



MASTER 2 DE MATHÉMATIQUES : ANALYSE, MODÉLISATION, SIMULATION
PARCOURS : MODÉLISATION SIMULATION

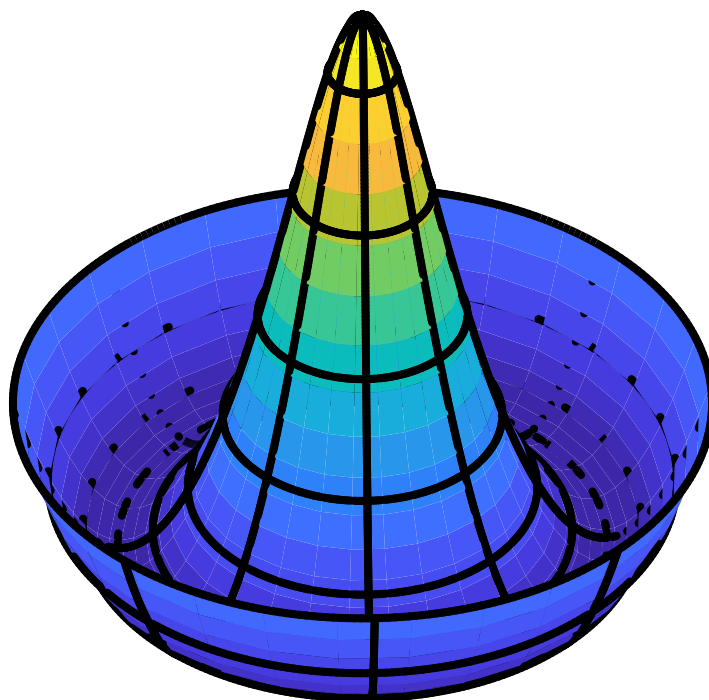
Etude numérique des équations du groupe de renormalisation non perturbatif

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,
École Normale Supérieure de Cachan, Université Versailles Saint Quentin*

27 février - 28 juillet 2017



Remerciement

Acknowledgments

Résumé

Brouillon ... Nous étudions les phénomènes de transitions de phase et plus particulièrement les transitions du second ordre produites par un changement de température T . Lorsqu'une telle transition se produit dans un milieu pour une température dite critique T_c , ces propriétés physico-chimiques changent brusquement et certaines grandeurs thermodynamiques deviennent alors des fonctions singulières de $T - T_c$ ayant des variations en loi de puissance. Ces comportements permettent de définir des grandeurs physiques que l'on appelle des exposants critiques et qui caractérisent les singularités. Ils ont la particularité d'être identiques pour deux milieux différents partageant des propriétés microscopiques de symétries communes. Le formalisme du groupe de renormalisation non perturbatif associé à l'approximation dite BMW doit permettre de calculer numériquement les exposants critiques η , ν ainsi que T_c pour différents systèmes à travers la résolution d'équations integro-différentielles non linéaires : les équations BMW. Dans un premier temps notre but a été d'essayer de corriger un premier code de simulation de ces équations pour une première classe de système. Malgré tous nos efforts, les problèmes numériques subsistent encore. Dans un second temps nous avons écrit un nouveau code qui nous a permis de calculer numériquement T_c pour un autre modèle, toujours avec les équations BMW, et de la comparer à la valeur théorique attendue. Nous obtenons une erreur de $\sim 4\%$. Cet écart reste plus élevé que ce qui été espéré mais peut s'expliquer par des imprécisions de calcul et des irrégularités, observables dans les solutions numériques, que nous n'avons pas pu supprimer.

Abstract

Brouillon ... We study second order phase transitions produced by temperature variations. In a given medium such a transition appears for a particular temperature T_c and causes great changes in its physical and chemical properties. It is then possible to introduce physical quantities η and ν that have the interesting peculiarity of being universal for all systems sharing the same microscopical symmetries. The non perturbative renormalization group is a general formalism that allows us to numerically compute η , ν and T_c once an approximation called BMW has been used. Our goal was to make correction of a simulation program with the ability to compute η and ν for a certain class of systems. We also tried to create a new program to compute T_c of a particular system.

Table des matières

1	Introduction	4
1.1	Le modèle d'Ising 2D	4
1.2	Transitions de phase	5
1.2.1	Définition et classification	5
1.2.2	Transitions du second ordre : définition des exposants critiques	6
1.2.3	Objectif général : importance de la fonction de partition	6
1.3	Formalisme de mécanique statistique des champs	7
1.4	Intérêt de l'approche par la théorie statistique des champs. Intérêt du RG et du NPRG	7
1.5	Les systèmes à symétrie $O(N)$	8
1.6	Objectifs de l'étude	8
2	Les formalismes du RG et NPRG	9
2.1	Le groupe de renormalisation (RG)	9
2.1.1	Transformée de Fourier	9
2.1.2	Idée générale	9
2.2	Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)	9
2.2.1	Intégration continue : le régulateur	9
2.2.2	Potentiels	10
2.2.3	Équation fondamentale : équation de flot	10
2.3	Approximation BMW pour \mathbb{Z}_2	11
2.4	Notion de point fixe	11
2.5	Résumé de la méthode	12
3	Le modèle continu $O(N)$	13
3.1	Hamiltonien de la théorie φ^4	13
3.2	Equations BMW continu	13
3.3	Régulateur pour BMW continu	14
4	Méthodes numériques pour la résolution de BMW continu	14
4.1	Travail réalisé	14
4.2	Structure de l'algorithme	14
4.3	Discrétisation en champ	15
4.4	Discrétisation en impulsion	15
4.4.1	Expression des coefficients	15
4.5	Calcul des intégrales	16
4.5.1	Méthode de Clenshaw	16
4.5.2	Calcul des dérivées	16
4.6	Parallélisation	17
5	Resultats : $O(N)$ continu	17
5.1	Pour $N = 1$ (\mathbb{Z}_2), $d = 2$	17
5.2	Pour $N = 2$ ou $N = 3$, $d = 2$	17
6	Retour sur le modèle d'Ising 2D	19
6.1	Modélisation avec des champs	19
6.2	Régulateur	20
6.3	Étapes de la résolution	20
6.3.1	Première étape	20
6.3.2	Deuxième étape	21
6.3.3	Troisième étape	22
7	Méthodes et outils numériques pour la résolution d'Ising 2D	22
7.1	Structure du code	22
7.2	Problèmes rencontrés	22
7.3	Symétries et périodicité des fonctions	23
7.4	Interpolation de Tchebychev	23
7.4.1	Décomposition	23

7.4.2	Décomposition méthode 1	24
7.4.3	Décomposition méthode 2	24
7.5	Le calcul des intégrales	25
7.5.1	Le choix de la quadrature	25
7.5.2	Calcul des intégrales I, \bar{I}, \tilde{I}	25
7.5.3	Calcul des intégrales J, \bar{J}, \tilde{J}	25
7.6	Dérivées numériques en champ	26
8	Resultats : Ising 2D	26
8.1	Complexité algorithmique et parallélisation - problème de rapidité	26
8.2	Problème de précision des intégrales	27
8.3	Estimation de la température critique et de l'exposant critique η	27
9	Conclusion	28
A	Outils pour le développement des équations	30
A.1	Notations des normes	30
A.2	Transformée de Fourier	30
A.3	Transformée de Fourier Semi-Discrète (TFSD)	30
A.4	Derivation fonctionnelle	30
A.4.1	Définition	30
A.4.2	Transformée de Fourier d'une dérivée fonctionnelle	30
A.5	Opérateurs à noyaux	31
A.5.1	Définition	31
A.5.2	TF d'un opérateur à noyau	31
A.5.3	Composition de deux opérateurs	31
A.5.4	Trace d'un opérateur à noyau	31
A.5.5	Inverse d'un opérateur à noyau	31
B	Les formalismes du RG et NPRG	32
B.1	Le groupe de renormalisation (RG)	32
B.1.1	Transformée de Fourier	32
B.1.2	Idée générale	32
B.1.3	Notion de point fixe	33
C	Fonctions de corrélation dans le calcul du NPRG	34
D	Modélisation du modèle d'Ising 2D avec des champs	35
E	Propriétés des fonctions à discrétiser	37
E.1	Symétries et périodicité des fonctions inconnues	37
E.2	Régularité	38
F	Complement des algorithmes	40
F.1	Formules de dérivation à 5 points	40
F.2	Propriétés élémentaires des polynômes de Tchebychev	40
F.3	Quadratures pour le calcul des intégrales à une dimension	41
F.3.1	Quadrature de Gauss-Legendre	41
F.3.2	Première règle de Fejer	41
G	Equations du modèle d'Ising 2D	42
G.1	Introduction	42
G.2	Les équations BMW en ρ dimensionnées	42
G.3	Les équations BMW en ϕ	43
G.3.1	Les équations BMW en ϕ dimensionnées	43
G.3.2	Les équations BMW en ϕ adimensionnées en impulsion	44
G.3.3	Les équations BMW en ϕ totalement adimensionnées	45

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 enfermé dans une boîte. Ce litre d'eau est constitué de $\sim 10^{24}$ molécules qui possèdent toutes plusieurs degrés de liberté chacune : leur position, leur vitesse etc. On remarque alors que, un seul litre d'eau, possède un nombre colossal de degrés de liberté qui peuvent interagir ensembles (par l'intermédiaire, entre autre, des collisions des molécules). Il n'est donc pas possible de déterminer les propriétés physiques macroscopiques de ce système en étudiant la dynamique individuelle de chaque degré de liberté le constituant, ce pourquoi on a recours à la physique statistique.

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. Nous commençons par décrire un exemple plus précis de système aux degrés de liberté en interactions, le système d'Ising 2D, nous permettant d'introduire la notion de phase et de transition de phase. Enfin nous expliciterons ce que nous avons plus particulièrement étudié dans ces phénomènes et comment nous nous y sommes pris.

1.1 Le modèle d'Ising 2D

Pour donner une image concrète d'un système aux degrés de liberté en interaction nous introduisons le système le plus simple à appréhender que l'on appelle le modèle d'Ising à deux dimensions et qui permet de décrire certains matériaux aimantés.

On se place dans l'espace à trois dimensions repéré par la base unitaire cartésienne $\{\hat{e}_\nu\}_{\nu=x,y,z}$ de \mathbb{R}^3 . On considère un réseau carré de pas a dans le plan (\hat{e}_x, \hat{e}_y) . Soit $L \in \mathbb{N}^*$, on note $\mathcal{R} = \{m\hat{e}_x + n\hat{e}_y \mid (m, n) \in \llbracket 0, L \rrbracket^2\}$ l'ensemble des positions des noeuds du réseau dans la surface $[0, aL]^2$.

Sur chaque noeud dans $[0, aL]^2$ se trouve un spin à une composante qui se représente par un vecteur dont la direction est parallèle à \hat{e}_z et dont l'orientation peut être selon $+\hat{e}_z$ ou $-\hat{e}_z$. Pour représenter le sens du spin à la position $\mathbf{r} \in \mathcal{R}$, on lui associe le scalaire $S_{\mathbf{r}}$ qui vaut $+1$ s'il est selon $+\hat{e}_z$ et -1 s'il est selon $-\hat{e}_z$, ce sont les degrés de liberté du système. Dans un modèle cohérent de la réalité nous avons un nombre $N_s = (L+1)^2 \sim 10^{24}$ de spins, autant dire un nombre "quasi-infini".

On appelle *micro-état* ou *configuration* du système un ensemble $\mathcal{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}}$ donné : par exemple $\mathcal{M} = \{S_0 = 1, S_{a\hat{e}_x} = -1, S_{a\hat{e}_y} = 1, S_{a\hat{e}_x + a\hat{e}_y} = 1, \dots\}$ est un micro-état. Une représentation en terme de vecteurs en est faite en Fig. 1. Il existe alors $2^{N_s} \sim 2^{10^{24}}$ micro-états possibles différents. Dans le modèle d'Ising, pour un micro état \mathcal{M}

on peut définir son énergie associée à l'aide du *hamiltonien*, $H(\mathcal{M})$ défini par

$$H(\mathcal{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}}) = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} . \quad (1)$$

La notation $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$ signifie que l'on somme sur tout $\mathbf{r} \in \mathcal{R}$ et $\mathbf{r}' \in \mathcal{R}$ mais que le terme $S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'}$ contribue à la somme si et seulement les noeuds \mathbf{r} et \mathbf{r}' sont plus proches voisins (i.e si $\mathbf{r}' = \mathbf{r} \pm a\hat{e}_x$ ou $\mathbf{r}' = \mathbf{r} \pm a\hat{e}_y$). On remarque alors que les spins interagissent ensemble. Le paramètre J représente une énergie, c'est une constante positive.

Supposons maintenant que le système soit soumis à un champ magnétique extérieur \mathbf{b} stationnaire. Ce champ peut prendre une valeur différente pour chaque noeud. On note $b_{\mathbf{r}} \hat{e}_z$ sa valeur au noeud \mathbf{r} ainsi que $\mathcal{B} = \{b_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}}$. L'énergie du micro-état \mathcal{M} s'en trouve alors changée et elle est décrite par un nouvel hamiltonien :

$$\mathcal{H}(\mathcal{M}, \mathcal{B}) = H(\mathcal{M}) - \sum_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} , \quad (2)$$

La somme sur \mathbf{r} est une somme sur l'ensemble des N_s positions des spins dans le réseau.

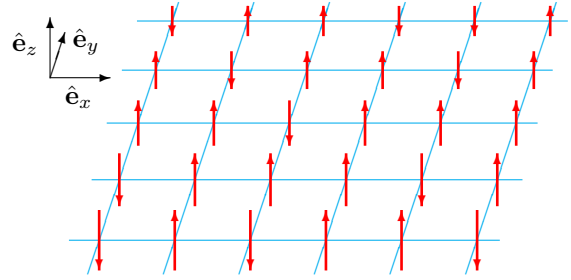


FIGURE 1 – Exemple de micro-état possible du réseau d'Ising tronqué où seuls quelques vecteurs sont représentés. Leur direction est fixe selon l'axe \hat{e}_z mais ils peuvent avoir un sens différent.

À température nulle et sans champ magnétique extérieur ($\mathcal{B} = 0$) le système ne peut se trouver que dans les configurations minimisant son énergie H . Comme J est positif ceci se produit pour $\mathcal{M}_1 = \{1, 1, 1, \dots, 1\}$ ou $\mathcal{M}_{-1} = \{-1, -1, -1, \dots, -1\}$, micro-états dans lesquels l'ensemble des spins sont tous orientés dans la même direction. Le système a une chance sur deux de se trouver dans \mathcal{M}_1 et une chance sur deux dans \mathcal{M}_{-1} .

