



école —  
normale —  
supérieure —  
paris — saclay —

UNIVERSITÉ DE  
VERSAILLES  
ST-QUENTIN-EN-YVELINES



---

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 Matière 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

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>3</b>
1.1	Transitions de phases . . . . .	3
1.2	Intérêt du groupe de renormalisation et des équations BMW . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Origine du modèle</b>	<b>4</b>
2.1	Un peu de thermodynamique et de physique statistique . . . . .	4
2.2	Le groupe de renormalisation (RG) . . . . .	5
2.3	Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG) . . . . .	5
2.3.1	Généralités . . . . .	5
2.3.2	Approximation BMW . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Le modèle continu <math>O(N)</math></b>	<b>7</b>
3.1	Présentation du modèle $\varphi^4$ . . . . .	7
3.2	Les équations dans le cas $O(1) \simeq \mathbb{Z}_2$ . . . . .	7
3.3	Résultats . . . . .	7
<b>4</b>	<b>Méthodes numériques pour la résolution de ces équations</b>	<b>7</b>
4.1	Structure de l'algorithme . . . . .	7
4.2	Discrétisation en champ . . . . .	8
4.3	Discrétisation en impulsion . . . . .	8
4.3.1	Interpolation de Tchbychev . . . . .	8
4.3.2	Calcul de l'interpolé - méthode de Clenshaw . . . . .	8
4.4	Parallélisation . . . . .	8
<b>5</b>	<b>Le modèle d'Ising en dimension 2</b>	<b>9</b>
5.1	Modélisation du problème avec des champs . . . . .	9
5.2	Etapas de la résolution numérique . . . . .	11
5.3	Les différents jeux d'équation . . . . .	11
<b>6</b>	<b>Méthodes et outils numériques pour la résolution d'Ising 2D</b>	<b>12</b>
6.1	Structure du code . . . . .	12
6.2	Interpolation de Tchebychev . . . . .	12
6.2.1	Théorème de décomposition . . . . .	12
6.2.2	Décomposition méthode 1 . . . . .	12
6.2.3	Décomposition méthode 2 . . . . .	12
6.3	Le calcul des intégrales . . . . .	13
6.3.1	Le choix de la quadrature . . . . .	13
6.3.2	Calcul des intégrales $I$ . . . . .	13
6.3.3	Calcul des intégrales $J$ . . . . .	13
6.4	Dérivées numériques . . . . .	13
6.5	Complexité algorithmique et parallélisation - problème de rapidité . . . . .	13

# 1 Introduction

La physique statistique établit un cadre permettant de calculer les grandeurs macroscopiques, dites aussi thermodynamiques, des problèmes mettant en jeu des systèmes avec un très grand nombre de degrés de liberté en interaction. Pour donner une image de ce que cela signifie, on considère un litre d'eau enfermée dans une boîte. Ce litre d'eau est constitué de  $\sim 10^{24}$  molécules qui peuvent vibrer, se déplacer ou tourner dans les trois directions de l'espace et avec une certaine vitesse. La position d'une seule de ces molécules représente trois degrés de liberté (puisque l'on est en 3 dimensions) du système total, son orientation, ou sa vitesse aussi, etc. On remarque alors que l'on obtient, pour une seule molécule, un nombre gigantesque de degrés de liberté qui peuvent interagir ensemble (ici par l'intermédiaire, entre autre, des collisions des molécules, de l'attraction gravitationnelle ou des interactions électromagnétiques). Il n'est donc pas possible de déterminer les propriétés physiques macroscopiques de ce système en étudiant un à un la dynamique des degrés de liberté du constituant, ce pourquoi on a recours aux statistiques.

Nous allons nous intéresser ici plus particulièrement à un domaine particulier de la physique statistique et de la thermodynamique qu'est l'étude des transitions de phase. Pour cela commençons par décrire ce dont il s'agit, puis nous expliciterons ce que nous allons y étudier.

## 1.1 Transitions de phases

En thermodynamique on appelle phase un milieu possédant des propriétés physiques et chimiques macroscopiques homogènes. Or, avec la modification de certains paramètres (comme la température, la pression, etc.), un système peut changer de phase; il se produit alors une transition de phase. Landau a classé ces transitions suivant deux types : celles du premier ordre et celles du second [11]. Cette classification se fonde sur la continuité ou non de certaines fonctions thermodynamiques au moment de la transition. Le passage de l'eau de l'état liquide à l'état gazeux par modification de la température à pression constante est un bon exemple de transition du premier ordre. La perte du caractère aimanté d'un métal lorsqu'on le chauffe au dessus d'une certaine température à pression constante, correspond, en revanche, à une transition de phase du second ordre [7]. On s'intéresse plus particulièrement ici aux phénomènes physiques particuliers qui se produisent lors des transitions du second ordre.

Pour comprendre quels sont ces phénomènes considérons un système que l'on peut faire changer de phase en imposant sa température  $T$ . On appelle  $T_c$ , température critique, la température à laquelle se produit la transition. Il est alors possible de définir sur ce système une fonction de corrélation  $G^{(2)}(r)$  qui décrit quantitativement l'influence que deux degrés de liberté du système séparés d'une distance  $r$  ont l'un sur l'autre. Notons bien que plus la distance entre les deux sera grande moins cette

influence sera forte et donc plus la fonction de corrélation sera faible. A cette fonction, qu'il est possible de déterminer expérimentalement [1], on y associe une longueur  $\xi$  qui définit approximativement la distance à partir de laquelle deux degrés de liberté du système n'ont plus d'influence l'un sur l'autre.

On observe expérimentalement qu'au moment d'une transition de phase du second ordre, pour  $|T - T_c| \rightarrow 0$ , à la fois  $\xi$  et  $G^{(2)}$  divergent, selon les lois

$$\xi \sim |T - T_c|^{-\nu} \quad \text{et} \quad G^{(2)}(r) \sim |r|^{2-d-\eta}, \quad (1)$$

où  $d$  est la dimension physique du système et  $\nu$  et  $\eta$  sont deux réels positifs appelés les *exposants critiques*. Notons qu'il existe aussi comme cela plusieurs autres grandeurs desquelles on peut extraire différents exposants critiques. Cependant le point essentiel est que tous les systèmes ayant les mêmes propriétés de symétries possèdent les mêmes exposants critiques, on dit qu'ils appartiennent à la même classe d'universalité.

## 1.2 Intérêt du groupe de renormalisation et des équations BMW

Le groupe de renormalisation (RG) permet de montrer l'effet d'universalité sur les exposants critiques et de les calculer. L'approche par le RG a permis d'obtenir déjà d'excellents résultats pour différents systèmes étudiés comparé aux expériences et autres méthodes comme les simulations Monte-Carlo. Cependant elle reste limitée dans ces applications car elle se fonde sur des approximations de "théorie des perturbations" pour pouvoir mener les calculs qui ne permettent de ne calculer par exemple que les exposants universels critiques mais pas les grandeurs non universelles comme la température critique.

Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG) permet de répondre à ce problème en reprenant le principe du RG sous une approche différente permettant d'accéder à des équations exactes. Cependant, en pratique, ces équations ne sont pas solubles et il faut faire d'autres approximations, comme l'approximation BMW, pouvant être d'autre nature que celle de la théorie des perturbations pour pouvoir récupérer à la fois les exposants critiques et les grandeurs non universelles. Mais bien que cela soit possible le NPRG n'avait jamais été utilisé auparavant pour calculer une température critique.

L'objectif premier de cette étude est donc de reprendre une simulation d'équations intégral-différentielles non linéaires obtenues par l'approximation BMW des équations du NPRG déjà réalisée [8] afin de déterminer des exposants critiques. Mais aussi, et pour la première fois, de l'adapter à un système d'Ising en dimension deux pour en calculer dans le cadre du NPRG, la température critique.

