé ci-après.

Considérons l'hypothèse physique selon laquelle H peut se décomposer en deux parties distinctes,

$$H[\boldsymbol{\varphi}] = S[\boldsymbol{\varphi}] - \int_{\Omega^d} \mathbf{h}\boldsymbol{\varphi}, \tag{2}$$

où S est appellée l'action du système (il s'agit en fait de l'hamiltonien du système isolé) et le deuxième terme correspond à l'exitation du système par un champ $\mathbf{h}$ extérieur. Ainsi $\mathcal{Z}$ devient une fonctionnelle de $\mathbf{h}$ et nous définissons l'énergie libre du système comme étant

$$W[\mathbf{h}] = \ln(\mathcal{Z}[\mathbf{h}]) \tag{3}$$

En utilisant la notion de dérivée fonctionnelle sommairement rappellée en annexe nous pouvons alors introduire le tenseur des fonctions de correlations à $n \in [\![1, N]\!]$ points, très importantes, puisque déterminable expérimentalement [1]. Pour $j \in [\![1, n]\!]$, on pose $\{i_j\} \subset [\![1, N]\!]$ avec $\mathrm{card}(\{i_j\}) = j$.

$$G^{(n)}_{\{i_j\}}[\{\mathbf{r}_j\}; \mathbf{h}] = \frac{\delta^n W[\mathbf{h}]}{\delta h_{i_1}(\mathbf{r}_1)...\delta h_{i_n}(\mathbf{r}_n)} \tag{4}$$

Or ces grandeurs ne se calculent par directement, pour cela on utilise le potentiel de Gibbs. Comme ... il s'agit d'une fonctionnelle du champ $\mathbf{h}$ définie par transfomation de Legendre selon

$$\Gamma[\boldsymbol{\phi}] = -W[\mathbf{h}] + \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{h}\boldsymbol{\phi}, \tag{5}$$

Avec, en notant $\langle ... \rangle$ la moyenne thermodynamique,

$$\boldsymbol{\phi}[\mathbf{r}, \mathbf{h}] = \langle \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}) \rangle = \frac{\delta W[\mathbf{h}]}{\delta \mathbf{h}(\mathbf{r})} \tag{6}$$

On utilise aussi alors beaucoup les dérivées fonctionnelles de Γ définie par

$$\Gamma^{(n)}_{\{i_j\}}[\{\mathbf{x}_j\}; \boldsymbol{\phi}] = \frac{\delta^n \Gamma[\boldsymbol{\phi}]}{\delta \phi_{i_1}(\mathbf{x}_1)...\delta \phi_{i_n}(\mathbf{x}_n)} \tag{7}$$

On montre alors [3], qu'au sens d'inverse d'opérateur, comme définie en annexe,

$$G^{(2)}[\mathbf{h}] = \left(\Gamma^{(2)}[\boldsymbol{\phi}]\right)^{-1} \tag{8}$$

Comme nous le verrons par la suite nous pourrons calculer les grandeurs observables reliées à la mesure de G et étudiant seulement la fonctionnelle Γ dont on sait extraire les équations permettant sa détermination. De plus mentionnons que l'on ne calculera jamais

1.3 Le groupe de renormalisation (RG)

Le but du goupe de renormalisation est d'étudier la physique aux transitions de phase.

1.4 Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

Contrairement au RG le NPRG permet d'aller plus loin puisqu'il permet un calcul sans approximations a priori. En effet, toute l'astuce consiste à introduire une fonction $\mathcal{R}_k \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$ appellée régulateur pour $k \in [0, +\infty[$ puis une nouvelle fonction de partition modifiée

$$\mathcal{Z}_k = \int \mathcal{D}\boldsymbol{\varphi} \, \exp\left\{-S[\boldsymbol{\varphi}] - \Delta S_k[\boldsymbol{\varphi}] + \int_{\mathbf{r}} \mathbf{h}\boldsymbol{\varphi}\right\} \tag{9}$$

Avec la définition

$$\begin{aligned} \Delta S_k[\boldsymbol{\varphi}] &\equiv \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r},\mathbf{r}'} \varphi_i(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \varphi_i(-\mathbf{q}) \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{q}) \varphi_j(\mathbf{q}) \end{aligned} \tag{10}$$

De cette manière en choisissant

1. La notation [...] signifie que H est une fonctionnelle de $\boldsymbol{\varphi}$

— Pour $k = 0$, $\mathcal{R}_k(\mathbf{q}) \to +\infty$.
— Pour $k \to +\infty$, $\mathcal{R}_k(\mathbf{q}) \to 0$.

On peut geler les fluctuations

2 Le modèle continu O(N)

2.1 Equations de flots générales

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

2.2 Approximation BMW

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

2.3 Méthode de simulation

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

2.4 Résultats

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

3 Le modèle d'Ising en dimension 2

3.1 Modélisation du problème avec des champs

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

3.2 Etapes de la résolution numérique

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

3.3 Méthodes et outils numériques

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

3.4 Résultats

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetuer adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetuer id, vulputate a, magna. Donec vehicula augue eu neque. Pellentesque habitant morbi tristique senectus et netus et malesuada fames ac turpis egestas. Mauris ut leo. Cras viverra metus rhoncus sem. Nulla et lectus vestibulum urna fringilla ultrices. Phasellus eu tellus sit amet tortor gravida placerat. Integer sapien est, iaculis in, pretium quis, viverra ac, nunc. Praesent eget sem vel leo ultrices bibendum. Aenean faucibus. Morbi dolor nulla, malesuada eu, pulvinar at, mollis ac, nulla. Curabitur auctor semper nulla. Donec varius orci eget risus. Duis nibh mi, congue eu, accumsan eleifend, sagittis quis, diam. Duis eget orci sit amet orci dignissim rutrum.

Références

[1] M.L. Bellac. *Des phénomènes critiques aux champs de jauge - Une introduction aux méthodes et aux applications de la théorie quantique des champs.* Savoirs Actuels. EDP Sciences, 2012.

[2] Jean-Paul Blaizot, Ramón Méndez-Galain, and Nicolás Wschebor. A new method to solve the non-perturbative renormalization group equations. *Physics Letters B*, 632(4) :571 – 578, 2006.

[3] Bertrand Delamotte. *An Introduction to the Non-perturbative Renormalization Group*, pages 49–132. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012.

[4] N. Dupuis and K. Sengupta. Non-perturbative renormalization-group approach to lattice models. *The European Physical Journal B*, 66(2) :271–278, 2008.

[5] Frédéric Léonard. *Criticalité et phase de brisée de modèles avec symétrie discrète.* PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2016.

[6] T. Machado and N. Dupuis. From local to critical fluctuations in lattice models : A nonperturbative renormalization-group approach. *Phys. Rev. E*, 82 :041128, Oct 2010.

[7] J. C. Mason and D. C. Handscomb. *Chebyshev Polynomials.* CRC Press, Florida, 2003.

[8] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65 :117–149, Feb 1944.

[9] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, and Brian P. Flannery. *Numerical Recipes in C (2Nd Ed.) : The Art of Scientific Computing.* Cambridge University Press, New York, NY, USA, 1992.

[10] Alex Townsend. *Computing with functions in two dimensions*. PhD thesis, University of Oxford, 2014.

[11] Christof Wetterich. Exact evolution equation for the effective potential. *Physics Letters B*, 301(1) :94, 1993.