Lorsqu'il est soumis à une température T non nulle, le système reçoit de l'énergie thermique de l'extérieur qui tend à favoriser la désorganisation des spins : son état d'équilibre n'est plus un micro-état particulier. En revanche, en présence d'un champ magnétique extérieur on peut définir la probabilité qu'à l'équilibre le système soit dans le micro-état \mathcal{M} par

$$p(\mathcal{M}, T, \mathcal{B}, N_s) = \frac{1}{\mathcal{Z}(T, \mathcal{B}, N_s)} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\mathcal{M}, \mathcal{B})}{k_B T}\right) \quad (3)$$

avec la notation

$$\mathcal{Z}(T, \mathcal{B}, N_s) = \sum_{\mathcal{M}'} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\mathcal{M}', \mathcal{B})}{k_B T}\right) . \quad (4)$$

La fonction $\mathcal{Z}(T, \mathcal{B})$ est appelée la fonction de partition du système, il s'agit d'une somme sur l'ensemble des 2^{N_s} micro-états possibles. La constante k_B est la constante de Boltzmann.

Plus la température est élevée plus l'énergie thermique reçue que l'on peut évaluer par $\sim k_B T$ est grande par rapport à l'énergie J . Si l'on raisonne à champ magnétique extérieur nul ($\mathcal{B} = 0$), pour $k_B T \ll J$ les probabilités sont telles que le système ne peut se trouver que dans \mathcal{M}_1 , \mathcal{M}_{-1} ou des micro-états proches de \mathcal{M}_1 ou \mathcal{M}_{-1} . En revanche, lorsque $k_B T \gg J$ les spins reçoivent suffisamment d'énergie thermique pour que le système puisse être indifféremment dans n'importe quel micro-état à l'équilibre.

L'ensemble des grandeurs du système sont calculées comme des moyennes statistiques sur les différents micro-états. En particulier une des grandeurs caractéristique du système est son aimantation moyenne. En effet, comme nous l'avons mentionné le modèle d'Ising décrit la physique des matériaux aimantés. Les spins agissent comme de petits aimants individuels et l'aimantation totale correspond donc à la somme des spins. Ainsi l'aimantation du micro-état $\mathcal{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r} \in \mathcal{R}}$ est

$$m_{\mathcal{M}}(N_s) = \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}. \quad (5)$$

En utilisant la description statistique il est alors possible de déterminer l'aimantation m totale (i.e. macroscopique), que posséderait un matériau décrit par le modèle d'Ising à une température T donnée, selon les formules

$$\begin{aligned} m(T, \mathcal{B}, N_s) &\equiv \langle m_{\mathcal{M}}(N_s) \rangle, \\ &\equiv \sum_{\mathcal{M}} p(\mathcal{M}, T, \mathcal{B}, N_s) \left(\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

On montre que m se ré-exprime aussi selon

$$m(T, \mathcal{B}, N_s) = \frac{1}{N_s \beta} \partial_{\mathcal{B}} \ln(\mathcal{Z}(T, \mathcal{B}, N_s)) \quad (7)$$

avec $\beta = 1/(k_B T)$. Nous en reparlerons plus loin mais de manière générale la fonction de partition \mathcal{Z} à une importance particulière car elle permet comme ici avec m de retrouver toutes les grandeurs macroscopiques intéressantes du système que l'on étudie.

Nous nous intéressons à l'aimantation à champ magnétique extérieur uniforme $\mathcal{B} = \{b_{\mathbf{r}} = b\}_{\mathbf{r}}$ car elle va nous permettre d'introduire le concept de transition de phase. En effet, nous pouvons remarquer que pour N_s et T donnés m est une fonction impaire du champ magnétique : $m(T, -b, N_s) = -m(T, b, N_s)$. Ceci est dû à l'invariance de H pour le changement de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$. Ainsi, $m(T, b = 0, N_s) = 0$, l'aimantation est nulle quand le champ magnétique extérieur est nul. Cependant pour décrire l'aimantation d'un système réel il faut d'abord calculer m dans limite à $N_s \rightarrow \infty$ (on suppose que cela est possible), que l'on appelle limite thermodynamique. On

montre qu'il apparaît alors une singularité. Pour T inférieur à une certaine valeur, notée T_c ,

$$\lim_{b \rightarrow 0} \lim_{N_s \rightarrow \infty} m(T, b, N_s) = \begin{cases} > 0 & \text{si } b \rightarrow 0^+ \\ < 0 & \text{si } b \rightarrow 0^- \end{cases} \quad (8)$$

Dans un système réel le champ magnétique extérieur n'est jamais complètement nul, avoir $b = 0^+$ ou $b = 0^-$ donne des aimantations opposées. Cet effet se nomme la brisure spontanée de symétrie : le caractère impair de m par rapport à b , dû à la symétrie de \mathcal{H} par le changement de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$, est perdu. Notons $m(T, b) = \lim_{N_s \rightarrow \infty} m(T, b, N_s)$.

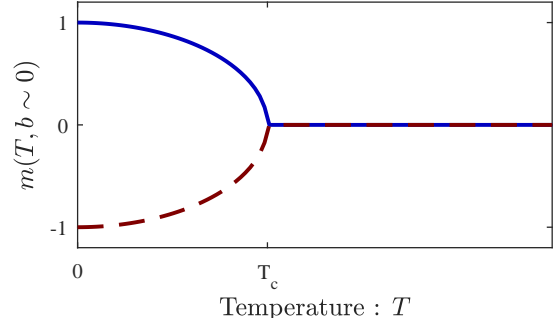


FIGURE 2 – Evolution de l'aimantation m du système en fonction la température à champ magnétique extérieur uniforme $b = 0^+$ et dans la limite thermodynamique (bleu continu). Même chose pour $b = 0^-$ (rouge pointillée).

Il se trouve que l'on peut tracer l'évolution de m , dans la limite thermodynamique, pour $b = 0^+$ et $b = 0^-$ en fonction de T (numériquement ou expérimentalement sur des systèmes décrits par le modèle d'Ising 2D). On obtient alors la courbe bleue de Fig. 2 ayant une cassure au niveau de la température T_c . Un système décrit par ce modèle, placé dans un milieu sans champ magnétique, est aimanté pour $T < T_c$ mais perd son aimantation pour $T > T_c$. Si l'on introduit l'énergie libre

$$F(T, \mathcal{B}, N_s) = -\frac{1}{N_s} \ln(\mathcal{Z}(T, \mathcal{B}, N_s)), \quad (9)$$

alors la cassure est liée à la présence d'une singularité de

$$f(T, \mathcal{B}) = \lim_{N_s \rightarrow \infty} \frac{F(\mathcal{B}, N_s)}{N_s} \quad (10)$$

en $T = T_c$. Cette évolution caractéristique de m marque la présence d'une transition de phase. Pour bien comprendre ce dont il s'agit définissons ce qu'est, de manière générale, une transition de phase et comment les étudier.

1.2 Transitions de phase

1.2.1 Définition et classification

En thermodynamique on note F l'énergie libre d'un système. C'est une fonction caractéristique du système qui dépend de son volume et de différents paramètres comme la température T extérieure, le champ magnétique extérieur, etc. On appelle alors phase une région de l'espace des

paramètres où $f : (T, \dots) \rightarrow \lim_{V \rightarrow \infty} F(V, T, \dots)/V$ est analytique (en supposant que cette limite, appelée limite thermodynamique, existe). En faisant varier les paramètres de f il est possible de passer d'une zone d'analyticité à une autre en passant alors par des points singuliers de f : le système subit une transition de phase. Les paramètres pour lesquels f est singulière sont appelés les paramètres critiques. On ne s'intéressera ici qu'à l'influence de la température avec tous les autres paramètres fixés. On notera alors T_c la température critique. Dans les faits un changement de phase est dû à une réorganisation, au niveau microscopique, des constituants du système (molécules, atomes, spins ...), ayant un effet macroscopique. Landau a classé ces transitions suivant deux types : celles du premier ordre et celles du second [21]. La distinction se fonde sur la continuité d'une fonction que l'on appelle le paramètre d'ordre, au moment de la transition.

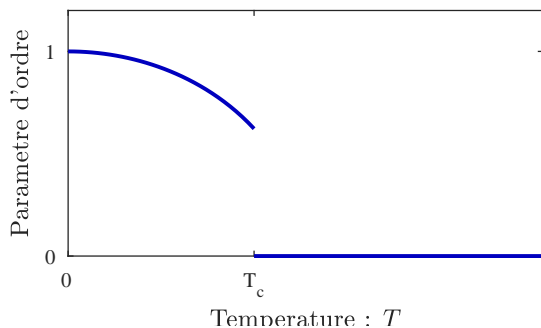


FIGURE 3 – Exemple d'évolution du paramètre d'ordre pour une transition de phase du premier ordre

Dans l'exemple du modèle d'Ising 2D, avec un champ magnétique extérieur uniforme $\mathbf{b} = b\hat{\mathbf{e}}_z$, nous avons vu que F dépend de V (puisque le volume du système est donné par $V = a^2 N_s$), de T et de b . Il existe T_c tel que $(T, b) \rightarrow f(T, b)$ soit singulière en $T = T_c$. La température permet de réorganiser la structure microscopique du modèle en modifiant la "quantité de désordre" des spins. A champ magnétique extérieur nul $b = 0^+$ ou $b = 0^-$ et à faible T , i.e. $T < T_c$, ils ont tendance à rester alignés et ordonnés dans une direction privilégiée. En revanche pour T grand, i.e. $T > T_c$ les spins ont un comportement désordonné. L'aimantation correspond au paramètre d'ordre de la transition. C'est une fonction continue avec la température comme nous l'avons vu : il s'agit donc d'une transition du second ordre. Une transition du premier ordre aurait eu un paramètre d'ordre évoluant comme la courbe de Fig. 3, le passage de l'eau de l'état liquide à l'état gazeux par augmentation de la température à pression extérieure constante est un exemple d'une telle transition.

1.2.2 Transitions du second ordre : définition des exposants critiques

Il se produit, lors des transitions du second ordre, des phénomènes particuliers, qui sont au centre de l'étude que nous avons réalisé. Pour les expliquer introduisons, pour tout système, une fonction de corrélation $G^{(2)}(r)$

qui décrit quantitativement l'influence que deux degrés de liberté séparés d'une distance r ont l'un sur l'autre dans le système que l'on étudie. Notons que plus r sera grand moins cette influence sera forte et donc plus $G^{(2)}(r)$ sera faible. A cette fonction, qu'il est possible de déterminer expérimentalement [1], on associe une longueur ξ , dite de corrélation, qui définit approximativement la distance à partir de laquelle deux degrés de libertés du système n'ont plus d'influence l'un sur l'autre.

Dans le cas du modèle d'Ising cette fonction représente l'influence que deux spins $S_{\mathbf{r}_1}$ et $S_{\mathbf{r}_2}$ ont l'un sur l'autre à T et $\mathcal{B} = \{b_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}$ fixés. Elle est plus exactement définie par

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \equiv \langle S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2} \rangle \equiv \sum_{\mathcal{M}} p(\mathcal{M}, T, \mathcal{B}) S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2} \quad (11)$$

et elle se calcule aussi directement en utilisant la fonction de partition avec l'expression

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) = \frac{1}{\mathcal{Z}(T, \mathcal{B})} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}(T, \mathcal{B})}{\partial b_{\mathbf{r}_1} \partial b_{\mathbf{r}_2}}. \quad (12)$$

On observe expérimentalement que de manière générale pour toute transition de phase du second ordre les grandeurs ξ et $G^{(2)}$ évoluent selon les lois

$$\xi \underset{T \rightarrow T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu} \quad (13)$$

et, pour $T = T_c$,

$$G^{(2)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta}, \quad (14)$$

où d est la dimension physique du système ($d = 2$ pour Ising 2D) et ν et η sont deux réels positifs appelés les *exposants critiques*. Il apparaît que deux systèmes différents, définis dans une même dimension d , mais qui possèdent des propriétés de symétries communes, ont les mêmes exposants critiques. Dans le modèle d'Ising 2D, nous avons déjà mentionné que l'échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$ ne change pas l'hamiltonien du système, on dit alors qu'il possède une symétrie \mathbb{Z}_2 . Pour tout système à $d = 2$ ayant la même propriété et défini sur le même réseau nous obtiendrons donc un η et un ν identiques. Nous détaillons plus tard, en Sec. 1.5, ce qu'est la symétrie $O(N)$ à laquelle nous sommes intéressés.

1.2.3 Objectif général : importance de la fonction de partition

Dans les grandes lignes, le but de notre étude est de calculer les exposants critiques ν et η ainsi que la température critique T_c pour différents systèmes possédant la symétrie $O(N)$, et une transition de phase du second ordre. Or, sur tous les systèmes qui nous intéressent il est possible de définir une fonction de partition \mathcal{Z} qui possède un rôle fondamental dans l'étude des transitions de phase. En effet, elle contient toute les informations que l'on souhaiterait obtenir sur le système que l'on étudie. Dans le modèle d'Ising 2D nous avons montré par exemple qu'elle permet de calculer directement l'aimantation m et

la fonction de corrélation à deux points $G^{(2)}$ du système. Or c'est la connaissance de $G^{(2)}$ qui définit les exposants critiques η et ν .

Il s'avère cependant qu'il n'est pas toujours possible de calculer la fonction de partition d'un système de manière exacte. Dans la grande majorité des cas cela est même impossible. On utilise alors des méthodes de calculs approchées. Le modèle d'Ising 2D est un exemple de cas particulier où la fonction de partition peut être calculée exactement, ceci a été fait par Onsager [18].

Pour étudier les systèmes qui nous ont intéressé dans cette étude nous avons utilisé une méthode de calcul numérique approchée des fonctions de partition en utilisant les outils du groupe de renormalisation. Nous détaillons ces méthodes en Sec. B.1.2. Cela nécessite cependant d'étudier des systèmes qui ne sont pas décrit par des micro-états, ensembles de valeurs discrètes (i.e. $\{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}$ comme nous l'avons vu pour le modèle d'Ising 2D), mais par des champs. Nous introduisons donc les concepts fondamentaux de mécanique statistique des champs.

1.3 Formalisme de mécanique statistique des champs

Nous introduisons dans cette section le formalisme de la physique statistique [7] des champs sans entrer dans le détail. Ceci est nécessaire pour pouvoir aborder de manière générale l'étude des transitions de phase et des exposants critiques à l'aide de l'outil du groupe de renormalisation (RG).

Considérons un système à P corps (atomes, molécules, spins ...) dans un ouvert à d dimensions Ω de volume $|\Omega|$. On suppose que chacun de ces P corps possède N degrés de liberté. Dans le modèle d'Ising 2D, $d = 2$, $P = N_s$, $\Omega =]0, aL]^2$ où a est le pas du réseau et $N = 1$. En effet on ne dispose que d'un degré de liberté par spin dans le sens où une seule variable scalaire $S_{\mathbf{r}}$ pour le spin à la position \mathbf{r} suffit pour décrire le système. Un modèle équivalent avec $N = 2$ serait un modèle avec des spins à deux composantes sur chaque noeud nécessitant d'être représentés par deux variables scalaires.