Dans une première partie nous rappellerons donc les origines du modèle du RG et du NPRG puis nous l'utiliserons pour développer les équations BMW dans le cas de systèmes possédant une symétrie  $O(N)$  et étudier numériquement leur résolution. Ensuite nous appliquerons le modèle BMW au système d'Ising en deux dimensions afin de tester s'il permet de retrouver la température et les exposants critiques que l'on connaît par la résolution analytique faite par Onsager [10].

## 2 Origine du modèle

### 2.1 Un peu de thermodynamique et de physique statistique

Nous résumons dans cette sections quelques concepts fondamentaux de la thermodynamique et de la physique statistique [6] nécessaires à l'introduction du groupe de renormalisation.

Considérons un système à  $P$  corps dans un ouvert à  $d$  dimensions  $\Omega$  de volume  $|\Omega|$ . On considère que l'ensemble des  $N$  degrés de liberté de chacun de ces  $P$  corps peuvent être décrit suivant leur position  $\mathbf{r}$  grâce à une fonction  $\varphi : \mathbf{r} \in \Omega \rightarrow \varphi(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}^d$ , telle que  $\varphi \in (C^\infty(\Omega))^d$

La dynamique du système est alors régie par un une fonctionnelle de  $\varphi$  : l'hamiltonien  $H[\varphi]$ . Avec le formalisme canonique de la physique statistique [3] nous savons que nous pouvons connaître toutes l'information sur les propriétés macroscopiques du système en étudiant sa fonction de partition  $\mathcal{Z}$  définie par l'expression

$$\mathcal{Z} \equiv \int \mathcal{D}\varphi \exp \{-H[\varphi]\}, \quad (2)$$

Cette intégrale est une intégrale fonctionnelle  $\int$  sur l'ensemble des champs  $\varphi$  permis par le système (i.e. une somme continue sur l'ensemble des configurations possibles des  $P \times N$  degrés de liberté du système). Cependant elle ne peut pas être, de manière générale, calculée pour un  $H$  quelconque.

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

$$H[\varphi] = S[\varphi] - \int_{\Omega} \mathbf{h}\varphi, \quad (3)$$

où  $S$  est appelée l'action du système (il s'agit en fait de l'hamiltonien du système isolé) et le deuxième terme correspond à l'excitation 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

$$W[\mathbf{h}] = \ln(\mathcal{Z}[\mathbf{h}]) \quad (4)$$

En utilisant la notion de dérivée fonctionnelle nous pouvons alors introduire le tenseur des fonctions de corrélations à  $n \in \llbracket 1, N \rrbracket$  corps. Ces fonctions sont très importantes car, comme mentionné dans l'introduction, c'est

celle à deux corps qui nous permet de déterminer les exposants critiques  $\nu$  et  $\eta$ . Pour  $j \in \llbracket 1, n \rrbracket$ , on pose  $\{i_j\} \subset \llbracket 1, N \rrbracket$  avec  $\text{card}(\{i_j\}) = j$ .

$$G_{\{i_j\}}^{(n)}[\{\mathbf{r}_j\}; \mathbf{h}] = \frac{\delta^n W[\mathbf{h}]}{\delta h_{i_1}(\mathbf{r}_1) \dots \delta h_{i_n}(\mathbf{r}_n)} \quad (5)$$

Or ces grandeurs ne peuvent pas se calculer directement, ce pourquoi on utilise le potentiel de Gibbs. Comme l'énergie libre est une fonction convexe [6] on peut définir le potentiel est Gibbs qui est une fonctionnelle du champ  $\mathbf{h}$  définie par transformation de Legendre selon la formule

$$\Gamma[\phi] = -W[\mathbf{h}] + \int_{\Omega} \mathbf{h}\phi, \quad (6)$$

Avec, en notant  $\langle \dots \rangle$  la moyenne statistique,

$$\phi[\mathbf{r}, \mathbf{h}] = \langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{\delta W[\mathbf{h}]}{\delta \mathbf{h}(\mathbf{r})} \quad (7)$$

$$\langle \varphi(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \mathcal{D}\varphi \varphi(\mathbf{r}) \exp \{-H[\varphi]\}, \quad (8)$$

On introduit aussi une notation pour les dérivées fonctionnelles de  $\Gamma$  avec

$$\Gamma_{\{i_j\}}^{(n)}[\{\mathbf{x}_j\}; \phi] = \frac{\delta^n \Gamma[\phi]}{\delta \phi_{i_1}(\mathbf{x}_1) \dots \delta \phi_{i_n}(\mathbf{x}_n)} \quad (9)$$

On montre alors [5], qu'au sens d'inverse d'opérateur, comme définie en annexe,

$$G_{i_1 i_2}^{(2)}[\mathbf{h}] = \left( \Gamma_{i_1 i_2}^{(2)}[\phi] \right)^{-1} \quad (10)$$

Il faut donc retenir que la connaissance du potentiel de Gibbs équivaut à la connaissance de la fonction de corrélation à deux points et elle nous permet alors aussi de retrouver les exposants critiques qui nous intéressent.

En outre la connaissance de  $\Gamma[\phi]$  a aussi un autre avantage important puisqu'il correspond, lorsque  $\phi$  est uniforme, à un facteur de volume  $|\Omega|$  près, au potentiel du système que l'on note  $V$  selon :

$$V(\phi) = \frac{1}{|\Omega|} \Gamma[\phi], \quad (11)$$

où  $\phi$  est la norme de  $\phi$ . Et ce sont la position du minimum global de  $V$  noté  $\phi_0$  qui nous informe sur la nature de la phase dans laquelle se trouve le système. Si jamais  $\phi_0 \neq 0$  alors la température du système est inférieure à la température critique : on dit qu'il est dans la phase basse température. En revanche si  $\phi_0 = 0$  la température est au dessus de la température critique et le système est dans la phase haute température. La connaissance de  $\Gamma$  est donc d'une très grande utilité.

Développons à présent les théories du RG et du NPRG qui partent des quelques formules rappelées ici.

## 2.2 Le groupe de renormalisation (RG)

Nous rappelons ici de manière synthétiques les principales idées du RG développé par Wilson [?]. Commençons pour cela par définir la transformée de Fourier du champ  $\mathbf{r} \rightarrow \varphi(\mathbf{r})$  par

$$\begin{aligned}\varphi(\mathbf{p}) &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \int_{\mathbf{r}} \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}, \\ \varphi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}\quad (12)$$

Avec la notation

$$\int_{\mathbf{r}} \dots \equiv \int_{\Omega} \dots d\mathbf{r} \quad (13)$$

Notons que c'est la variable utilisée  $\mathbf{r}$  ou  $\mathbf{p}$  (ou aussi parfois  $\mathbf{q}$  pour l'impulsion) qui nous permet de savoir si l'on travaille avec la fonction considérée ou sa transformée de Fourier. On suppose que pour  $\mathbf{p}$  supérieur à une certaine valeur notée  $\Lambda$ , la valeur  $\varphi(\mathbf{p})$  est suffisamment faible pour être pris comme nul, on considère donc  $\mathbf{p} \in [0, \Lambda]$ .

L'idée du RG est alors de ne pas considérer tous les degrés de liberté sur le même pied d'égalité. En effet, on commence d'abord, pour calculer  $\mathcal{Z}$ , par intégrer les degrés de libertés de haute impulsion  $\mathbf{p}$  entre  $k = \Lambda/s$  et  $\Lambda$  où  $k \in [0, \Lambda]$  et  $s > 1$ . En pratique on sépare  $\varphi$  en deux fonctions  $\varphi_{>}$  et  $\varphi_{<}$  telles que  $\varphi(\mathbf{p}) = \varphi_{>}(\mathbf{p}) + \varphi_{<}(\mathbf{p})$  et

$$\varphi_{>}(\mathbf{p}) = \begin{cases} \varphi(\mathbf{p}) & \text{si } \mathbf{p} \in [k, \Lambda] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (14)$$

$$\quad (15)$$

Ceci permet de définir un Hamiltonien effectif  $H_k$ ,

$$H_k[\varphi_{<}] \equiv \int \mathcal{D}\varphi_{>} \exp\{H[\varphi_{>} + \varphi_{<}]\}, \quad (16)$$

et de réécrire la fonction de partition comme

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi_{<} \exp\{-H_k[\varphi_{<}]\}. \quad (17)$$

De manière générale on part d'un hamiltonien qui ne dépend pas seulement du champ  $\varphi$  mais entendu aussi de constante de couplage qui caractérise la physique à laquelle est soumise le champ. Ces constantes sont notées  $\{g_i\}_i$  avec  $i \in \mathbb{N}$ . On écrit alors  $H[\varphi] = H[\varphi, \{g_i\}]$ . Ainsi le nouvel hamiltonien  $H_k$  possèdent de nouvelles constantes de couplages notées  $\{g_{k,i}\}_i$ .

On considère alors plutôt une intégration infinitésimale entre  $[\Lambda - d\Lambda, \Lambda]$ . On obtient alors un nouvel hamiltonien  $H_{\Lambda-d\Lambda}$ . Dans ce nouvel hamiltonien, sans changer sa valeur, on réalise un adimensionnement : toutes les longueurs sont multipliées par  $k_1 = \Lambda - d\Lambda$  et toutes les impulsions sont divisées par  $k_1$ . De plus on multiplie aussi par les bon facteur de  $k_1$  pour que les constantes  $\{g_{\Lambda-d\Lambda,i}\}$  se retrouvent sans dimensions. Ceci n'est que technique et ne change pas la valeur des expressions que l'on manipule mais elle permet cependant de faire comme si  $H_{\Lambda-d\Lambda}$  était l'hamiltonien d'un nouveau système dans lequel toutes les

échelles on été changée, et notamment les échelles de longueurs qui on été réduites. On rappelle qu'à la transition de phase du second ordre la longueur  $\xi$  diverge, et donc notre système originel n'a plus vraiment d'échelle caractéristique de longueur. A la transition ce nouveau système est le premier possèdent donc bien la même physique.

Pour passer réaliser l'intégration complète sur  $[0, \Lambda]$  on peut donc itérer ce processus de transformations infinitésimales. On introduit à l'itération  $p \in \mathbb{N}$  - itération à laquelle on a intégré sur  $[k_p, \Lambda]$  - l'opérateur  $T_p$  qui envoie  $\{g_i\}_i$  sur  $\{g_{k_p,i}\}_i$ . L'hypothèse fondamentale du RG, qui n'est pas prouvée mais toujours vérifiée, est qu'il existe un point fixe de  $T_p$  pour  $p \rightarrow \infty$ , si l'on est à la température critique (et/ou pression critique, ...). Ceci signifie plus particulièrement qu'il existe  $\{g_i^*\}_i$  tel que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} g_{k,i} = \lim_{\substack{p \rightarrow \infty \\ d\Lambda \rightarrow 0}} g_{k_p,i} = g_i^* \quad (18)$$

L'existence de ce points fixe explique alors l'universalité de exposants critiques [5]. En effet, deux systèmes avec les mêmes propriétés de symétries auront le même point fixe et donc un comportement identique à la transition de phase, quand la longueur de corrélation est infinie.

Dans un calcul de RG on prend classiquement un nombre fini de constantes de couplage et on considère qu'elles sont suffisamment faibles pour faire des développement du hamiltonien en puissance de ces constantes à chaque itération. Ceci permet de faire des calcul mais limite les applications possibles et n'est pas forcément obligatoire, ce pourquoi on introduit le NPRG. Nous ne nous étendrons donc pas plus sur les calculs dans le RG.

## 2.3 Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

### 2.3.1 Généralités

Contrairement au RG le NPRG développé par Wetterich [13] permet d'aller plus loin puisqu'il permet un calcul sans approximations a priori. L'idée reste la même que dans le RG en intégrant les hautes impulsions en premier lieu. Cependant toute l'astuce consiste à faire cela en introduisant une fonction  $\mathcal{R}_k \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^d, \mathbb{R})$  appelée régulateur pour  $k \in [0, \Lambda]$  puis une nouvelle fonction de partition modifiée

$$\mathcal{Z}_k = \int \mathcal{D}\varphi \exp \left\{ -S[\varphi] - \Delta S_k[\varphi] + \int_{\mathbf{r}} \mathbf{h}\varphi \right\} \quad (19)$$

Avec la définition

$$\begin{aligned}\Delta S_k[\varphi] &\equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \varphi_i(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \varphi_i(-\mathbf{q}) \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{q}) \varphi_j(\mathbf{q})\end{aligned}\quad (20)$$

On doit choisit alors la fonction  $\mathcal{R}_k$  le plus astucieusement possible. En effet, pour être conforme à la méthode

du RG, il faut que l'on retrouve  $\lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{Z}_k = \mathcal{Z}$  et pour  $k = \Lambda$  que l'expression de  $\mathcal{Z}_\Lambda$  puisse être calculée analytiquement. Il faut donc,

- Pour  $k \rightarrow 0$ ,  $\forall \mathbf{q} \quad \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{q}) \rightarrow 0$ .
- Pour  $k = \Lambda$ ,  $\forall \mathbf{q} \quad \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{q}) \rightarrow +\infty$ .

Et il faut que l'évolution entre ces deux configurations soit continue. Ainsi, quand  $k \rightarrow 0$ ,  $\Delta S_k \rightarrow 0$  et l'on retrouve bien l'expression de  $\mathcal{Z}$ . De plus quand  $k = \Lambda$  prendre  $\mathcal{R}_k$  comme étant infini permet de dire que ...

Etant donné que numériquement nous ne pouvons pas prendre en compte un  $\mathcal{R}_k$  qui va vers l'infini quand  $k = \Lambda$  nous nous contenterons de prendre  $\mathcal{R}_\Lambda$  comme une fonction minorée par une valeur bien supérieure aux valeurs de constantes de couplage de H. En pratique il suffit de prendre  $\mathcal{R}_\Lambda \sim \Lambda^2$ .

On pourrait prendre comme bon régulateur une fonction de Heaviside. Cependant, dans l'approximation BMW les régulateurs de Heaviside ne sont pas assez régulier et donnent des schéma numériques instables. On prend donc une expression définie sur  $[0, \Lambda]$  de la forme

$$\mathcal{R}_k(q) = \alpha \frac{q^2}{\exp(q^2/k^2) - 1} \quad (21)$$

Avec  $\alpha$  un réel positif que l'on prend de l'ordre de l'unité et que l'on peut faire varier mais qui n'est pas supposé changer les résultats des calculs. Remarquons que l'on satisfait bien aux hypothèses imposées sur le régulateur car

$$\forall k \in [0, \Lambda], \quad \sup \{\mathcal{R}_k(q)\} = \alpha k^2 \quad (22)$$

donc  $\mathcal{R}_k$  converge même uniformément vers 0 quand  $k \rightarrow 0$ . En outre, la seconde condition est aussi validée puisque

$$\inf \{\mathcal{R}_\Lambda(q)\} = \alpha \frac{\Lambda^2}{e - 1} \quad (23)$$

On reprend alors les différentes définitions données dans la section ... que l'on adapte ici pour prendre en compte la présence du régulateur. Tout d'abord, pour  $k$  fixé on définit une énergie libre

$$W_k[\mathbf{h}] = \ln(\mathcal{Z}_k[\mathbf{h}]) \quad (24)$$

Et de même pour le tenseur des fonctions de corrélation, avec les mêmes notations qu'en ...