On introduit maintenant une fonction φ définie par

$$\varphi \in (C^0(\Omega))^N : \mathbf{r} \in \Omega \rightarrow \varphi(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}^N, \quad (15)$$

normalisée, on suppose que φ décrit, au même titre que l'ensemble $\mathcal{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}$ dans le modèle d'Ising, un micro-état du système. On l'appelle alors le *champ* du système. L'hamiltonien devient donc de façon équivalente une fonctionnelle de φ et on le note $H[\varphi]$; il représente l'énergie du système décrit par le champ φ . On peut aussi considérer qu'un champ magnétique externe défini par $\mathbf{b} : \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{b}(\mathbf{r}) \in \mathbb{R}^N$ agisse sur le système. Dans ce cas

on introduit l'hamiltonien \mathcal{H} dépendant de \mathbf{b} par

$$\mathcal{H}[\varphi, \mathbf{b}] \equiv H[\varphi] - \int_{\Omega} \mathbf{b}(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (16)$$

Avec le formalisme canonique de la physique statistique [8] nous savons que nous pouvons connaître toutes l'information sur les propriétés macroscopiques du système soumis à une température T et champ magnétique \mathbf{b} en étudiant sa fonction de partition \mathcal{Z} définie par l'expression

$$\mathcal{Z}[T; \mathbf{b}] \equiv \int \mathcal{D}\varphi \exp\left(-\frac{\mathcal{H}[\varphi, \mathbf{b}]}{k_B T}\right). \quad (17)$$

Cette intégrale avec une notation $\mathcal{D}\varphi$ est une intégrale dite fonctionnelle sur l'ensemble des champs φ pouvant décrire le système. Il s'agit d'une somme "continue" équivalente à la somme sur tous les \mathcal{M} micro-états possibles. Elle ne peut être calculée de façon exacte que pour quelques hamiltoniens très particuliers. Comme nous l'avons déjà mentionné un calcul approché peut en être fait par le groupe de renormalisation.

1.4 Intérêt de l'approche par la théorie statistique des champs. Intérêt du RG et du NPRG

Le formalisme de théorie des champs consiste à travailler avec des fonctions continues et non plus des micro-états définis par des ensembles de variables discrètes. Il ne permet donc pas de décrire le modèle d'Ising 2D, a priori. En revanche il est utile car il permet de réaliser des calculs plus facilement. De plus si un système dont l'état est défini par des champs possède les mêmes symétries qu'un autre système quelconque (pas forcément décrit par des champs), alors ils auront les mêmes exposants critiques. Leur calcul en théorie des champs par le RG (à travers le calcul de la fonction de partition) s'appliquera à tous les systèmes possédant la même symétrie. Introduisons donc maintenant ce que sont le RG, le NPRG ainsi que ce qu'il permettent.

Comme nous venons de le mentionner le groupe de renormalisation (RG) permet de calculer avec des approximations contrôlées les fonctions de partition \mathcal{Z} définies dans le formalisme de physique statistique des champs. Cette méthode a permis de calculer déjà différents exposants critiques pour différents systèmes. Les calculs ont donné d'excellents résultats [11, 26] par rapports à ce qui avait pu être obtenu par expérience ou par d'autres méthodes comme les simulations Monte-Carlo. De plus c'est une méthode qui permet d'expliquer pourquoi les exposants critiques restent identiques au sein d'une même classe d'universalité. Cependant elle reste limitée dans ces applications car elle se fonde sur des approximations de "théorie des perturbations" qui ne permettent de ne calculer, par exemple, que les exposants universels critiques mais pas les grandeurs qui ne sont pas universelles. En effet, la température critique T_c est une grandeur qui n'est

pas universelle, deux systèmes différents avec les mêmes propriétés de symétrie ont deux températures critiques différentes. Les approximations faites par le RG ne sont pas assez précises pour calculer T_c .

Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG) est une extension du RG qui peut répondre à ce problème en reprenant le même principe sous une approche différente. Elle ne cherche pas à calculer véritablement Z mais des fonctions annexes qui en dépendent. Ces fonctions contiennent aussi les informations nécessaires de nos systèmes pour l'étude des transitions de phase. On les détermine alors grâce à des équations que l'on peut résoudre en utilisant l'approximation dite *BMW* (Blaizot - Méndez-Galain - Wschebor) [3]. Cette approche permet plus de précision et de flexibilité que les approximations de "théorie des perturbations" et permet, a priori, de calculer des grandeurs comme T_c . Nous en avons étudié l'efficacité dans notre étude. Nous aborderons plus en détails les principes du RG, du NPRG et de l'approximation BMW en Sec. B. Après avoir introduit brièvement la symétrie $O(N)$ nous nous intéressons aux objectifs précis de notre étude.

1.5 Les systèmes à symétrie $O(N)$

Nous avons mentionné que le but est d'étudier les exposants critiques des systèmes possédant une symétrie $O(N)$. Nous pouvons définir ceci plus simplement maintenant que nous avons introduit le formalisme de physique statistique des champs.

On dit qu'un système est symétrique selon $O(N)$ pour $N \geq 2$ si son hamiltonien est invariant par l'action du groupe de rotation $O(N)$ sur ces degrés de liberté. Dans le cas où $N = 1$ on fera référence à la symétrie \mathbb{Z}_2 qui est équivalente. Par exemple, dans le formalisme de la théorie des champs, soit $J \in O(N)$, et on note $J.V$ l'action de J sur un vecteur V de \mathbb{R}^N . Le modèle est dit invariant sous $O(N)$ si

$$H[J.\varphi] = H[\varphi] \quad (18)$$

et il est dit \mathbb{Z}_2 si $H[-\varphi] = H[\varphi]$. Le modèle d'Ising 2D est un exemple aussi de modèle \mathbb{Z}_2 puisque $H(\{-S_r\}_r) = H(\{S_r\}_r)$.

1.6 Objectifs de l'étude

En résumé nous nous intéressons au phénomène des transitions de phase du second ordre pour des systèmes possédant une symétrie $O(N)$. Plus particulièrement une transition de phase correspond à un changement d'état d'un système se produisant lorsqu'il est soumis à une température, dite critique, T_c . Pour ces transitions nous pouvons définir des quantités dites universelles, i.e. communes à tous systèmes possédant les même symétrie et la même dimension : les exposants critiques. Ce sont à la fois T_c et ces exposants critiques qui nous ont intéressés. Une méthode pour les déterminer, sur des systèmes décrit

avec des champs, est d'étudier les fonctions de partitions à l'aide du formalisme du RG et plus précisément du NPRG associé aux équation BMW.

L'objectif principal de notre étude était d'appliquer l'approximation BMW à des systèmes dont exposants critiques et température critique sont connus grâce à d'autres méthodes exactes ou numériques, afin de valider la qualité de cette approximation et de la résolution numérique associée.

Dans un premier temps, en Sec. 3, Sec. 4, et Sec. 5, nous avons repris une simulation numérique d'équations intégrées-différentielles non linéaires obtenues par l'approximation BMW pour des systèmes régis par la symétrie $O(N)$ à l'aide du système modèle générique de la "théorie φ^4 " [12]. Le but de cette simulation est de déterminer uniquement des exposants critiques. Elle a déjà permis d'en déterminer plusieurs avec une grande précision, mettant bien en avant la qualité de l'approximation BMW. Cependant elle peut présenter des comportements étranges et des résolutions instables que nous avons tenté d'éliminer.

Dans un second temps, en Sec. 6, Sec. 7 et Sec. 8, nous avons repris le modèle d'Ising 2D et nous avons essayé de déterminer sa température critique T_c toujours à l'aide de l'approximation BMW. Nous savons que ce modèle ne s'exprime pas, a priori, avec des champs. Nous avons donc dû le ré-exprimer différemment à l'aide d'une méthode connue pour permettre de l'étudier tout de même en théorie des champs et avec le NPRG. Nous montrons ceci en Sec. 6. On rappelle que la fonction de partition de ce système peut être calculée exactement (grâce aux travaux d'Onsager [18] et donc toutes les grandeurs thermodynamiques liées à la transition de phase peuvent être calculées de manière exacte, en particulier la température critique T_c . Nous avons alors pu comparer la T_c théorique à celle donnée par la résolution numérique que nous avons entièrement écrite et détaillée (Sec. 7). Le but est ici de montrer que le NPRG est bien capable de calculer des grandeurs non universelles comme T_c , ce qui est théoriquement possible comme nous l'avons vu, mais très difficile dans la pratique pour des modèles réalistes.

Avant d'entrer dans les détails de ces deux études distinctes nous introduisons les concepts de RG et NPRG dans la prochaine section (Sec. B) afin de bien comprendre les résolutions détaillées par la suite et utilisant ces méthodes.

2 Les formalismes du RG et NPRG

Nous détaillons dans les grandes lignes ci-après les mécanismes du RG et du NPRG pour parvenir à calculer la fonction de partition de systèmes décrits avec des champs. Nous introduisons aussi l'approximation BMW avec laquelle nous avons travaillé.

Pour conserver des expressions mathématiques simples nous introduirons généralement le terme $k_B T$ des équations dans le hamiltonien et dans l'action. C'est à dire qu'au lieu d'écrire $\mathcal{H}/(k_B T)$ nous écrirons simplement \mathcal{H} dans la fonction de partition, par exemple.

2.1 Le groupe de renormalisation (RG)

2.1.1 Transformée de Fourier

Il nous faut commencer par définir la transformée de Fourier du champ φ appartenant à $L^2(\Omega)$, en prolongeant φ par des conditions aux limites périodiques en dehors de Ω . On pose

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_{\mathbf{p}} &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \\ \varphi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{\varphi}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}\quad (19)$$

On appelle \mathbf{p} la variable de moment. On fait l'hypothèse qu'il existe un réel Λ tel que pour $\|\mathbf{p}\|_{\infty} > \Lambda$, $\hat{\varphi}(\mathbf{p}) \simeq 0$. On considère donc $\mathbf{p} \in [0, \Lambda]^d$. Ceci signifie que φ est une fonction suffisamment régulière et cette valeur Λ correspond physiquement à l'inverse de la plus petite longueur caractéristique du système (comme le pas du réseau par exemple). En pratique on suppose que dans la limite thermodynamique (i.e. $|\Omega| \rightarrow \infty$) on étudie des systèmes macroscopiques tels que $|\Omega| \gg 1/\Lambda^d$. Ainsi nous avons les équivalences

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\Omega|} \sum_{\mathbf{p}} &\rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \dots d\mathbf{p} \equiv \int_{\mathbf{p}} \dots \\ \int_{\Omega} \dots d\mathbf{r} &\rightarrow \int_{\mathbb{R}} \dots d\mathbf{r} \equiv \int_{\mathbf{r}} \dots\end{aligned}\quad (20)$$

Pour φ fixé la suite $\hat{\varphi}_{\mathbf{p}}$ dans ℓ^2 devient une fonction $\hat{\varphi} : \mathbf{p} \rightarrow \hat{\varphi}(\mathbf{p})$ de $L^2(\mathbb{R})$. Dès lors qu'il n'y aura pas d'ambiguïté possible, nous oublierons à partir de maintenant la notation avec le chapeau en notant que c'est la variable utilisée \mathbf{r} ou \mathbf{p} (ou aussi parfois \mathbf{q} pour les moments) qui nous permet de savoir si l'on travaille avec la fonction considérée ou sa transformée de Fourier.

2.1.2 Idée générale

Les principales idées du RG ont été développées par Wilson [25, 26, 10]. L'objectif est de calculer la fonction de partition à champ magnétique extérieur \mathbf{b} nul,

$$\mathcal{Z}[T] = \int \mathcal{D}\varphi \exp(-H[\varphi]). \quad (21)$$

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

$$\varphi_{k,>}(\mathbf{p}) = \begin{cases} \varphi(\mathbf{p}) & \text{si } \mathbf{p} \in [k, \Lambda]^d \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (22)$$

Ceci permet de définir un hamiltonien effectif, H_k , par

$$\exp(H_k[\varphi_{k,<}]) \equiv \int \mathcal{D}\varphi_{k,<} \exp\{H[\varphi_{k,>} + \varphi_{k,<}]\}, \quad (23)$$

et de réécrire la fonction de partition comme

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi_{k,<} \exp\{-H_k[\varphi_{k,<}]\}. \quad (24)$$

Bien entendu, il n'est pas directement possible de calculer H_k pour k quelconque, sinon le problème serait résolu en calculant $H_{k=0}$. On considère alors plutôt une intégration infinitésimale entre $[\Lambda - d\Lambda, \Lambda]$ pour obtenir le nouvel hamiltonien H_{k_1} , où $k_1 = \Lambda - d\Lambda$. On introduit aussi $s_1 = \Lambda/k_1$. Ce calcul là, contrairement au calcul direct pour k quelconque, peut être réalisé grâce à des approximations.

Pour réaliser l'intégration complète sur $[0, \Lambda]$ on peut donc ensuite itérer ce processus de transformations infinitésimales en reproduisant la même transformation en reportant de l'expression de \mathcal{Z} en fonction de $H_{k_1}[\varphi_{k_1,<}, \{g_{k_1,i}\}_i]$ pour $k_2 = \Lambda - 2d\Lambda$ et ainsi de suite. Quand on a itéré suffisamment et que k_p est suffisamment proche de 0, nous avons calculé \mathcal{Z} . Cependant ceci nécessite des approximations à chaque itérations qui limitent les capacités du RG.

2.2 Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

2.2.1 Intégration continue : le régulateur

Comme dans le RG dans le NPRG développé par Wetterich [24] nous réalisons une intégration successive des degrés de liberté. L'idée reste la même que dans le RG en intégrant les grands moments en premier lieu.

La première chose que l'on peut remarquer c'est que l'on peut réaliser une intégration continue des degrés de liberté et non pas plus par itérations successives. Pour cela on introduit un tenseur de fonctions $\mathcal{R} \in \mathcal{D}'([0, \Lambda]^{d+1})^{N \times N} : (k, \mathbf{q}) \rightarrow \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{q})$ puis une nouvelle fonction de partition modifiée,

$$\mathcal{Z}_k[T; \mathbf{b}] = \int \mathcal{D}\varphi \exp\left\{-H[\varphi] - \Delta H_k[\varphi] + \int_{\mathbf{r}} \mathbf{b}\varphi\right\}, \quad (25)$$

avec la définition

$$\begin{aligned}\Delta H_k[\varphi] &\equiv \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \varphi_i(\mathbf{r}) \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}') \\ \Delta H_k[\varphi] &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi_i(-\mathbf{q}) \mathcal{R}_{k,ij}(\mathbf{q}) \varphi_j(\mathbf{q}).\end{aligned}\quad (26)$$

On appelle ce tenseur le régulateur. c'est grâce à son évolution en fonction de k que l'on intègre au fur et à mesure les degrés de liberté. Dans l'esprit du RG on souhaite que pour k fixé sa présence coupe l'intégrale fonctionnelle et la limite plus ou moins à une zone de moments dans $[k, \Lambda]^d$. On souhaite donc retrouver

$$\lim_{k \rightarrow 0} \mathcal{Z}_k = \mathcal{Z} \quad (27)$$

et que, pour $k = \Lambda$, l'expression de \mathcal{Z}_Λ puisse être calculée analytiquement. De cette manière, en faisant évoluer k de Λ à 0 on peut suivre l'évolution de \mathcal{Z}_k d'une valeur connue à la valeur \mathcal{Z} par le biais d'une équation différentielle.