$$G_{k,\{i_j\}}^{(n)}[\{\mathbf{r}_j\}; \mathbf{h}] = \frac{\delta^n W_k[\mathbf{h}]}{\delta h_{i_1}(\mathbf{r}_1) \dots \delta h_{i_n}(\mathbf{r}_n)} \quad (25)$$

En revanche, on ne définit plus exactement la fonctionnelle  $\Gamma$  de la même façon, on ne réalise plus vraiment exactement une transformée de Legendre, mais

$$\Gamma_k[\phi] = -W_k[\mathbf{h}] + \int \mathbf{h} \phi - \Delta S_k[\phi], \quad (26)$$

Parce que l'on fait une pseudo transformée de Legendre et non pas une vraie, on conserve de cette manière la relation importante :

$$G_{k,i_1 i_2}^{(2)}[\mathbf{r}_{i_1}, \mathbf{r}_{i_2}; \mathbf{h}] = \left( \Gamma_{k,i_1 i_2}^{(2)}[\mathbf{r}_{i_1}, \mathbf{r}_{i_2}, \phi] \right)^{-1} \quad (27)$$

En outre on peut grâce à cela aussi définir, pour  $\phi$  uniforme, le potentiel effectif  $V_k$  par

$$V_k(\phi) = \frac{1}{|\Omega|} \Gamma_k[\phi] \quad (28)$$

On peut alors utiliser toutes les définitions que l'on vient de poser pour extraire l'équation fondamentale du NPRG que l'on appelle l'équation de flot. Il s'agit d'une équation valable pour  $k \in ]0, \Lambda]$  décrivant l'évolution de  $\Gamma$  avec  $k$  lorsqu'on le fait évoluer de  $\Lambda$  à 0. Cette équation permet donc d'approcher ...

$$\partial_t \Gamma_{k,ij}[\phi] = \frac{1}{2|\Omega|} \sum_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) G_{k,ij}^{(2)}[\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \phi], \quad (29)$$

où  $t$  est ce que l'on appelle le temps de RG, définit par  $t = \ln(k/\Lambda)$ . Avec  $G_{k,ij}^{(2)}[\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \phi]$  la transformée de Fourier du tenseur  $G^{(2)}$  définie en Ann. ??.

En pratique, on suppose que comme dans la limite thermodynamique on étudie des systèmes macroscopiques et que  $1/\Lambda$  est une grandeur microscopique  $|\Omega| \gg 1/\Lambda^d$ . Ainsi on fait l'approximation physique selon laquelle les impulsions ne sont plus de variables discrètes mais des variables continues et les sommes deviennent des intégrales avec la relation

$$\frac{1}{|\Omega|} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \dots d^d \mathbf{q} \equiv \int_{\mathbf{q}} \quad (30)$$

### 2.3.2 Approximation BMW

On repart ici l'équation principale du NPRG qui est l'équation de flot de  $\Gamma$  avec la notation intégrale,

$$\partial_t \Gamma_{k,ij}[\mathbf{p}, \phi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) G_{k,ij}^{(2)}[\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \phi], \quad (31)$$

Avec, on le rappelle :

$$G_{k,ij}^{(2)}[\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \phi] = \left( \Gamma_{k,ij}^{(2)}[\mathbf{q}, -\mathbf{q}, \phi] + \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) \right)^{-1} \quad (32)$$

On commence par dériver deux fois Eq. (31) fonctionnellement par rapport à  $\phi$  comme montré en Ann. ???. On obtient alors une expression de  $\partial_t \Gamma_{k,ij}^{(2)}$  en fonction de  $\Gamma_k$ . Le principe de l'approximation BMW [4] est de considérer que certaines

On obtient finalement le système d'équation suivant

$$\begin{aligned} \partial_t \Gamma_{k,ij}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = & J_3(\mathbf{p}, \phi) \left( \partial_\phi \Gamma_{k,ij}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right)^2 \\ & - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Gamma_{k,ij}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \end{aligned} \quad (33)$$

## 3 Le modèle continu $O(N)$

### 3.1 Présentation du modèle $\varphi^4$

On dit qu'un modèle est  $O(N)$  si jamais le système est invariant par l'action du groupe de rotation  $O(N)$  sur ces degrés de libertés. Autrement dit faire tourner les degrés de libertés du

Il a été montré [1] que lorsque l'on cherche à déterminer les exposants critique d'un

L'ensemble des équations BMW pour un tel système ont été développées dans [2].

### 3.2 Les équations dans le cas $O(1) \simeq \mathbb{Z}_2$

Nous écrivons ici ce que donne les équations dans le cas particulier  $O(1)$  et nous laissons le cas général en annexe par soucis de concision. Comme nous le rappelons, le but de .

### 3.3 Résultats

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Ut purus elit, vestibulum ut, placerat ac, adipiscing vitae, felis. Curabitur dictum gravida mauris. Nam arcu libero, nonummy eget, consectetur 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.

## 4 Méthodes numériques pour la résolution de ces équations

### 4.1 Structure de l'algorithme

Nous avons à résoudre ici un système d'équations intégral-différentielle non linéaires couplées et sans conditions au bords. Pour cela nous utilisons différentes techniques numériques.

Pour la discrétisation en temps, nous sommes dans l'obligation d'utiliser un schéma explicite à cause de la structure complexe des termes de gauches des équations. Il a été montré qu'un schéma d'Euler explicite d'un pas de temps est suffisant pour obtenir une résolution stable, c'est donc ce qui est utilisé.

Ensuite nous allons différencier la dépendance en champs (i.e. en  $\rho$ ) à celle en impulsion (i.e.  $p$ ) des fonctions inconnues. Pour ce qui est de la dépendance en champ, il suffit de prendre une grille fixe régulièrement espacé de points. Les dérivées selon cette variable se calculent alors par des schémas de différences finies d'ordre 5.

Enfin pour la dépendance en impulsion c'est plus compliqué car il faut à la fois pouvoir facilement dériver selon  $p$ , mais aussi intégrer des expressions qui dépendent des fonctions inconnues - afin d'obtenir les intégrales  $I$  et  $J$ . Au premières versions de ce code, la discrétisation se faisait aussi sur une grille fixe de points régulièrement espacés et les intégrales étaient calculées par des méthodes de Simpsons. Cependant cela c'est avéré ne pas être assez précis dans certaines configurations, les algorithmes n'étaient pas robustes. Pour palier à ce problème c'est une décomposition pseudo spectrale qui a été mise en place à l'aide de décomposition en série sur des polynômes de Tchebychev associé à une intégration de Gauss-Legendre.



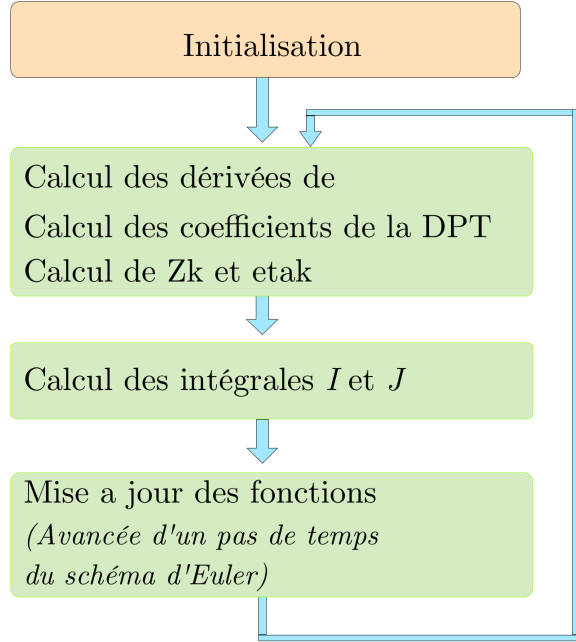


FIGURE 1 – Schéma de la structure globale du code. L'ensemble des opérations .

## 4.2 Discrétisation en champ

Comme nous l'avons mentionné la discrétisation en champ se fait sur une grille fixe de points régulièrement espacés. Les dérivées sont calculées sur 5 points avec des schémas différences finis (Ann. ??). Ce choix sur 5 points a été fait pour essayer de calculer des dérivées le plus précisément possible. Le problème venant des points des bords de la grille de discrétisation, puisque ne possédant pas de condition de bords, nous utilisons des schémas complètement décentrés pour ne faire un calcul que sur les points connus dans la grille. Il s'avère que cette technique reste stable (nous verrons en Sec. ?? que cela nous a quand même posé des problèmes pour le modèle d'Ising en deux dimensions).

Nous avons remarqué aussi que l'on retrouve l'équivalent d'une condition CFL pour le choix du pas de discrétisation  $\delta\rho$ . En effet le rapport  $\delta t/\delta\rho$  doit rester inférieur à une certaine valeur pour conserver la stabilité du schéma.

Enfin il pourrait sembler étranger d'utiliser une discrétisation en champ d'ordre 5 couplée à une discrétisation temporelle d'ordre 1. Cependant l'implémentation d'un schéma de Runge-Kutta a été testé sans pour autant permettre un calcul avec plus de précision ou une plus grande rapidité.

## 4.3 Discrétisation en impulsion

### 4.3.1 Interpolation de Tchbychev

Pour la discrétisation en impulsion

### 4.3.2 Calcul de l'interpolé - méthode de Clenshaw

Afin de calculer la fonction aux points d'interpolation lorsque cela est nécessaire nous utilisons une méthode un peu plus astucieuse que celle consistant à calculer directement la somme de la série.

#### Proposition 4.1

*Algorithme de Clenshaw. Soit, de manière générale, une suite de polynômes  $\{\mathcal{P}_n\}_{n \in \mathbb{N}}$  liés par la relation*

$$\forall x \in \mathbb{R} \quad \mathcal{P}_{n+1}(x) = u_n(x)\mathcal{P}_n(x) + v_n(x)\mathcal{P}_{n-1}(x) \quad (34)$$

*On souhaite calculer, pour  $x \in \mathbb{R}$  donné,*

$$S = \sum_{l=0}^N a_l \mathcal{P}_l(x) \quad (35)$$

*On considère l'algorithme suivant :*

- 
- 1:  $b_{N+2} = 0; b_{N+1} = 0$
  - 2: **for**  $m = N..1$  **do**
  - 3:    $b_m = a_m + u_m(x)b_{m+1} + v_{m+1}(x)b_{m+2}$
  - 4: **end for**
  - 5:  $S_1 = a_0\mathcal{P}_0(x) + b_1\mathcal{P}_1(x) + b_2v_1(x)\mathcal{P}_0(x)$
- 

*Alors nous avons  $S = S_1$ .*

*Démonstration :* Ce résultat se démontre par récurrence sur  $m \in [1, N]$  en remarquant que,

$$S_1 = S_m + b_{m+1}\mathcal{P}_{m+1}(x) + b_{m+2}v_{m+1}(x)\mathcal{P}_{m+2}(x) \quad (36)$$

Avec la notation  $S_m = \sum_{l=0}^m a_l \mathcal{P}_l(x)$ . ■

## 4.4 Parallélisation

Le code a été écrit de manière à rendre sa parallélisation très simple. En effet pour chaque point de la grille en champ on a une fonction discrétisée en impulsion qui est complètement indépendante des autres à l'exception du moment où l'on calcule les dérivées par rapport à  $\rho$ . Ainsi il suffit de réaliser l'ensemble des calculs dans des boucles parcourant l'ensemble quasi-indépendant des points de la grille en champs. En utilisant une architecture à mémoire partagée comme openMP on la parallélisation de toutes les parties vertes de Fig. ?? se fait tout naturellement à l'aide de quelques instructions seulement.



## 5 Le modèle d'Ising en dimension 2

On considère le modèle d'Ising classique sur un réseau hypercubique de dimension  $d$ . Les longueurs seront exprimées en unité de pas du réseau. On note  $\{\hat{\mathbf{e}}_\nu\}_{\nu \in \llbracket 1, d \rrbracket}$  la base cartésienne de ce réseau. Le hamiltonien du système est alors donné par

$$H = -J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} \quad (37)$$

Où  $S_{\mathbf{r}}$  est la valeur du spin à la position  $\mathbf{r}$ , comprise dans  $\{-1, 1\}$ . La notation  $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$  signifie que le terme  $S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'}$  contribue à la somme si et seulement si ce sont deux spins plus proches voisins du réseau (i.e s'il existe  $\nu \in \llbracket 1, d \rrbracket$  tel que  $\mathbf{r}' = \mathbf{r} \pm \hat{\mathbf{e}}_\nu$ ).

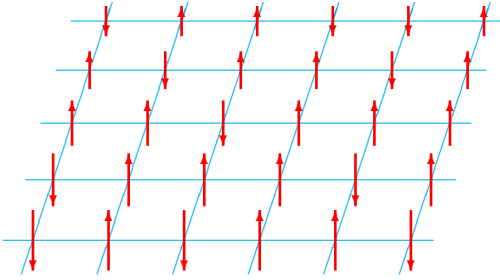


FIGURE 2 – Exemple de réseau d'Ising en dimension  $d = 2$ . Le système est dans la phase haute température ( $T > T_c$ ).

Sur un tel système nous observons une transition de phase du second ordre. En effet il existe une phase (dite de symétrie brisée, ou encore basse température) dans laquelle les spins tendent tous à s'aligner dans une direction privilégiée lorsque la température est faible et que les fluctuations thermiques ne jouent pas un rôle important. Lorsque l'on va dépasser la température critique  $T_C$  les spins vont avoir une direction plus ou moins aléatoire et on se retrouve alors dans une nouvelle phase (dite symétrique). C'est ce modèle qui explique la perte d'aimantation d'un métal à haute température que nous avons mentionné dans l'introduction.

La particularité de ce modèle est aussi qu'il a déjà été complètement résolu analytiquement par Onsager [10] en 1944. Tout est donc déjà connu et notamment la température critique de la transition de phase. Avec l'approche BMW nous allons essayer de la retrouver pour valider la qualité de l'approximation et la possibilité de calculer des grandeurs non universelles comme  $T_C$  par le NPRG.

### 5.1 Modélisation du problème avec des champs

Pour des raisons pratiques on définit maintenant un hamiltonien légèrement modifié

$$H_\mu = -J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - \mu\beta N_S \quad (38)$$

$$H_\mu = -J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - \mu\beta \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \quad (39)$$

Où  $N_S$  est le nombre total de spins. Physiquement cela ne change rien car cela ne fait que décaler l'origine des énergies. En revanche cela a un avantage mathématique. En effet, on pose  $A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}$  la matrice définie implicitement dans  $\mathcal{M}_{N_S}(\mathbb{R})$  par

$$H_\mu = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)} S_{\mathbf{r}'} \quad (40)$$

Il est alors possible de choisir  $\mu$  suffisamment grand pour que  $A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}$  soit à diagonale strictement dominante et donc inversible. Par construction il suffit de prendre  $\mu > dJ$ . On peut alors réaliser une transformée de Hubbard-Stratanovitch.