Pour que cela fonctionne le régulateur doit satisfaire de nombreuses contraintes. Dans le modèle $O(N)$ il suffit de prendre $\mathcal{R}_{k,ij} = \mathcal{R}_k$ comme une simple fonction et pas un tenseur. En considérant que $\mathcal{R}_k(\mathbf{q}) = \mathcal{R}_k(q)$ avec $q = \|\mathbf{q}\|_2$ la norme 2 dans \mathbb{R}^d (ce qui correspond à ce que nous utiliserons), les régulateurs respectant toutes ces contraintes ont l'allure de la courbe de Fig. 4 (a).

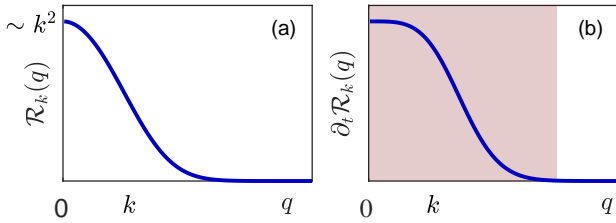


FIGURE 4 – (a) Allure du régulateur, choisi pour une valeur de k donnée, ayant une décroissance exponentielle entre $\simeq k^2$ et 0. Ainsi ici nous avons approximativement intégrés les degrés de liberté correspondant à une impulsion dans $\simeq [k, \Lambda]$ uniquement. (b) Allure de la dérivée temporelle du régulateur choisi pour une valeur de k donnée avec une décroissance exponentielle (ligne continue bleue).

Introduisons maintenant ce qui fait la différence principale entre le RG et le NPRG : un calcul par le potentiel de Gibbs.

2.2.2 Potentiels

Ce n'est pas vraiment \mathcal{Z}_k que nous utilisons directement dans le calcul du NPRG mais une grandeur qui s'exprime en fonction de \mathcal{Z}_k : le *potentiel de Gibbs*. On le note Γ_k . Réciproquement, pour tout k , \mathcal{Z}_k peut se calculer en connaissant Γ_k . On peut notamment obtenir $\mathcal{Z}_{k \rightarrow 0} = \mathcal{Z}$. Définissons donc cette fonction. On se place à k fixé. On commence par introduire ce que l'on appelle l'énergie libre (en omettant, dans la notation, la dépendance en température),

$$W_k[\mathbf{b}] \equiv \ln(\mathcal{Z}_k[\mathbf{b}]). \quad (28)$$

On peut alors introduire le potentiel de Gibbs à l'aide d'une "pseudo-transformée" de Legendre de W_k par

$$\Gamma_k[\phi] = -W_k[\mathbf{h}] + \int_{\mathbf{r}} \mathbf{b} \phi - \Delta H_k[\phi], \quad (29)$$

avec ϕ , la moyenne du champ, défini comme

$$\phi[\mathbf{p}, \mathbf{b}] \equiv \langle \varphi(\mathbf{p}) \rangle \equiv \frac{1}{\mathcal{Z}[\mathbf{b}]} \int \mathcal{D}\varphi \exp(-\mathcal{S}[\varphi, \mathbf{b}]) \varphi. \quad (30)$$

Dans le langage du modèle d'Ising 2D, ϕ correspond à l'aimantation m . La seule chose différenciant ce calcul d'une vraie transformée de Legendre est l'ajout du terme $-\Delta H_k$. Cet ajout à une utilité technique qui permet d'avoir une expression simple de \mathcal{Z}_Λ (ou de manière équivalente Γ_Λ). On donne aussi une notation pour les dérivées fonctionnelles de Γ_k en transformée de Fourier avec

$$\Gamma_{k, \{i_j\}}^{(n)}[\{\mathbf{p}_j\}; \phi] = \frac{\delta^n \Gamma_k[\phi]}{\delta \phi_{i_1}(-\mathbf{p}_1) \dots \delta \phi_{i_n}(-\mathbf{p}_n)}, \quad (31)$$

et on note plus spécifiquement l'opérateur

$$\Gamma_{k, ij}^{(2)}[\mathbf{p}; \phi] \equiv \Gamma_{k, ij}^{(2)}[\mathbf{p}, -\mathbf{p}; \phi] = \frac{\delta^2 \Gamma_k[\phi]}{\delta \phi_i(-\mathbf{p}) \delta \phi_j(\mathbf{p})}. \quad (32)$$

En utilisant \mathcal{Z}_k et W_k nous pouvons définir aussi des fonctions de corrélations comme nous l'avons fait pour le modèle d'Ising 2D et qui était à la base de la définition des coefficients η et ν . Il est possible de se reporter à Ann. ?? pour plus de détails, nous considérons simplement ici qu'il est possible de définir un opérateur G_k que l'on nomme le propagateur et qui est égal à un opérateur de corrélations à deux points, telle qu'au sens de l'inverse d'opérateur (c.f Ann. ??)

$$G_k[\mathbf{p}; \phi] = \left(\Gamma_k^{(2)}[\mathbf{p}, \phi] + \mathcal{R}_k(\mathbf{p}) \right)^{-1} \quad (33)$$

On peut donc, à partir de ces définitions, obtenir une équation différentielle sur Γ_k pour lequel on connaît une condition initiale. Avec cette équation il sera possible de calculer $\Gamma = \lim_{k \rightarrow 0} \Gamma_k$ et donc connaissant Γ nous avons accès à \mathcal{Z} .

2.2.3 Équation fondamentale : équation de flot

On peut alors utiliser les définitions que l'on vient de poser pour présenter l'équation fondamentale du NPRG que l'on appelle l'équation de flot exacte de Γ_k . Il s'agit d'une équation valable pour $k \in]0, \Lambda]$ décrivant l'évolution de Γ_k avec k lorsqu'on le fait évoluer de Λ à 0. On définit une nouvelle variable t appelée temps du RG.

$$t = \ln(k/\Lambda), \quad \text{donnant} \quad \partial_t \dots = k \partial_k \dots \quad (34)$$

Quand k varie de Λ vers 0, t varie de 0 vers $-\infty$, c'est donc un "temps" négatif. On montre alors [6],

$$\partial_t \Gamma_k[\phi] = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) G_{k, ii}[\mathbf{q}; \phi], \quad (35)$$

et la condition initiale en $k = \Lambda$ est très simple et s'écrit

$$\Gamma_\Lambda[\phi] = H[\phi]. \quad (36)$$

Nous avons une équation différentielle avec une condition initiale connue permettant d'accéder à $\Gamma_{k \rightarrow 0} = \Gamma$.

Notons que l'intégrale dans cette équation de flot est en fait tronquée par la fonction $\mathbf{q} \rightarrow \partial_t \mathcal{R}_k(q)$ qui, par les propriétés imposées de \mathcal{R}_k , est une fonction décroissante fortement vers 0 pour tout k quand $\|\mathbf{q}\|_\infty \rightarrow \infty$ (c.f. Fig. 4). Cette fonction peut même être considéré "quasi-nulle" pour $\|\mathbf{q}\|_\infty$ supérieur à une certaine valeur (qui dépend de k). L'intervalle utile d'intégration est donc, dans les faits, limité à une zone qui dépend de k et qui n'est donc jamais un domaine infini : ceci est un grand avantage pour le traitement numérique que nous allons détaillé.

Un problème subsiste tout de même : pour pouvoir réaliser un calcul numérique il faut, dans cette équation, faire un calcul à ϕ uniforme. On introduit la fonction Γ_k en ϕ uniforme par

$$\Gamma_k(\mathbf{p}, \phi) = \Gamma_k[\mathbf{p}, \phi]|_{\phi \text{ unif.}}, \quad (37)$$

avec à gauche ϕ qui est une fonction et à droite une variable dans \mathbb{R}^N . Or si l'on veut connaître $\partial_t \Gamma_k(\mathbf{p}, \phi)$ il nous faudrait connaître la dérivée seconde $\Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi)$. Il s'avère que $\Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi)$ peut se calculer avec $\Gamma_k[\mathbf{p}, \phi]$ mais pas $\Gamma_k(\mathbf{p}, \phi)$. La seule façon de connaître $\Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi)$ serait, de façon similaire, de résoudre l'équation de flot exacte de $\Gamma_k^{(2)}$ que l'on peut déduire de celle de Γ_k . Mais le problème se répète car cette nouvelle équation fait intervenir $\Gamma_k^{(3)}$ et $\Gamma_k^{(4)}$, que nous ne connaissons pas non plus. On dit alors que l'équation est ouverte et n'est pas soluble telle quelle. L'approximation BMW permet de résoudre ce problème.

2.3 Approximation BMW pour \mathbb{Z}_2

Pour rester concis, nous nous intéressons dans cette section au cas particulier de la symétrie \mathbb{Z}_2 (correspondant à $O(N)$ pour $N = 1$), i.e. lorsque H satisfait $H[-\phi] = H[\phi]$. Le cas général des équations pour N quelconque se trouve dans [2]. Nous présentons l'équation dite de "flot BMW" issu de l'approximation BMW appliquée à l'équation de flot du NPRG. La méthode pour trouver ces équations, assez technique, n'est pas expliquée ici mais on la trouvera dans [3].

Dans le cas $N = 1$ l'équation de flot BMW est une équation soluble numériquement de

$$\Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \equiv \Gamma_k^{(2)}[\mathbf{p}, \phi]|_{\phi \text{ unif.}} \quad (38)$$

La connaissance de $\Gamma^{(2)}$ et équivalente à la connaissance de Γ pour ce que nous recherchons, donc on se concentre

$\Gamma_k^{(2)}$. On montre alors,

$$\begin{aligned} \partial_t \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = & J_3(\mathbf{p}, \phi) \left(\partial_\phi \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right)^2 \\ & - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi), \end{aligned} \quad (39)$$

où l'on a introduit par concision,

$$J_n(\mathbf{p}, \phi) = \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) G_k(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \phi) G_k^{n-1}(\mathbf{q}, \phi) \quad (40)$$

$$I_n(\mathbf{p}, \phi) = \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) G_k^n(\mathbf{q}, \phi). \quad (41)$$

Dans Eq. (39) il n'apparaît alors que $\Gamma_k^{(2)}$ (et pas de dérivées supérieures de Γ_k), le problème de l'équation de flot exacte insoluble est résolu. La condition initiale découle, quant à elle, de Eq. (36),

$$\Gamma_\Lambda^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = \frac{\delta H[\phi]}{\delta \phi(\mathbf{p}) \phi(\mathbf{p})} \quad (42)$$

Nous n'avons cependant pas de conditions aux bord pour l'équation de flot BMW. Ceci ne pose pas de problème et pourra tout de même être traité numériquement. On fait l'hypothèse physique qu'il existe une solution et une seule à ces équations. En déterminer une non nulle suffit alors pour déterminer exposants critiques et température critique des systèmes.

2.4 Notion de point fixe

Le but est toujours de trouver la valeur des exposants critiques des systèmes que l'on étudie. Cela se fait en faisant varier les conditions initiales de l'équation de flot BMW jusqu'à trouver une solution de [?]. Plus précisément, on réécrit l'équation de flot BMW de sorte que toutes les variables aient n'aient plus de dimension de longueur. On appelle cela l'*adimensionnement* et l'équation qui en résulte est l'équation de flot *adimensionnée*. On note par exemple $\tilde{\Gamma}_k$ la fonction dite adimensionnée de Γ_k , qui est sans dimension de longueur et solution de l'équation adimensionnée.

Trouver une solution de point fixe se traduit par trouver une solution de l'équation de flot adimensionnée $\tilde{\Gamma}_k^{*(2)}$ telle que

$$\lim_{k \rightarrow 0} \partial_t \tilde{\Gamma}_k^{*(2)} = 0, \quad (43)$$

On montre qu'une telle solution ne peut se trouver que lorsque la température à laquelle est soumise le système (qui est exprimée de façon implicite dans la condition initiale de l'équation de flot) est égale à la température critique.

2.5 Résumé de la méthode

En résumé, l'approximation BMW nous permet d'obtenir une équation différentielle sur la grandeur $\Gamma_k^{(2)}$ dont on connaît une condition initiale et que l'on peut résoudre numériquement. Cette équation est appelée l'équation de flot BMW. On peut alors déterminer $\Gamma^{(2)} = \Gamma_{k \rightarrow 0}^{(2)}$.

Afin de calculer les exposants critiques η et ν (nous n'expliquerons pas comment ν est déterminé) il est nécessaire d'adimensionner cette équation en utilisant. Ceci permet, en effet, de chercher une *solution de point fixe* $\tilde{\Gamma}_k^{*(2)}$, que l'on sait caractériser par son comportement $\partial_t \tilde{\Gamma}_k^{*(2)} = 0$ quand $k \rightarrow 0$. Cette solution de point fixe est la solution particulière de l'équation de flot BMW pour des conditions initiales correspondant à un système à la température critique. On peut alors définir la dimension anormale correspondante η_k^* et η est obtenu en prenant $\eta = \lim_{k \rightarrow 0} \eta_k^*$. Détaillons dans la section suivante cette procédure en pratique dans le cas de la résolution de ces équations pour ce que l'on nomme le modèle continu.

3 Le modèle continu $O(N)$

Abordons maintenant la première étude que nous avons réalisé, portant sur la recherche des exposants critiques des systèmes possédant une symétrie $O(N)$.

3.1 Hamiltonien de la théorie φ^4

Il a été montré [1] que lorsque l'on cherche à déterminer les exposants critiques, et que l'on s'intéresse uniquement à ce qu'il peut se passer au voisinage de la température critique alors il suffit d'étudier les premiers ordres du hamiltonien du système isolé autour de $\varphi \sim 0$, qui, pour respecter les symétries, dans le modèle $O(N)$ a nécessairement la forme

$$H[r_0, u_0; \varphi] = \int_{\mathbf{r}} \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} r_0 \varphi^2 + \frac{u_0}{4!} (\varphi^2)^2 \right\} \quad (44)$$

Avec u_0 et r_0 deux réels. Comprenons que cet hamiltonien n'est pas le vrai hamiltonien de tous les systèmes régit pas une symétrie $O(N)$ mais il suffit à en déduire les grandeurs universelles aux transition de phase. En effet il s'agit d'un modèle simplifié (un système "jouet") avec les même symétries que les systèmes qui nous intéresse. Or rappelons que les grandeurs universelles comme les exposants critiques sont justement dites universelles car elles sont identiques pour deux systèmes ayant les mêmes propriétés de symétrie.

Par une "renormalisation du champ", la température à laquelle est soumise ce système "jouet" se trouve définie¹ dans le paramètre r_0 . D'après le principe du RG et du NPRG, pour trouver les coefficients η et ν il nous faut trouver un point fixe de ce modèle. Or, il n'existe un point fixe qu'à la température critique. Pour la trouver nous devons faire varier r_0 apparaissant dans la condition initiale de la forme $\Gamma_{\Lambda}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = \partial_{\phi}^2 H(\phi)$. On résout donc les équations BMW de ce modèle en testant, à l'aide d'une dichotomie, différentes valeurs de r_0 pour se rapprocher du r_0^c correspondant à la température critique. Notons que comme la température critique T_c n'est pas une données universelle alors celle de ce système "jouet" n'est pas commune à tous les systèmes ayant une symétrie $O(N)$.