Pour cela commençons par écrire la fonction de partition du modèle

$$\mathcal{Z} = \sum_{\{S_{\mathbf{r}}\}} e^{-H_\mu} = \sum_{\{S_{\mathbf{r}}\}} \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)} S_{\mathbf{r}'} \right) \quad (41)$$

Par integration gaussienne *inverse* il vient,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &\propto \sum_{\{S_{\mathbf{r}}\}} \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \varphi_{\mathbf{r}} (A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)})^{-1} \varphi_{\mathbf{r}'} + \sum_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}} \\ \mathcal{Z} &\propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \varphi_{\mathbf{r}} (A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)})^{-1} \varphi_{\mathbf{r}'} + \sum_{\mathbf{r}} \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}}))} \end{aligned} \quad (42)$$

Cependant nous ne pouvons pas exprimer facilement  $(A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)})^{-1}$  et pour cela il est pratique de réaliser une transformée de fourier semi-discrète en posant

$$\hat{\varphi}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad \text{et} \quad \varphi_{\mathbf{r}} = \int_{\mathbf{q}} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (43)$$

Il vient alors

$$\begin{aligned} H_\mu &= -J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \hat{\varphi}(\mathbf{q}') e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} + \mathbf{q}'\mathbf{r}')} \\ &\quad - \mu\beta \sum_{\mathbf{r}} \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \hat{\varphi}(\mathbf{q}') e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}')\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (44)$$

Notons donc simplement

$$h_\mu(\mathbf{q}) = -\beta \left\{ J \sum_{\nu} e^{\pm i\mathbf{q} \hat{\mathbf{e}}_\nu} + \mu \right\} \quad (45)$$

Ainsi, il vient,

$$H_\mu = \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \hat{\varphi}(\mathbf{q}') h_\mu(\mathbf{q}') \sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\mathbf{r}} \quad (46)$$

$$H_\mu = \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \hat{\varphi}(\mathbf{q}') h_\mu(\mathbf{q}') D_{N_S}(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \quad (47)$$

En définissant le noyaux de Dirichlet  $D_{N_S}$  par

$$\forall \mathbf{p} \in [-\pi, \pi]^2 \quad D_{N_S}(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (48)$$

On note  $\mathcal{D} = \mathcal{D}([-\pi, \pi]^2)$ , soit  $f \in \mathcal{D}$ ,  $D_{N_S}$  étant une fonction de  $L^2([-\pi, \pi]^2)$ , il appartient à  $\mathcal{D}'$ . On montre alors que  $\parallel$

$$\lim_{N_S \rightarrow +\infty} \langle D_{N_S}, f \rangle_{\mathcal{D}', \mathcal{D}} = \langle \delta, f \rangle_{\mathcal{D}', \mathcal{D}} \quad (49)$$

Ainsi, en prenant la limite  $N_S \rightarrow +\infty$  et en raisonnant au sens des distributions,

$$\lim_{N_S \rightarrow +\infty} H_\mu = -\beta \int_{\mathbf{q}} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \left\{ \sum_{\nu=1}^d J e^{\pm i \mathbf{q} \hat{\mathbf{e}}_\nu} + \mu \right\} \hat{\varphi}(-\mathbf{q}) \quad (50)$$

Dans la suite nous ferons l'hypothese, comme souvent en physique, que  $N_S$  est suffisamment grand pour que l'on écrive, par abus de notation,  $H_\mu = \lim_{N_S \rightarrow +\infty} H_\mu$ .

Nous obtenons alors

$$H_\mu = -\beta \int_{\mathbf{q}} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \left\{ J \sum_{\nu=1}^d \cos(q_\nu) + \mu \right\} \hat{\varphi}(-\mathbf{q}) \quad (51)$$

Et on en déduit que la transformée de Fourier de  $A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}$  qui est un opérateur de ... vérifie,

$$\hat{A}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \begin{cases} 2J\beta \sum_{\nu=1}^d \cos(q_\nu) + 2\beta\mu & \text{si } \mathbf{q}' = -\mathbf{q} \\ 0 & \text{si } \mathbf{q}' \neq -\mathbf{q} \end{cases} \quad (52)$$

Autrement dit,  $\hat{A}$  est un opérateur diagonal et bien inversible si  $\mu > Jd$ . Notons,

$$\gamma(\mathbf{q}) = \frac{1}{d} \sum_{\nu=1}^d \cos(q_\nu) \quad (53)$$

$$\lambda_\mu(\mathbf{q}) = 2\beta(Jd\gamma(\mathbf{q}) + \mu) \quad (54)$$

En écrivant alors la conservation du produit scalaire de  $^2$  dans  $L^2(\mathbb{R})$  opérée par la transformation de Fourier semi-discrète nous pouvons écrire : ...

$$\mathcal{Z} \propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} e^{-S_\mu[\varphi]} \quad (55)$$

Avec l'action  $S$  s'écrivant :

$$S_\mu[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \frac{1}{\lambda_\mu(\mathbf{q})} \varphi(-\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{r}} \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) \quad (56)$$

1. Ceci s'explique en partie "avec les mains". En effet dans une approximation de champ moyen, comme son nom l'indique les fluctuations des degrés de libertés - ici l'orientation des spins - autour d'une position moyenne se trouvent être négligées. Or leur prise en compte pour la résolution complète du modèle implique que pour une même température le système complet est plus désordonné que ce que le calcul champ moyen nous donne. La température critique vraie sera donc plus basse que la température critique champ moyen

Par isometrie de la transformation de Fourier, et donc par le théorème de Parseval, nous réécrivons  $S$  sous la forme

$$S_\mu[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \left[ \frac{1}{\lambda_\mu(\mathbf{q})} - \frac{1}{\lambda_\mu(0)} \right] \varphi(-\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{r}} \left[ \frac{1}{2\lambda_\mu(0)} \varphi_{\mathbf{r}}^2 - \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) \right] \quad (57)$$

Enfin, soit  $\delta \in \mathbb{R}_*^+$ , on pose le changement de variable,

$$\varphi \rightarrow \delta \sqrt{2\beta Jd} \varphi \quad (58)$$

On obtient alors

$$S_\mu[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \varepsilon_0(\mathbf{q}) \hat{\varphi}(-\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{r}} U(\varphi(\mathbf{r})) \quad (59)$$

Avec, en posant  $\tilde{\mu} = \mu/(Jd)$  et  $\tilde{\beta} = \beta Jd$ ,

$$\varepsilon_0(\mathbf{q}) = \delta^2 \frac{1 - \gamma(\mathbf{q})}{(\gamma(\mathbf{q}) + \tilde{\mu})(1 + \tilde{\mu})} \quad (60)$$

$$U(\phi) = \delta^2 \frac{1}{1 + \tilde{\mu}} \frac{1}{2} \phi^2 - \ln \left( \cosh \left( \delta \sqrt{2\tilde{\beta}} \phi \right) \right) \quad (61)$$

On se retrouve donc ici avec la formulation d'un problème de théorie des champs que l'on peut résoudre avec le groupe de renormalisation non perturbatif et notamment avec l'approximation BMW. La fonction  $U$  représente ainsi le potentiel du système et  $\varepsilon_0$  s'appelle sa relation de dispersion.

Remarquons de plus que la fonction  $U$  est de classe  $\mathcal{C}^\infty$  dérivable sur  $[0, +\infty[$ . Ainsi il vient

$$X(\phi) = \partial_\phi^2 U(\phi) = \delta^2 \frac{1}{1 + \tilde{\mu}} - \quad (62)$$

Ceci nous permet de récupérer la valeur que l'on aurait trouvé en calculant la température critique  $\tilde{T}_c^{\text{MF}} = T_c^{\text{MF}}/(Jd)$  en s'appuyant sur une théorie de champ moyen. En effet, dans une théorie de champ moyen le potentiel du système est directement le potentiel  $U$ . Or on rappelle que la phase dans laquelle on se trouve dépend du potentiel, de la position de son minimum et de sa forme de manière générale. Nous savons qu'en dessous de la température critique  $U$  est une fonction concave au voisinage de  $\phi = 0$  et au dessus c'est une fonction convexe. Ainsi, à la transition  $X(0) = 0$ . Ceci nous donne

$$\frac{1}{\tilde{T}_c^{\text{MF}}} = \tilde{\beta}_c^{\text{MF}} \simeq \frac{1}{2(1 + \tilde{\mu})} \quad (63)$$

Cette valeur nous donne déjà une borne supérieure sur la température critique que l'on recherche. En effet, on sait que la vraie température critique sera toujours plus faible que celle obtenue par approximation de champ moyen<sup>1</sup> :  $T_c < T_c^{\text{MF}}$ .