Introduisons maintenant les équations BMW que nous avons tenté de résoudre, pour le hamiltonien que nous venons de présenter

3.2 Equations BMW continu

On se concentre par simplicité sur le cas simple \mathbb{Z}_2 uniquement. On utilise à partir de maintenant aussi la variable² $\rho = \phi^2/2$. On applique BMW au hamiltonien H de la théorie φ^4 , que l'on appelle aussi hamiltonien

continu. Grâce à l'invariance par rotation dans \mathbb{R}^d de H en fonction de \mathbf{p} , les différentes grandeurs que la considère ne dépendent plus entièrement du moment \mathbf{p} (ou \mathbf{q} , ou $\mathbf{p} + \mathbf{q}$) mais seulement de \mathbf{p}^2 (ou \mathbf{q}^2 , ou $(\mathbf{p} + \mathbf{q})^2$ et donc de la norme $p = \|\mathbf{p}\|_2$ (ou q , ou $\|\mathbf{p} + \mathbf{q}\|_2$).

Tout d'abord, la condition initiale Eq. (42) devient ici,

$$\Gamma_{\Lambda}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = \mathbf{p}^2 + r_0 + \frac{u_0}{2} \phi^2. \quad (45)$$

On peut transformer l'équation BMW en un système d'équation plus précis en introduisant le potentiel du système, qui s'exprime simplement par,

$$V_k(\phi) = \Gamma_k(\mathbf{p}, \phi). \quad (46)$$

Il vient alors³ en dérivant

$$\Gamma_k^{(2)}(p=0, \rho) = \partial_{\rho} V_k(\rho) + 2\rho \partial_{\rho}^2 V_k(\rho) = \partial_{\phi}^2 V_k(\phi) \quad (47)$$

En particulier il est plus précis d'utiliser en complément de l'équation sur $\Gamma_k^{(2)}$ l'équation de flot BMW que l'on peut aussi écrire sur V_k . Pour cela on introduit une fonction $\Delta_k(p, \rho)$ vérifiant la relation

$$\Gamma_k^{(2)}(p, \rho) = p^2 + \Delta_k(p, \rho) + \partial_{\rho} V_k(\rho) + 2\rho \partial_{\rho}^2 V_k(\rho). \quad (48)$$

L'équation de flot BMW Eq. (39) peut alors se réécrire sous la forme du système couplé

$$\begin{aligned} \partial_t \Delta_k(p, \rho) &= 2\rho J_3(p, \rho) [u_k(\rho) + \partial_{\rho} \Delta_k(p, \rho)]^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} I_2(\rho) [\partial_{\rho} \Delta_k(p, \rho) + 2\rho \partial_{\rho}^2 \Delta_k(p, \rho)] \\ &\quad - 2\rho I_3(\rho) u_k^2(\rho) \end{aligned} \quad (49)$$

$$\partial_t V_k(\rho) = I_1(\rho) \quad (50)$$

Avec les notations

$$\begin{aligned} m_k^2(\rho) &= 2\rho \partial_{\rho}^2 V_k(\rho) + \partial_{\rho} V_k(\rho) \\ u_k(\rho) &= \partial_{\rho} m_k^2(\rho) \end{aligned} \quad (51)$$

et toujours avec $\partial_t \dots = k \partial_k \dots$. La condition initiale se déduit de Eq. (45). En effet, il vient directement par la décomposition Eq. (48),

$$\Delta_{\Lambda}(p, \rho) = 0 \quad \text{et} \quad V_{\Lambda}(\rho) = r_0 \rho + \frac{u_0}{6} \rho^2. \quad (52)$$

Maintenant que l'on a décomposé l'équation en système pour plus de précision nous allons plutôt travaillé avec la dérivée W_k du potentiel pour des raisons de stabilité numérique, on note

$$W_k(\rho) = \partial_{\rho} V_k(\rho). \quad (53)$$

Il reste alors une dernière étape avant de parvenir aux équations finales. En effet, nous n'avons pas ici réalisé l'adimensionnement fondamental du RG. Pour cela il suffit d'introduire de nouvelles grandeurs notées d'un $\tilde{\cdot}$ de la

1. Notons que l'hamiltonien ne dépend sinon pas de la température.

2. Cette variable n'est pas vraiment différente de ϕ dans le cas \mathbb{Z}_2 mais elle l'est dans le cas $O(N)$ en général ou ϕ est un vecteur.

3. Dans les notations on note de la même manière une fonction de ρ et une fonction de ϕ , on écrit par exemple $V_k(\rho = \phi^2/2) = V_k(\phi)$.

même manière qu'en Sec. B.1.2. Concrètement cela revient à introduire, en utilisant le Z_k défini en Sec. ??,

$$\begin{aligned}\tilde{\rho} &= k^{2-d} Z_k \rho \quad \text{et} \quad \tilde{p} = k^{-1} p \\ \tilde{m}_k^2(\rho) &= Z_k^{-1} k^{-2} m_k^2(\rho), \\ \tilde{u}_k(\tilde{\rho}) &= Z_k^{-2} k^{d-4} u_k(\rho) \\ \tilde{G}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho}) &= Z_k k^2 G_k(p, \rho) \\ \tilde{J}_n(\tilde{p}, \tilde{\rho}) &= Z_k^{n-1} k^{2n-d-2} J_n(p, \rho) \\ \tilde{V}_k(\tilde{\rho}) &= k^{-d} V_k(\rho)\end{aligned}\tag{54}$$

Ainsi que

$$\tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho}) = \frac{1}{Z_k} \left(1 + \frac{\Delta_k(p, \rho)}{p^2} \right) - 1.\tag{55}$$

Ce changement de variable en plus d'être nécessaire pour trouver le point fixe apporte de grands changements dans la forme des équations. En effet, on multiplie les expressions et les variables par des facteurs contenant k ou Z_k qui possèdent des dérivées non nulles lorsque l'on leur applique l'opérateur différentiel ∂_t . La nouvelle forme du problème que nous avons essayé de résoudre numériquement est :

Trouver $\tilde{Y}_k(\tilde{\rho}, \tilde{p})$ et $\tilde{W}_k(\tilde{\rho})$ tels que pour tout $k \in]0, \Lambda]$, $\tilde{\rho} \in [0, +\infty[$ et $\tilde{p} \in [0, +\infty[$,

$$\begin{aligned}\partial_t \tilde{Y}_k &= \eta_k (1 + \tilde{Y}_k) + \tilde{p} \partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_k - (2 - d - \eta_k) \tilde{\rho} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k \\ &\quad + 2\tilde{\rho} \tilde{p}^{-2} \left[\left(\tilde{p}^2 \partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_k + \tilde{u}_k \right)^2 \tilde{J}_3 - \tilde{u}_k^2 \tilde{I}_3 \right] \\ &\quad - \tilde{I}_2 \left(\partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_k / 2 + \tilde{\rho} \partial_{\tilde{\rho}}^2 \tilde{Y}_k \right)\end{aligned}\tag{56}$$

$$\partial_t \tilde{W}_k = (\eta_k - 2) \tilde{W}_k + (d - 2 + \eta_k) \tilde{\rho} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{W}_k + \frac{1}{2} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{I}_1\tag{57}$$

Avec les conditions initiales,

$$\tilde{Y}_\Lambda(\tilde{\rho}, \tilde{p}) = 0 \quad \text{et} \quad \tilde{W}_\Lambda(\tilde{\rho}) = r'_0 + u'_0 \tilde{\rho}\tag{58}$$

où r'_0 et u'_0 viennent de r_0 et u_0 (c.f. Eq. (44)). Pour résoudre ce système il manque encore l'expression de η_k pour k fixé, découlant de la définition même de Z_k en Eq. (??) (en choisissant $\phi_0 = 0$ et $\mathbf{p}_0 = 0$),

$$\eta_k = \frac{1}{2} \tilde{I}_2(\rho = 0) \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\rho = 0).\tag{59}$$

Pour chercher un point fixe on résout le système différentiel précédent pour différentes valeurs de r'_0 . On teste donc plusieurs r'_0 avec une dichotomie avec des valeurs initiales prises aléatoirement jusqu'à ce que l'on trouve une solution $(\tilde{Y}_k^*, \tilde{W}_k^*)$ telle que $\lim_{k \rightarrow 0} \partial_t \tilde{W}_k^* = 0$ et $\lim_{k \rightarrow 0} \partial_t \tilde{Y}_k^* = 0$.

3.3 Régulateur pour BMW continu

Pour satisfaire à toutes les conditions d'un régulateur on utilise une expression (c.f. Fig. 4 (a)) infiniment dérivable à décroissance exponentielle définie par (et implicitement prolongée par continuité en $q = 0$)

$$\forall q \in [0, \Lambda] \quad \mathcal{R}_k(q) = \alpha \frac{q^2}{\exp(q^2/k^2) - 1}\tag{60}$$

Avec α 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. Le caractère régulier (au sens infiniment dérivable) de ce régulateur est nécessaire pour assurer des résolutions numériques stables dans des équations BMW. Remarquons que l'on satisfait bien aux conditions aux limites imposées sur le régulateur car

$$\forall k \in]0, \Lambda], \quad \sup_{q \in [0, \Lambda]} \{\mathcal{R}_k(q)\} = \alpha k^2\tag{61}$$

donc \mathcal{R}_k converge même uniformément vers 0 quand k tend vers 0, (C1) définie en Sec. 2.2.1 est vérifiée. En outre, (C2) est aussi validée puisque

$$\inf_{q \in [0, \Lambda]} \{\mathcal{R}_\Lambda(q)\} = \alpha \frac{\Lambda^2}{e - 1}\tag{62}$$

4 Méthodes numériques pour la résolution de BMW continu

4.1 Travail réalisé

La première partie de notre travail a été de reprendre le développement de ces équations et nous avons réécrit de façon plus modulable et structurée en C++ un code de résolution qui avait déjà été écrit au laboratoire (c.f. Fig. 6). Pour résoudre ces équations de très nombreuses méthodes numériques ont été mises en place, comme des méthodes Galerkin [20, 12] pour la représentation des fonctions, de Simpsons pour le calcul des intégrales, de Runge-Kutta pour la discrétisation temporelle etc., avant qu'un algorithme fonctionnant dans les cas $N = 1$ et $d = 2$ puisse être trouvé. Cependant, cet algorithme échoue lorsque l'on essaie de l'utiliser en $N \geq 2$ en $d = 2$. Nous avons donc essayé d'en comprendre la cause, notamment en réalisant des calculs en des dimensions $d \in [2, 3]$ et en les comparant à d'autres codes plus simples que nous avons réécrits, provenant d'autres approximations que BMW.

4.2 Structure de l'algorithme

Nous avons à résoudre ici un système d'équations intégral-différentielles 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 gauche des équations. Il a été mis en évidence dans ce code 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 différencions la dépendance en champ (i.e. en $\tilde{\rho}$) à celle en impulsion (i.e. \tilde{p}) des fonctions inconnues. Pour ce qui est de la dépendance en champ, il suffit de prendre une grille fixe finie de points $\{\tilde{\rho}_i\}_i$ régulièrement espacés dans $[0, \tilde{\rho}_{max}]$, où $\tilde{\rho}_{max}$ est choisi suffisamment grand. Les dérivées selon cette variable se calculent alors par des schémas différences finis d'ordre 5.

Enfin pour la dépendance en moment la discrétisation se fait dans une boîte $[0, \tilde{p}_{max}]$ où \tilde{p}_{max} est choisi aussi suffisamment grand. Cependant les choses sont plus compliquées car il faut à la fois pouvoir facilement calculer des dérivées selon \tilde{p} , mais aussi intégrer selon cette même variable afin d'obtenir les intégrales \tilde{I} et \tilde{J} . Le calcul des intégrales $\tilde{J}(\tilde{p}, \tilde{\rho})$ pour tout \tilde{p} et $\tilde{\rho}$ de la discrétisation est ce qui demande le plus de temps dans l'exécution. Dans les premières versions de ce code la discrétisation était faite sur une grille fixe de points régulièrement espacés et les intégrales étaient calculées par des méthodes de Simpson. Cependant cela s'est avéré ne pas être assez précis dans certaines configurations, les algorithmes n'étaient pas robustes. Pour palier à ce problème et pour calculer correctement \tilde{J}_3 c'est une décomposition pseudo spectrale de la partie en impulsion des fonctions inconnues qui a été mise en place. Plus précisément, nous avons décrit la partie en impulsion en décomposant des fonctions en série de polynômes de Tchebychev.

La décomposition pseudo-spectrale signifie alors qu'à chaque pas de temps de la résolution on calcule et conserve en mémoire pour le pas de temps suivant la valeur de la fonction que l'on interpole au point d'interpolation ainsi que les coefficients de sa décomposition en série de polynôme de Tchebychev. Les intégrales peuvent alors être calculées par une quadrature de Gauss-Legendre.

Nous détaillons alors les différents aspects numériques des discrétisations que nous avons utilisé.

4.3 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 aux différences finies (Ann. F.1). Ce choix sur 5 points a été fait pour essayer de calculer des dérivées le plus précisément possible. Le problème vient alors des points des bords de la grille de discrétisation, puisque nous ne possédons pas de condition de bords à nos équations. Ainsi, 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 détaillons en Sec. 7.2 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 de Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) [5] 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 étrange 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.

4.4 Discrétisation en impulsion

4.4.1 Expression des coefficients

Pour la discrétisation en moments nous avons choisi d'utiliser des polynômes de Tchebychev. Dans [14] il est démontré les propriétés suivantes :

Décomposition sur une base de Tchebychev. Soient a, b , deux réels tels que $b > a$. Soit f une fonction de classe C^0 de $[a, b]$ dans \mathbb{R} . On note T_j est le polynôme d'ordre j de Tchebychev de première espèce. Soit $n \in \mathbb{N}$ et $\{x_k\}_{k \in [0, n]}$ les racines du polynôme T_n , on pose

$$c_j = \frac{A_j}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f\left(\frac{a+b}{2} + x_k \frac{b-a}{2}\right) T_j(x_k) \quad (63)$$

$$S_n[f](x) = \sum_{j=0}^{n-1} c_j T_j\left(\frac{2x-a-b}{b-a}\right) \quad \forall x \in [a, b] \quad (64)$$

Avec $A_j = 2$ si $j > 0$ et $A_0 = 1$.

Nous avons alors, en norme L^2 ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f - S_n[f]\|_2 = 0 \quad (65)$$

De plus si f est C^1 alors

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|f - S_n[f]\|_\infty = 0 \quad (66)$$

On écrit, pour n suffisamment grand, $f \simeq S_n[f]$.

La présence du régulateur à été introduite dans le NPRG pour permettre de gagner en régularité dans les équations et pouvoir effectuer des calculs de manière continue (contrairement au RG, où l'on procède par itérations successives). Avec le régulateur C^∞ que nous avons choisi, on peut supposer que la solution d'un tel système sont extrêmement régulières. Nous pouvons au moins, pour appuyer ce propos, étudier la régularité des fonctions du schéma semi-discrétisé en temps.

On pose $n \in \mathbb{N}$. On note $(t_0, t_1, \dots, t_n, \dots)$ l'ensemble des temps discrets utilisés par le schéma d'Euler. On note \tilde{Y}_{k_n} la fonction \tilde{Y}_k au temps discret t_n . Alors pour tout $n \in \mathbb{N}$ la fonction \tilde{Y}_{k_n} est une fonction au moins de classe C^1 sur

$[0, +\infty]^2$ et donc sur $[0, \tilde{p}_{max}]$ (c.f. la démonstration Ann. ??). Ceci justifie alors l'utilisation des polynômes de Tchebychev pour l'interpolation des fonctions dépendant d'un moment. On utilise donc les propriétés précédentes pour $a = 0$ et $b = \tilde{p}_{max}$.

4.5 Calcul des intégrales

Le plus gros problème rencontré dans la formulation discrétisée du problème a été le calcul des intégrales \tilde{J} . Grâce aux propriétés des fonctions que l'on intègre on peut développer une expression de ces intégrales telle que la dimension d devienne un simple paramètre. En effet calculer l'intégrale \tilde{J} revient à calculer une intégrale de la forme

$$K = \int_{\mathbb{R}^d} f(\tilde{\mathbf{q}}^2) g((\tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{q}})^2) d\tilde{\mathbf{q}}, \quad (67)$$

où f et g sont deux fonctions. Et il en est de même pour les intégrales \tilde{I} en prenant $\mathbf{p} = 0$ dans l'expression précédente. On pose alors $\tilde{\mathbf{q}} = \tilde{q}_1 \mathbf{u} + \tilde{\mathbf{q}}_2$, où $\mathbf{u} = \tilde{\mathbf{p}}/\|\tilde{\mathbf{p}}\|$ et $\tilde{\mathbf{q}}_2$ est orthogonal à \mathbf{u} . Il vient alors

$$K = S_{d-1} \int_0^{+\infty} d\tilde{q}_2 \tilde{q}_2^{d-2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{q}_1 h(\tilde{p}, \tilde{q}_1, \tilde{q}_2) \quad (68)$$

En posant

$$h(\tilde{p}, \tilde{q}_1, \tilde{q}_2) \equiv f(\tilde{q}_1^2 + \tilde{q}_2^2) g(\tilde{p}^2 + \tilde{q}_1^2 + \tilde{q}_2^2 + 2\tilde{p}\tilde{q}_1) \quad (69)$$

Le coefficient S_{d-1} est un pré-facteur réel. De ce fait, le calcul d'une intégrale à d dimensions se ramène au calcul de deux intégrales seulement, qui peut être fait chacun sans problèmes avec une interpolation de Gauss-Legendre (Ann. ??). En pratique, les intégrales étant coupés par le régulateur nous réalisons l'intégration jusqu'à une borne \tilde{q}_{max} telle que $\|\tilde{\mathbf{q}}\|_2 < \tilde{q}_{max} < \tilde{p}_{max}$. Comme on fait l'hypothèse vraisemblable selon laquelle les inconnues de notre système à résoudre sont régulières on peut réaliser l'intégration efficacement en utilisant un quadrature de Gauss-Legendre. En notant, $\{\xi_i\}_{i \in [1, n_{gl}]}$ les points de la quadrature de Gauss-Legendre et $\{w_i\}_i$ les poids associées nous calculons

$$K \simeq S_{d-1} \frac{\tilde{q}_{max}^2}{2} \sum_{i=1}^{n_{gl}} w_i \left[\frac{\tilde{q}_{max}}{2\sqrt{2}} (1 + \xi_i) \right]^{d-2} \times \sum_{j=1}^{n_{gl}} w_j h \left(\tilde{p}, \frac{\tilde{q}_{max}}{2\sqrt{2}} (1 + \xi_i), \frac{\tilde{q}_{max}}{\sqrt{2}} \xi_j \right) \quad (70)$$

C'est en corrigeant la manière donc cette borne \tilde{q}_{max} était définie dans la version précédente du code que nous avons pu obtenir de bons résultats.

4.5.1 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.

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

$$\forall x \in [-1, 1] \quad \mathcal{P}_{m+1}(x) = u_m(x) \mathcal{P}_m(x) + v_m(x) \mathcal{P}_{m-1}(x) \quad (71)$$

On souhaite calculer, pour $x \in [-1, 1]$ donné,

$$S = \sum_{l=0}^n a_l \mathcal{P}_l(x) \quad (72)$$

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:  $S_1 = a_0 \mathcal{P}_0(x) + b_1 \mathcal{P}_1(x) + b_2 v_1(x) \mathcal{P}_0(x)$ 

```

Alors nous avons⁴ $S = S_1$.

Ainsi, pour calculer le point $f(x)$ pour tout $x \in [a, b]$, en utilisant les coefficients de la relation de récurrence sur les polynômes de Tchebychev Ann. ?? nous obtenons l'algorithme suivant