## 5.2 Etapes de la résolution numérique

La résolution numérique du problème s'est déroulée en plusieurs étapes. Tout d'abord nous avons commencé comme en .. par écrire les équations BMW qui découlent de la forme de l'action précédemment déterminés. Cependant nous sommes passé par plusieurs étapes.

Tout d'abord, contrairement au modèle  $O(N)$ , nous avons commencé par écrire les équations BMW sans les adimensionner. En effet possédant des

Malheureusement, après avoir écrit une première fois les équations selon la variable  $\rho$  à cause d'instabilités numériques constatées au voisinage de  $\rho = 0$  provenant probablement du calcul numérique instable des dérivées en ces points nous avons du les réécrire

## 5.3 Les différents jeux d'équation

## 6 Méthodes et outils numériques pour la résolution d'Ising 2D

Nous allons passé en revue et justifié ici les principales méthodes numériques que nous avons utilisé pour tenter de résoudre les équations. En grande partie nous avons repris ce qui avait déjà été fait pour la résolution du modèle  $O(N)$  mais nous les avons adapter pour pouvoir être utiliser au mieux en deux dimensions.

### 6.1 Structure du code

### 6.2 Interpolation de Tchebychev

Afin de pouvoir calculer les intégrales  $J$  avec précision apparaissant dans les équations il semble nécessaire d'interpoler la fonction  $\Delta_k$  ainsi que ces dérivées dans le plan des impulsions. Pour cela nous réutilisons encore une interpolation de Tchebychev en dimension 2.

#### 6.2.1 Théorème de décomposition

Nous rappelons ici un théorème justifiant l'utilisation des polynômes de Tchebychev comme pôlynomes d'interpolation en dimension 2. Ce théorème et sa démonstrations se trouvent dans l'ouvrage [9].

##### Théorème 6.1

Soit  $f : [-1, 1]^2 \rightarrow \mathbb{C}$  une fonction continue aux variations bornées (comme définies en [9]). On suppose que l'une des dérivées partielles de  $f$  existe et est bornée dans  $[-1, 1]$ . Alors la série  $f_N$  définie par :

$$f_N(x, y) = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N c_{ij} T_i(x) T_j(y) \quad (64)$$

converge uniformément vers  $f$  quand  $N \rightarrow +\infty$ .

La condition des variations bornées ne peut bien entendu pas être vérifiée sur nos fonctions mais ...

#### 6.2.2 Décomposition méthode 1

Soit  $f$  une fonction de  $[0, \pi]^2$  dans  $\mathbb{R}$ . Dans un premier temps nous avons opté pour un algorithme de recherche direct des coefficients  $c_{ij}$  de sa décomposition en série de polynômes de Tchebychev très inspiré de la méthode 1D. Supposons, en effet, que l'on veuille effectuer une décomposition à l'ordre  $N_C - 1$  et donc écrire

$$f(x, y) \simeq \sum_{i=0}^{N_C-1} \sum_{j=0}^{N_C-1} c_{ij} T_i(x) T_j(y) \quad (65)$$

Pour trouver la valeur des coefficients de la matrice  $((c_{i,j}))_{i,j}$  on prend les ensembles des racines du polynôme de Tchebychev de degré  $N_C$ ,  $\{x_m\}_{0 \leq m \leq N_C-1}$  et  $\{y_n\}_{0 \leq n \leq N_C-1}$  et on impose,

$$f(x_m, y_n) = \sum_{i=0}^{N_C-1} \sum_{j=0}^{N_C-1} c_{ij} T_i(x_m) T_j(y_n) \quad (66)$$

En utilisant les relations des polynômes de Tchebychev on peut alors déterminer les coefficients de la matrice  $((c_{ij}))_{i,j}$  avec les formules

$$c_{ij} = \frac{A}{N_C^2} \sum_{m=0}^{N_C-1} \sum_{n=0}^{N_C-1} f(x_m, y_n) T_i(x_m) T_j(y_n) \quad (67)$$

$$A = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j = 0 \\ 2 & \text{si } i = 0 \text{ et } j \neq 0 \\ 2 & \text{si } i \neq 0 \text{ et } j = 0 \\ 4 & \text{si } i \neq 0 \text{ et } j \neq 0 \end{cases} \quad (68)$$

Cette méthode est extrêmement couteuse puisque pour calculer l'ensemble des coefficients de  $((c_{ij}))_{i,j}$  cela demande un algorithme de complexité évoluant en  $\mathcal{O}(N_C^2)$  et déjà long pour de faibles valeurs de  $N_C$ . Ce pourquoi, afin d'obtenir de meilleures précisions sur les intégrales calculées tout en conservant un temps de calcul raisonnable nous avons implémenté la deuxième méthode suivante.

#### 6.2.3 Décomposition méthode 2

En revanche, il existe une méthode plus astucieuse, inspirée de ce qui est mis en place dans le paquet *chebfun* développé par ... qui permet justement de traiter les interpolations de Tchebychev sous Matlab. Cette méthode est développée en détails dans [12].

Au lieu de faire directement une décomposition sur une base tensorielle de polynômes de Chebychev on commence par réaliser une approximation de rang faible de la fonction que l'on souhaite approximer. Plus précisément, on considère les ensembles des racines de Tchebychev  $\{x_m\}_{0 \leq m \leq N_C-1}$  et  $\{y_n\}_{0 \leq n \leq N_C-1}$ . Alors on peut former la matrice

$$\mathcal{F} = ((f(x_m, y_n))_{0 \leq m, n \leq N_C-1}) \quad (69)$$

et faire de cette matrice une approximation de rang faible par élimination Gaussienne.

---

```

1: Initialisation :  $\mathcal{E}^0 = \mathcal{F}$  ;  $\mathcal{F}_0 = 0$  ;  $k = 1$  ;
2: while  $\|\mathcal{E}^k\|_\infty < \varepsilon$  do
3:    $(i_k, j_k) = \text{argmax}_{(i,j)} \{|\mathcal{E}_{i,j}^{k-1}|\}$ 
4:    $\mathcal{C}_j^k = \mathcal{E}_{i_k,j}^k$  ;  $\mathcal{R}_i^k = \mathcal{E}_{i,j_k}^k$  ;  $d_k = \mathcal{E}_{i_k,j_k}^k$ 
5:    $\mathcal{E}_{i,j}^k = \mathcal{E}_{i,j}^{k-1} - d_k^{-1} \mathcal{C}_j^k \mathcal{R}_i^k$ 
6:    $\mathcal{F}_{i,j}^k = \mathcal{F}_{i,j}^{k-1} + d_k^{-1} \mathcal{C}_j^k \mathcal{R}_i^k$ 
7: end while

```

---

Notons  $Q$  le rang de l'approximation obtenue. On obtient alors une écriture de  $f$  sous la forme On obtient alors une expression de la forme

$$\mathcal{F} \simeq \tilde{\mathcal{F}} = \sum_{j=1}^Q d_j \mathcal{C}^j \mathcal{R}^j \quad (70)$$

Comme nous ne connaissons exactement les fonctions  $f$  qu'aux points d'interpolation de Chebychev cela revient au même que d'écrire que nous avons décomposé  $f$  comme une somme de produits de fonctions à une variable,

$$f(x, y) \simeq \sum_{j=1}^Q d_j c^j(y) r^j(x) \quad (71)$$

On peut alors décomposer les fonctions  $c_j$  et  $r_j$  sur une base de polynômes de Chebychev comme on peut le faire pour toute fonction d'une seule variable. La décomposition est ainsi une opération de produit tensoriel.