```

1:  $b_{n+2} = 0$ ;  $b_{n+1} = 0$ 
2: for  $m = n..1$  do
3:    $y = (2x - a - b)/(b - a)$ 
4:    $b_m = a_m + 2yb_{m+1} - b_{m+2}$ 
5: end for
6:  $f(x) = a_0 - b_2 + b_1 y$ 

```

Cette méthode [4] est plus robuste et légèrement plus rapide que celle qui consisterait à calculer directement la somme de la série de polynômes. En effet, on passe d'un algorithme avec $\sim 4n$ opérations à un algorithme avec $\sim 3n$ opérations en utilisant cette technique pour des polynômes de Tchebychev. Le gain est faible mais cela est plus particulièrement utile lorsque l'on réutilise la technique en dimension 2 pour le modèle d'Ising 2D Sec. ??.

4.5.2 Calcul des dérivées

Un autre avantage d'exprimer les fonctions sous une décomposition en série de polynôme de Tchebychev pour la variable d'impulsion \tilde{p} est qu'il devient facile d'en calculer les dérivées par rapport à p en tout point de la boîte $[0, \tilde{p}_{max}]$ de discrétisation. En effet il existe une relation simple entre les coefficients de la décomposition d'une fonction f et ceux de sa dérivée $\partial_{\tilde{p}} f$. Cette relation se trouve en Ann. ??.

4. Ce résultat se démontre par récurrence sur $m \in [1, N]$ en remarquant que, $S_1 = S_m + b_{m+1} \mathcal{P}_{m+1}(x) + b_{m+2} v_{m+1}(x) \mathcal{P}_{m+2}(x)$ Avec la notation $S_m = \sum_{l=0}^m a_l \mathcal{P}_l(x)$.

4.6 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 $\tilde{\rho}$. 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 [19] la parallélisation de toutes les parties orange clair de Fig. 6 se fait tout naturellement à l'aide de quelques instructions seulement.

5 Resultats : $O(N)$ continu

5.1 Pour $N = 1$ (\mathbb{Z}_2), $d = 2$

Nous avons tout d'abord réussi à retrouver les résultats connu pour $N = 1$ à l'aide du code que l'on a réécrit. En effet l'avantage majeur de la dernière versions créée du code avait été de donner des résultats corrects pour $d = 2$.

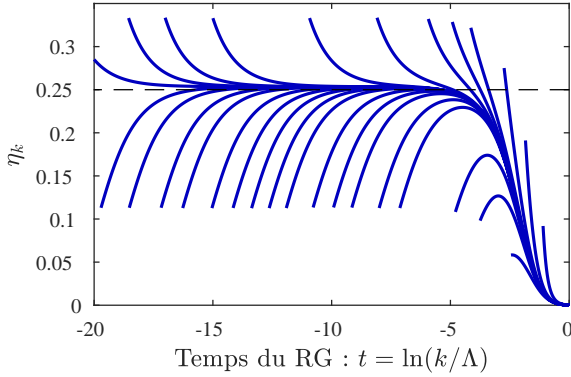


FIGURE 5 – Évolution de η_k en fonction de $t = \ln(k/\Lambda)$ pour différentes étapes de la dichotomie sur r'_0 . En pointillés noirs nous avons représenté la valeur exacte attendue $\eta = 0.25$.

La Fig. 5 montre l'évolution de η_k pour plusieurs conditions initiales r'_0 et donc pour plusieurs étapes de la dichotomie du r'_0 nous menant vers un point critique. On remarque que pour des temps $t < -5$, correspondant à $k < \Lambda \exp(-5)$ nous avons des courbes passant par un "quasi-plateau". Ces quasi-plateau sont le signe que nous sommes tout près d'un point fixe du RG donnant $\eta_k \simeq \eta$. En effet k est alors suffisamment faible pour que l'on puisse écrire $\lim_{k \rightarrow 0} \eta_k \simeq \eta_{k < \Lambda \exp(-5)}$.

Après être passées par ce quasi-plateau les courbes divergent (en partant soit vers le haut, soit vers le bas). Ceci s'explique par le fait que nous n'avons pas trouvé avec une précision infinie la valeur de r'_0 menant au point fixe. De ce fait n'étant pas parfaitement au point critique mais très proche on peut montrer que les courbes en diverge en $\exp(-t/\nu)$ où ν est l'exposant critique après être passées par ce quasi-plateau. Sur les courbes qui divergent le plus tard (à $-t$ grand) on peut ainsi considérer que $\eta_k^* \simeq \eta_k$ et

alors on en déduit $\eta \simeq \eta_{k < \Lambda \exp(-5)}$.

Nous retrouvons donc les valeurs

$$\eta = 0.253 \quad \text{et} \quad \nu = 1.01 \quad (73)$$

Ces résultats sont ceux qui avaient déjà été trouvé avec le même code (que nous avons simplement ré-organisé). Ce sont des valeurs en très bon accord avec les valeurs théoriques attendues : $\eta = 0.25$ et $\nu = 1.01$.

5.2 Pour $N = 2$ ou $N = 3$, $d = 2$

Le cas $N = 2$ ou 3 , $d = 3$ fonctionnant nous nous sommes ensuite plus particulièrement intéressé au cas $N = 2$, $d = 2$. La première difficulté que nous avons rencontré lors de ces simulations a été la présence probable d'un pôle dans l'expression de $G_k(q, \rho)$ lorsque l'on

Nous avons aussi fait varier le nombre de points d'intégration ou encore la taille de la grille de discrétisation en champ ρ . Cependant nous n'avons trouvé aucun changement de comportement des résultats. Nous en avons déduit qu'il s'agissaient d'un problème de précisions sur les

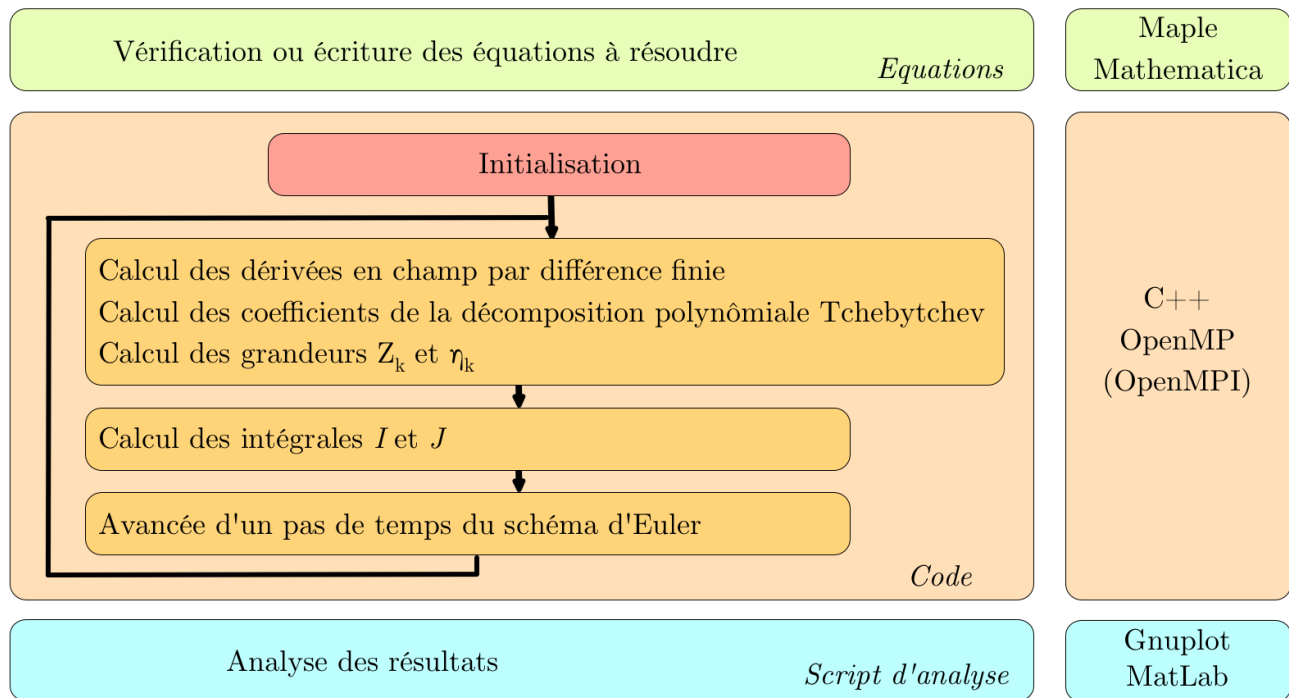


FIGURE 6 – Schéma de la répartition du travail effectué. Nous avons commencé par retrouver ou écrire les équations BMW à résoudre (vert). Ensuite nous avons réécrit ou écrit les codes C++ de simulation de ces équations ayant la structure indiquée (rouge). Toutes les parties orangées sont parallélisée sous OpenMP. Enfin nous étudions les résultats à l'aides de scripts Matlab.

6 Retour sur le modèle d'Ising 2D

Nous abordons maintenant une nouvelle étude. En effet, après nous être intéressés au calcul des exposants critiques du modèle continu $O(N)$ nous avons voulu montrer que le NPRG couplé à l'approximation BMW était une méthode suffisamment précise pour calculer des grandeurs non universelles comme la température critique de la transition de phase d'un système donné. Pour cela nous avons entrepris de calculer la température critique du modèle d'Ising 2D présenté dans l'introduction à l'aide des équations BMW. En effet il nous était facile par la suite de vérifier la qualité de l'approximation en comparant la valeur numérique obtenue à la valeur théorique calculée par Onsager [18].

Cependant, comme nous l'avons mentionné en décrivant le formalisme de la théorie des champs pour la mécanique statistique, le modèle d'Ising 2D ne satisfait pas à une description par des champs qui puisse permettre de lui appliquer le NPRG. En effet le système est décrit par des micro-états $\mathcal{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}$. Ces micro-états sont des ensembles de variables discrètes qui ne peuvent prendre que les valeurs -1 et 1 . On rappelle que le hamiltonien pour \mathcal{M} est alors défini par

$$H(\mathcal{M}) = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} . \quad (74)$$

La fonction de partition associée est la somme sur l'ensemble des micro-états possible du système

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathcal{M}} \exp \left(-\frac{H(\mathcal{M})}{k_B T} \right) . \quad (75)$$

Nous avons donc utilisé une astuce mathématique nous permettant de transformer la fonction de partition précédente en fonction de partition exprimé dans la théorie des champs et de la forme

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi \exp(-\mathcal{H}[\varphi]) . \quad (76)$$

Les micro-états ne sont pas décrits par des champs puisque les variables $S_{\mathbf{r}}$ ne peuvent prendre que deux valeurs -1 et 1 et ne sont pas comprises dans \mathbb{R} tout entier. De plus elles sont définies pour des \mathbf{r} discrets. Ces deux problèmes peuvent être résolus. Pour travailler avec des fonctions dans \mathbb{R} et non $\{-1, 1\}$ nous utilisons une transformée de Hubbard-Stratanovitch nous permettant de travailler avec de nouvelles variables $\phi_{\mathbf{r}}$ définies dans \mathbb{R} . Pour la définition en \mathbf{r} discrets nous allons surmonter ce problème en passant à un réseau de dimensions infinies (ce qui revient à passer à la limite thermodynamique) associé à un passage en transformée de Fourier semi-discrète (TFSD) de nos nouvelles variables (cf Ann. A.3. Cette démarche⁵ a été réalisée dans [13]. Nous l'avons détaillée en Ann. D. Nous présentons le résultat obtenu en section suivante.

6.1 Modélisation avec des champs

Nous montrons en Ann. D que la fonction de partition du modèle d'Ising 2D peut se réécrire sous la forme.

$$\mathcal{Z} \propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} \exp(-\mathcal{H}_{\mu}[\varphi]) , \quad (77)$$

avec l'hamiltonien \mathcal{H}_{μ} suivant :

$$\mathcal{H}_{\mu}[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \frac{1}{\lambda_{\mu}(\mathbf{q})} \varphi(-\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{r}} \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) , \quad (78)$$

La grandeur μ est un réel tel que $\mu > 2J$ et $\beta = 1/(k_B T)$. Les variables $\varphi_{\mathbf{r}}$ sont à valeurs dans \mathbb{R} pour $\mathbf{r} = m\hat{\mathbf{e}}_x + n\hat{\mathbf{e}}_y$ ($m, n \in \mathbb{Z}$). Ainsi \mathbf{r} est dans l'ensemble des positions des noeuds du réseau du modèle d'Ising 2D (dans lequel nous avons exprimé toutes les longueurs en unité du pas du réseau). Il y a une infinité de $\varphi_{\mathbf{r}}$ car nous travaillons à la limite thermodynamique où le nombre de spins tend vers l'infini. Nous avons défini $\mathbf{q} \rightarrow \varphi(\mathbf{q})$ comme une transformée de Fourier semi-discrète de $\{\phi_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}$ (Ann. A.3) en posant, pour $\mathbf{q} \in [-\pi, \pi]^2$,

$$\varphi(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad \text{et} \quad \varphi_{\mathbf{r}} = \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (79)$$

Nous avons aussi introduit les fonctions

$$\begin{aligned} \gamma(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (\cos(q_x) + \cos(q_y)) \\ \lambda_{\mu}(\mathbf{q}) &= 2\beta (2J\gamma(\mathbf{q}) + \mu) . \end{aligned} \quad (80)$$

Par isométrie de la transformation de Fourier, nous réécrivons \mathcal{H}_{μ} sous la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\mu}[\varphi] &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{\lambda_{\mu}(\mathbf{q})} - \frac{1}{\lambda_{\mu}(0)} \right] \varphi(-\mathbf{q}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{r}} \left[\frac{1}{2\lambda_{\mu}(0)} \varphi_{\mathbf{r}}^2 - \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) \right] \end{aligned} \quad (81)$$

Enfin, il est aussi possible d'introduire un paramètre $\delta \in \mathbb{R}_+^*$ permettant de changer l'échelle du champ en posant le changement de variable, $\varphi \rightarrow 2\delta\sqrt{\beta J} \varphi$. On obtient alors l'hamiltonien sous la forme

$$\mathcal{H}_{\mu}[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \varepsilon_0(\mathbf{q}) \varphi(-\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{r}} U(\varphi(\mathbf{r})) , \quad (82)$$

avec les notations

$$\varepsilon_0(\mathbf{q}) = \delta^2 \frac{1 - \gamma(\mathbf{q})}{(\gamma(\mathbf{q}) + \tilde{\mu})(1 + \tilde{\mu})} \quad (83)$$

$$U(\phi) = \delta^2 \frac{1}{1 + \tilde{\mu}} \frac{1}{2} \phi^2 - \ln \left(\cosh \left(\delta \sqrt{2\tilde{\beta}} \phi \right) \right) \quad (84)$$

où $\tilde{\mu} = \mu/(2J)$ et $\tilde{\beta} = 2\beta J$. On retrouve ainsi la formulation d'un problème de théorie des champs que l'on peut résoudre avec le NPRG et l'approximation BMW. Concernant la mise en pratique, la seule différence avec

5. Elle a plus précisément été faite pour un réseau d'Ising en dimension d non nécessairement égale à 2.

tout ce qui a été étudié précédemment c'est qu'ici, par TFSD, les intégrales sur les moments ne sont plus calculées sur un domaine infini mais sur "la première zone de Brillouin", i.e. sur la surface $[-\pi, \pi]^2$. Comme le modèle d'Ising 2D possède une symétrie \mathbb{Z}_2 , l'équation de flot BMW Eq. (39) pour la symétrie \mathbb{Z}_2 reste valable en prenant en compte cet ajustement.

La fonction U représente ce que l'on appelle le potentiel du système dans l'approximation de champ moyen. Le potentiel $V_k(\phi) = \Gamma_k(\mathbf{p}, \phi)$ que l'on peut définir dans les équations BMW prend en $k = \Lambda$ la valeur $V_\Lambda = U$. La fonction ε_0 s'appelle quant à elle la relation de dispersion. Dans le modèle continu φ^4 il y avait de même une relation de dispersion qui valait alors $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2$.

Remarquons de plus que la fonction U est de classe \mathcal{C}^∞ dérivable sur $[0, +\infty[$, avec

$$\partial_\phi^2 U(\phi) = \delta^2 \frac{1}{1 + \tilde{\mu}} - \frac{2\delta^2 \tilde{\beta}}{\cosh^2\left(\delta\sqrt{2\tilde{\beta}}\phi\right)} \quad (85)$$

Enfin, la recherche de point fixe pour se système se fait en variant le paramètre directement lié à la température $\tilde{\beta}$ dans les conditions initiales. On cherche donc $\tilde{\beta}_c = 2d/(k_B T_c)$ pour lequel les équations dimensionnées écrites plus loin possède un point fixe. Un point fixe ne pouvant être trouvé qu'à la température critique, de cette manière on obtient la température critique.

6.2 Régulateur

La présence de la relation de dispersion ε_0 dans \mathcal{H}_μ nous contraint, pour satisfaire à toutes les conditions d'un régulateur qui soit \mathcal{C}^∞ , à utiliser

$$\mathcal{R}_k(\mathbf{q}) = \alpha \frac{Z_k \varepsilon_0(\mathbf{q})}{\exp(\varepsilon_0(\mathbf{q})/\varepsilon_k) - 1} \quad (86)$$

Avec $\varepsilon_k = \|\varepsilon_0\|_\infty k^2$. Les expressions de la dérivées $\partial_t \mathcal{R}_k$ se trouvent en Ann. G.

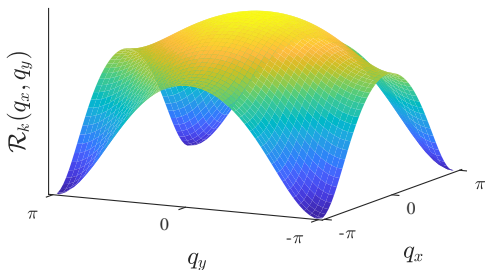


FIGURE 7 – Allure du régulateur choisi pour une valeur de $k \simeq 1$.

6. en effet H est invariant par l'échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$ comme nous avons pu le voir dans l'introduction. On peut même voir que aussi directement que $\mathcal{H}_\mu[-\varphi] = \mathcal{H}_\mu[\varphi]$.

6.3 Étapes de la résolution

Pour des raisons pratiques nous avons décomposé la résolution numérique des équations BMW du modèle d'Ising en 3 étapes, en procédant à un adimensionnement progressif des équations. L'adimensionnement est en effet nécessaire pour pouvoir trouver une solution de point fixe et déterminer la température critique avec précision. Cependant les équations non adimensionnées sont plus simple à résoudre numériquement comme. ...

On commence par réécrire Eq. (48). Pour conserver dans les équations que l'on traite la symétrie en \mathbf{p} de la relation de dispersion ε_0 nous posons la décomposition

$$\Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = \varepsilon_0(\mathbf{p}) + \Delta_k(\mathbf{p}, \phi) + X_k(\phi), \quad (87)$$

où l'on introduit $X_k(\phi) = \partial_\phi^2 V_k(\phi) = \partial_\phi^2 \Gamma_k(\mathbf{p}, \phi)$. On peut montrer que $X_k(\phi) = \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p} = 0, \phi)$. La variable Γ_k est le potentiel de Gibbs du système définie dans la section introduisant le NPRG. Cette décomposition insérée dans Eq. (39) donne alors les trois jeux d'équations BMW pour le système Ising 2D auquel il faut ajouter les conditions initiales.

6.3.1 Première étape

Comme nous travaillons sur un réseau, toutes les fonctions de nos équations sont 2π périodiques selon les composantes des moments lorsque l'on considère les variables et les fonctions dimensionnées (c.f. Sec. B.1.2). (i.e. les fonctions et variables notées de manière générale sans tilde). Ceci permet de s'affranchir de certaines approximations numériques dans le calcul des intégrales. Il est donc préférable de commencer par résoudre le système d'équations BMW directement obtenu de l'équation de flot BMW Eq. (39), que l'on note \mathcal{E}_1 , sans réaliser d'adimensionnement pour k variant de Λ à k_a (où $k_a \in]0, 1]$ une valeur à déterminer). Le problème BMW (\mathcal{P}_1) à résoudre est donc

Trouver Δ_k , X_k , solution de \mathcal{E}_1 , i.e tels que pour tout $p_x \in [-\pi, \pi]$, $p_y \in [-\pi, \pi]$, $\phi \in \mathbb{R}$, $k \in [k_a, \Lambda]$

$$\begin{aligned} \partial_t \Delta_k(p_x, p_y, \phi) = & J_3(p_x, p_y, \phi) \partial_\phi \{ \Delta_k(p_x, p_y, \phi) + X_k(\phi) \} \\ & - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Delta_k(p_x, p_y, \phi) \\ & - I_3(\phi) (\partial_\phi X_k(\phi))^2 \end{aligned} \quad (88)$$

$$\partial_t X_k(\phi) = \frac{1}{2} \partial_\phi^2 I_1(\phi), \quad (89)$$

où l'on note toujours $X_k(\phi) = \partial_\phi^2 V_k(\phi)$. Ce système est similaire au système (Eq. (??), Eq. (??)) du modèle φ^4 mais il est écrit selon la variable ϕ et les fonctions dépendent non plus de la norme des moments mais bien des deux composantes de \mathbf{p} , que sont p_x et p_y . Les notations

J et I correspondent à celle du modèle φ^4 et leurs expressions sont écrites en Ann. G.

Les conditions initiales de ce problème viennent de la décomposition Eq. (87), ainsi que de la condition initiale générale des équations BMW Eq. (36) associé à l'expression de la dérivée seconde de U par rapport à ϕ , Eq. (85)