### 6.3 Le calcul des intégrales

Pour calculer numériquement les différentes intégrales nous nous servons des propriétés de symétries des différentes fonctions. En effet pour tout  $\rho \in \mathbb{R}^+$  les fonctions  $\varepsilon_0(\cdot, \cdot)$ ,  $\mathcal{R}_k(\cdot, \cdot)$ ,  $\Delta_k(\cdot, \cdot, \rho)$ , ...

#### 6.3.1 Le choix de la quadrature

On interpole les fonctions des polynômes de Tchebychev et on utilise toujours une méthode pseudospectrale<sup>2</sup>. Il semble donc naturel de se demander si la quadrature de Gauss-Legendre est vraiment la mieux adaptée. En effet, pour gagner du temps et utiliser directement la connaissance de la fonction aux points d'interpolation nous avons penser au calcul d'intégrale par la première règle de Fejer [ ] qui permet cela.

Cependant cette méthode c'est avérée être inefficace puisque il faut de manière générale plus de points pour obtenir la même précision qu'une quadrature de Gauss Legendre. Et de plus, afin d'assurer la compatibilité entre l'interpolation et la quadrature il est nécessaire que les deux se fassent sur le même nombre de point, ce qui est restrictif.

#### 6.3.2 Calcul des intégrales $I$

Soit  $f$  une fonction de  $[-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$  à valeurs dans  $\mathbb{R}$ . On suppose que  $f$  est symétrique par rapport à l'axe des  $x = 0$ , à l'axe des  $y = 0$  et à l'axe  $x = y$ . Nous cherchons alors une quadrature pour intégrer  $f$  sur son domaine de définition. Pour commencer, en utilisant les deux premières symétries,

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x, y) dx dy = 4 \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} f(x, y) dx dy \quad (72)$$

On peut alors faire le changement de variable affine  $(\tilde{x}, \tilde{y}) \rightarrow (2x/\pi - 1, 2y/\pi - 1)$  donnant,

$$\int_0^{\pi} \int_0^{\pi} f(x, y) dx dy = \frac{\pi^2}{4} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 f\left(\frac{\pi}{2}(\tilde{x} + 1), \frac{\pi}{2}(\tilde{y} + 1)\right) d\tilde{x} d\tilde{y} \quad (73)$$

2. c'est à dire que l'on connaît à chaque pas de temps la valeur de la fonction au points d'interpolation de Tchebychev, ainsi que les coefficients de son développement en série de polynômes de Tchebychev

Les intégrales sur le carré unité  $[-1, 1] \times [-1, 1]$  sont alors calculées avec une quadrature *tensorielle* obtenue à partir d'une quadrature 1D. Il vient des considérations précédentes,

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x, y) dx dy \simeq \pi^2 \sum_{i=0}^{N_{GL}} \sum_{j=0}^{N_{GL}} w_i w_j f\left(\frac{\pi}{2}(\xi_i + 1), \frac{\pi}{2}(\xi_j + 1)\right) \quad (74)$$

Où  $\{w_i\}_{i \in [1, N_{GL}]}$  sont les poids d'intégration 1D et  $\{\xi_i\}_{i \in [1, N_{GL}]}$  les poids d'intégration correspondants. Par construction,  $((w_i w_j))_{i,j}$  est une matrice symétrique et par symétrie de  $f$  par rapport à la première bissectrice nous pouvons alors réduire la double somme par,

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x, y) dx dy \simeq & \pi^2 \sum_{i=0}^{N_{GL}} \sum_{j=0}^{i-1} w_i w_j 2 f\left(\frac{\pi}{2}(\xi_i + 1), \frac{\pi}{2}(\xi_j + 1)\right) + \\ & \pi^2 \sum_{i=0}^{N_{GL}} w_i^2 f\left(\frac{\pi}{2}(\xi_i + 1), \frac{\pi}{2}(\xi_i + 1)\right) \end{aligned} \quad (75)$$

Ce qui permet de réduire le temps de calcul en réduisant légèrement la complexité algorithmique.

#### 6.3.3 Calcul des intégrales $J$

Soit  $(a, b) \in [0, \pi] \times [0, \pi]$ . Soit maintenant  $f$  et  $h$  deux fonctions de  $\mathbb{R}^2$  dans  $\mathbb{R}$  et  $g$  définie sur  $[-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$  par  $g : (x, y) \rightarrow f(x + a, y + b)$ . On suppose, comme précédemment, que  $f$  et  $h$  sont symétriques par rapport à l'axe  $x = 0$ , à l'axe  $y = 0$  et à l'axe  $x = y$ . On fait aussi l'hypothèse qu'elles sont  $2\pi$  périodiques. Nous cherchons alors une quadrature pour intégrer  $g \times h$  sur  $[-\pi, \pi] \times [-\pi, \pi]$ . Pour cela remarquons que

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} g(x, y) h(x, y) dx dy = & \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} [f(x + a, y + b) + f(x + a, y - b)] h(x, y) dx dy + \\ & \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} [f(x - a, y + b) + f(x - a, y - b)] h(x, y) dx dy \end{aligned} \quad (76)$$

Et on adopte encore une quadrature de Gauss-Legendre.

### 6.4 Dérivées numériques

### 6.5 Complexité algorithmique et parallélisation - problème de rapidité

Comme pour le modèle continu  $O(N)$  il est possible de paralléliser le code en utilisant de l'openMP [ ] grain

fin sur les boucles en champ. En revanche ici notre code, à cause de la quadrature précise que l'on souhaite avoir sur le calcul des intégrales  $J$  le temps de calcul se trouve évoluer en  $\mathcal{O}(Q_{\max} \times N_C^3 \times N_{GL}^2)$ . Il vient alors

## 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] F Benitez, J-P Blaizot, H Chaté, B Delamotte, R Méndez-Galain, and N Wschebor. Nonperturbative renormalization group preserving full-momentum dependence : Implementation and quantitative evaluation. *Physical Review E*, 85(2) :026707, 2012.
- [3] Danielle Lederer Bernard Roulet Bernard Diu, Claudine Guthmann. *Éléments de physique statistique*. Hermann, Juillet 1996.
- [4] 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.
- [5] Bertrand Delamotte. *An Introduction to the Non-perturbative Renormalization Group*, pages 49–132. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [6] B. Diu, C. Guthmann, and D. Lederer. *Thermodynamique*. Collection Enseignement des sciences. Hermann, 2007.
- [7] Martin Kochmański, Tadeusz Paszkiewicz, and Sławomir Wolski. Curie–weiss magnet—a simple model of phase transition. *European Journal of Physics*, 34(6) :1555, 2013.
- [8] Frédéric Léonard. *Criticalité et phase de brisée de modèles avec symétrie discrète*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2016.
- [9] J. C. Mason and D. C. Handscomb. *Chebyshev Polynomials*. CRC Press, Florida, 2003.
- [10] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65 :117–149, Feb 1944.
- [11] JC Toledano and P Toledano. The landau theory of phase transitions world scientific. *Singapore, New Jersey, Hong Kong*, page 451, 1987.
- [12] Alex Townsend. *Computing with functions in two dimensions*. PhD thesis, University of Oxford, 2014.
- [13] Christof Wetterich. Exact evolution equation for the effective potential. *Physics Letters B*, 301(1) :94, 1993.