$$\Delta_\Lambda = 0 \quad \text{et} \quad X_\Lambda(\phi) = \delta^2 \frac{1}{1 + \tilde{\mu}} - \frac{2\delta^2 \tilde{\beta}}{\cosh^2\left(\delta\sqrt{2\tilde{\beta}\phi}\right)} \quad (90)$$

6.3.2 Deuxième étape

Dans un second temps pour $k \in [k_b, k_a]$ (où $0 < k_b < k_a < 1$) on utilise un nouveau système équations \mathcal{E}_2 pour lesquelles nous avons adimensionné les moments. En fait ceci correspond seulement à écrire les équations en fonction de $\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/k$ (ou $\tilde{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/k$) au lieu de \mathbf{p} (ou \mathbf{q}). Ces nouvelles équations prennent pour conditions initiales le résultats de la résolution numérique de \mathcal{E}_1 en $k = k_a$. Cela permet d'améliorer la précision du calcul des intégrales à k petit (i.e. $k < k_a < 1$), même si, en contrepartie, on perd l'avantage de la périodicité des fonctions.

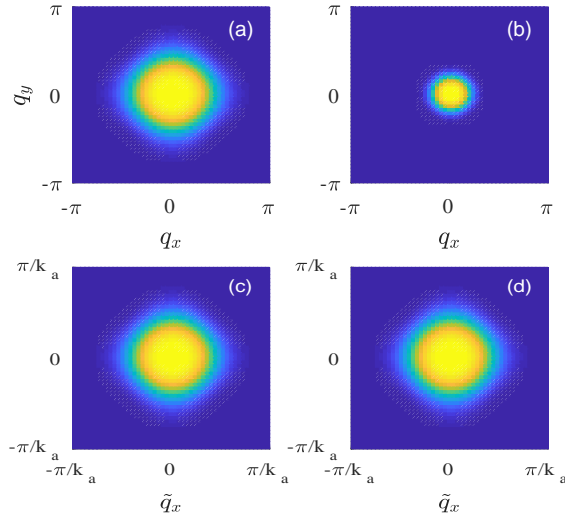


FIGURE 8 – (a-b) Représentation de $(k, q_x, q_y) \rightarrow \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y)$ pour deux valeurs de k notées k_1 (a) et k_2 (b) sur la boîte/le carré de discrétisation en moments $[-\pi, \pi]^2$. Nous avons choisi $k_1 > k_2$. On représente en fait la zone utile d'intégration dans $[\pi, \pi]^2$. En effet plus la couleur est bleue foncée plus la fonction est proche de 0. Ainsi on peut considérer que seule la partie dans la tache jaune contribue réellement à la valeur des intégrales, ailleurs la fonction est "quasi-nulle". (c-d) Représentation de $(k, \tilde{q}_x, \tilde{q}_y) \rightarrow \partial_t \mathcal{R}_k(k\tilde{q}_x, k\tilde{q}_y)$ dans la boîte $[-\pi/k_a, \pi/k_a]^2$ pour k_1 (c) et k_2 (d) en ayant choisi ici $k_a = k_1$. Même si $k_1 > k_2$ toujours, il n'y a plus d'évolution de la zone utile d'intégration avec les nouvelles variables adimensionnée \tilde{q}_x et \tilde{q}_y .

En effet pour un k suffisamment faible la fonction $(k, \mathbf{q}) \rightarrow \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q})$ possède une valeur non négligeable seulement pour des valeurs de q_x et q_y inférieures (voire

très inférieure) à π en valeur absolue. Or cette fonction apparait dans toutes les expressions des intégrales I_n et J_n de \mathcal{E}_1 qui sont calculées sur le carré $[-\pi, \pi]^2$:

$$I_n, J_n \propto \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) \times \dots \quad (91)$$

Elle limite donc la zone utile d'intégration aux zones où elle n'est pas "quasi-nulle" (c.f. Fig. 8). Ainsi pour k décroissant l'intervalle d'intégration réellement utile (qui contient l'information) diminue, il se concentre dans un cercle autour de l'origine. Ceci pose des problèmes de précision dans le calcul des intégrales quand on travaille avec un nombre de point de quadrature fixé. Autrement dit, l'échelle d'intégration ne correspond plus à l'échelle de variation des fonctions à intégrer. Seuls les points d'intégration présents dans la zone où $\mathcal{R}_k(\mathbf{q})$ possède une valeur non négligeable (zone jaune orange de Fig. 8) apportent une contribution à l'intégrale.

L'adimensionnement $\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/k$ permet d'éviter ce problème : il est équivalent à construire une boîte numérique de discrétisation en impulsion *dynamique*, (i.e. dont les dimensions diminuent au fur et à mesure que k diminue vers 0 dans la résolution) sans modifier le nombre de points de discrétisation. En effet, la nouvelle boîte de discrétisation en $\tilde{\mathbf{p}}$ est définie par $[-\tilde{p}_{max}, \tilde{p}_{max}]^2$ ce qui correspondrait, pour la variable $\mathbf{p} = k\tilde{\mathbf{p}}$, à une boîte de dimension $[-k\tilde{p}_{max}, k\tilde{p}_{max}]^2 \subset [-\pi, \pi]^2$, diminuant avec k .

On peut choisir k_a de manière à ce que $(k, \tilde{\mathbf{q}}) \rightarrow \partial_t \mathcal{R}_k(k\tilde{\mathbf{q}})$ ne soit quasi-nulle que sur les bords de cette nouvelle boîte en $\tilde{\mathbf{q}}$ pour tout $k \leq k_a$ et que tous les points d'intégration servent. On conserve ainsi une précision de calcul constante à faible k . Le problème (P_2) à résoudre devient

Trouver $\bar{\Delta}_k, \bar{X}_k$, solution de \mathcal{E}_2 , i.e tels que pour tout $\tilde{p}_x \in [-\tilde{p}_{max}, \tilde{p}_{max}]$, $\tilde{p}_y \in [-\tilde{p}_{max}, \tilde{p}_{max}]$, $\phi \in \mathbb{R}$, $k \in [k_b, k_a]$

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) = & \bar{J}_3(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) \partial_\phi \{ \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) + \bar{X}_k(\phi) \} \\ & - \frac{1}{2} \bar{I}_2(\phi) \partial_\phi^2 \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) \\ & - \bar{I}_3(\phi) (\partial_\phi \bar{X}_k(\phi))^2 \\ & + \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) \\ & + \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) \end{aligned} \quad (92)$$

$$\partial_t \bar{X}_k(\phi) = \frac{1}{2} \partial_\phi^2 \bar{I}_1(\phi) \quad (93)$$

On pourra se référer à Ann. G pour les différentes notations. Les conditions de raccordement sont

$$\bar{\Delta}_{k_a}(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) = \Delta_{k_a}(p_x, p_y, \phi) \quad \text{et} \quad \bar{X}_{k_a}(\phi) = X_{k_a}(\phi)$$

Pour assurer la compatibilité entre les deux systèmes il faut alors respecter $k_a \tilde{p}_{max} = \pi$.

6.3.3 Troisième étape

Les deux jeux d'équation précédents utilise encore ϕ qui est dimensionné comme le sont resté les fonctions. Seules les variables d'impulsion \mathbf{p} et \mathbf{q} ont été changées pour des raisons pratiques. Or comme mentionné à plusieurs reprises, ce qui nous intéresse serait de trouver un point fixe du RG. En effet le but est de trouver la température critique du modèle d'Ising 2D et il faut, pour cela, essayer de se rapprocher d'un point fixe. On utilise alors, dans un dernier temps, un nouveau système \mathcal{E}_3 des équations totalement adimensionnées. On prend comme condition initiale le résultat donné par la simulation de \mathcal{E}_2 à $k = k_b$. Le problème se transforme alors en (\mathcal{P}_3) ,

Trouver \tilde{Y}_k, \tilde{X}_k , solution de \mathcal{E}_3 , i.e tels que pour tout $\tilde{p}_x \in [-\tilde{p}_{max}, \tilde{p}_{max}]$, $\tilde{p}_y \in [-\tilde{p}_{max}, \tilde{p}_{max}]$, $\tilde{\phi} \in \mathbb{R}$, $k \in]0, k_b]$

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) &= \eta_k (1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) \\ &+ \frac{1}{2} \eta_k \tilde{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) - \frac{1}{2} \tilde{I}_2(\tilde{\phi}) \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \\ &+ \frac{1}{\varepsilon_0^0 \tilde{\mathbf{p}}^2} \left\{ \left(\varepsilon_0^0 \tilde{\mathbf{p}}^2 \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) + \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \right)^2 \tilde{J}_3(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \right. \\ &\left. - \left(\partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \right)^2 \tilde{I}_3(\tilde{\phi}) \right\} \\ &+ \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) + \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \end{aligned} \quad (94)$$

$$\partial_t \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) = (\eta_k - 2) \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) + \frac{1}{2} \eta_k \tilde{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) + \frac{1}{2} \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{I}_1(\tilde{\phi}) \quad (95)$$

On pourra ici aussi se référer à Ann. [G](#) pour les différentes notations et plus de précision. Avec les notations utilisée les conditions de raccordement sont

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{k_b}(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) &= \frac{1}{Z_k} \left(1 + \frac{\bar{\Delta}_{k_b}(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)}{\varepsilon_0^0 k_b^2 (\tilde{p}_x^2 + \tilde{p}_y^2)} \right) - 1 \\ \tilde{X}_{k_b}(\tilde{\phi}) &= \frac{1}{Z_k k^2} \bar{X}_{k_b}(\phi). \end{aligned}$$

Pour compléter ce système adimensionné il est nécessaire d'ajouter une relation supplémentaire sur η_k apparaissant dans les équations. En effet η_k est une variable nécessaire dans les équations adimensionnées pour prendre en compte l'exposant critique, appelé dimension anormale η définie Eq. (??). Cette équation s'obtient en utilisant simplement la définition de η_k et en la réécrivant à l'aide des fonctions adimensionnées.

$$\eta_k = \frac{1}{2} \tilde{I}_2(0) \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{Y}_k(0, 0, 0). \quad (96)$$

En conclusion l'important ici est cette résolution numérique des équations que l'on découpe en trois parties distinctes pour utiliser au mieux la périodicité du problème et conserver une précision maximale lors de la résolution numérique. Comme dans le modèle continu φ^4 , l'équation de flot BMW Eq. (39) ne possédant pas de conditions au bords, nos équations n'en possèdent pas non plus.

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

Nous allons passer en revue et justifier ici les principales méthodes numériques que nous avons mises en œuvre pour tenter de résoudre les systèmes d'équations précédents. En grande partie nous avons repris la méthodologie générale utilisée pour la résolution du modèle $O(N)$.

7.1 Structure du code

La différence principale entre les équations du modèle continu φ^4 et ces nouvelles équations est qu'ici pour les dimensions de moment les fonctions ne dépendent plus seulement de p (i.e. la norme de \mathbf{p}) mais de ces deux composantes p_x et p_y . Ainsi nous avons conservé le choix de réaliser des intégrations avec la méthode de Gauss-Legendre tout en discrétisant les variables de moment avec une méthode pseudo-spectrale de Tchebychev pour des raisons détaillées dans les prochaines sections. La difficulté a alors résidé en la réécriture des méthodes à une dimension (i.e. pour des fonctions d'une variable de moment) déjà utilisées dans le modèle φ^4 en des méthodes à deux dimensions, pour des fonctions de deux variables de moment. Le plus gros défit dans la simulation est encore de calculer les intégrales J, \bar{J}, \tilde{J} .

Pour la discrétisation en champ nous avons privilégié la variable ϕ dans les équations et non pas ρ à cause de différents problèmes numériques mais nous sommes resté sur une discrétisation par une grille fixe et des calculs de dérivées par rapport à ϕ des fonctions inconnues à l'aide de schémas aux différences finies à 5 points.

Enfin, pour la discrétisation en temps t le plus simple a été de conserver un schéma d'Euler explicite à cause de la non-linéarité des équations. Nous n'avons pas utilisé de schéma de Rung-Kutta car de manière générale le schéma d'Euler s'est avéré efficace.

Ce nouveau code est donc structuré de la même manière que le code du modèle continu φ^4 . En effet, avoir réécrit le code de la simulation du modèle continu φ^4 en C++ de façon modulable à l'aide de classes nous a alors permis, de manière générale, de reprendre ou d'adapter beaucoup des fonctions numériques. Pour avoir une vue générale de la structure il est donc possible de se reporter encore à la figure Fig. 6. Nous détaillons, maintenant dans la prochaine section les problèmes que l'on a pu rencontrer dans l'écriture des codes de simulations ainsi que les techniques retenues qui ont fonctionné et leurs avantages comparés à celles qui ont échoué.

7.2 Problèmes rencontrés

Tout d'abord nous avons écrit les équations en utilisant la variable ρ pour résoudre (\mathcal{P}_1) . Cependant nous avons pu observer des instabilités dans le calcul des dé-

rivées en ρ pour $\rho = \rho_{max}$ (avec ρ_{max} la limite de la grille de discrétisation en ρ). Nous avons réussi à résoudre le problème en descendant en ordre dans les schémas de calcul des dérivées en passant d'un ordre 5 à l'ordre 3. Cependant nous avons ensuite rencontré des instabilités au niveau du calcul des dérivées ∂_ρ autour de $\rho = 0$. Pour régler le problème nous avons alors utiliser la variable ϕ . En effet il apparaît alors des propriétés de parité des fonctions qui nous ont permis de donner des valeurs exactes aux dérivées en $\phi = 0$ (i.e. $\rho = 0$) et résoudre le problème. En outre la variable ϕ nous a aussi permis de repasser avec des dérivées en champs à 5 points sans difficultés pour $\phi = \phi_{max}$.

Le deuxième type de problème que nous avons rencontré a été la précision de l'interpolation et du calcul des intégrales. En effet, pour trouver un point fixe il faut regarder la solution des equations BMW pour des k faibles ($k < \Lambda \exp(-5)$ environ). Or comme nous l'avons vu la dérivée du régulateur se recentre autour de l'origine lorsque k diminue. Il se trouve que la dérivée du régulateur apparaît dans toutes les intégrales à calculer ce qui fait que les intégrales sont coupées par une fonction qui possède une valeur non nulle seulement pour les plus petits moments. Nous avons déjà détaillé ceci pour justifier l'emploi du système d'équation (\mathcal{E}_2) dont les moments sont adimensionnés. Cependant nous avons observé tout de même des pertes de régularités avant même de pouvoir effectuer le changement⁷ de \mathcal{E}_1 à \mathcal{E}_2 . Ces pertes de régularité, qui se caractérisent par des variations plus franches des fonctions discrétisées, sont visibles avec l'apparition d'instabilités numériques pour $k \simeq \Lambda \exp(-2)$. Ceci nous a imposé d'utiliser un nombre de point d'interpolation et d'intégration supérieur à ce que nous utilisons en premier lieu et de trouver de meilleures techniques pour cela.

Détaillons alors maintenant les différentes techniques numériques utilisées.

7.3 Symétries et périodicité des fonctions

Commençons par étudier les symétries du problème. En effet les différents jeux d'équations permettent de déterminer les symétries des fonctions inconnues.

On note $(t_1, t_2, \dots, t_n, \dots)$ les temps de discrétisation du système \mathcal{E}_1 . Considérons le schéma semi-discrétisé en temps associé. On note Δ_{k_n} la fonction Δ_k au pas de discrétisation en temps n ($t_n = \ln(k_n/\Lambda)$), et de même X_{k_n} . Alors, par les symétries de la relation de dispersion et du potentiel U initial (Ann. ??), la fonction Δ_{k_n} est paire selon toutes ses variables (par exemple, $\Delta_{k_n}(-p_x, p_y, \phi) = \Delta_{k_n}(p_x, p_y, \phi)$). De plus il y a aussi la symétrie supplémentaire $\Delta_{k_n}(p_y, p_x, \phi) = \Delta_{k_n}(p_x, p_y, \phi)$. De même, X_{k_n} est aussi une fonction paire.

Ces propriétés se transmettent aux fonctions inconnues des systèmes \mathcal{E}_1 et \mathcal{E}_2 que sont $\bar{\Delta}_{k_n}$, \bar{Y}_{k_n} , \bar{X}_{k_n} et \bar{X}_{k_n} .

7. En effet le changement ne peut se faire que lorsque nous avons une zone d'intégration utile incluse dans $[-\pi, \pi]$. Autrement dit il faut que $k < k_a$. Or il ne nous été pas possible de prendre $k_a > \Lambda \exp(-2.5)$

tout naturellement grâce aux conditions de raccordement.

De cette manière on ne considère que ϕ (ou $\tilde{\phi}$) $\in [0, \infty[$ ainsi que des moments définies sur une zone restreinte de $[-\pi, \pi]^2$ pour les fonctions inconnues de (\mathcal{P}_1) , ou de $[-\tilde{p}_{max}, \tilde{p}_{max}]^2$ pour celles de (\mathcal{P}_2) ou (\mathcal{P}_3) . On détaille plus précisément en Fig. 9 quelles sont ces zones.

Enfin mentionnons que puisque ε_0 est une fonction 2π -périodique alors Δ_{k_n} l'est aussi pour tout $n \in \mathbb{N}$ par rapport au variables p_x et p_y . Cette propriété est perdu pour les fonctions $\bar{\Delta}_{k_n}$ et \bar{Y}_{k_n} .

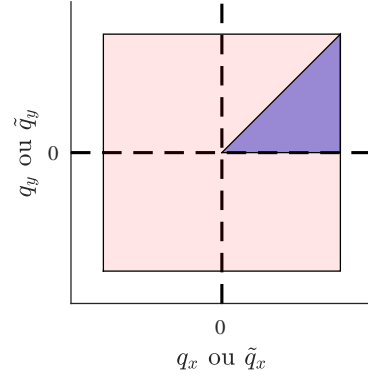


FIGURE 9 – (rouge transparent) Zone complète sur laquelle il faudrait définir les fonctions sans symétrie. (bleue) Zone dans laquelle il suffit de définir numériquement les fonctions. Les symétries permettent donc de "réduire" le problème à un espace plus petit en moments.

7.4 Interpolation de Tchebychev

Afin de pouvoir calculer avec précision les intégrales J , \bar{J} , \tilde{J} apparaissant dans les équations, nous avons choisi d'interpoler la fonction Δ_k ainsi que ses dérivées et ses pendants adimensionnés dans le plan des moments. Comme annoncé, pour cela nous réutilisons encore une interpolation de Tchébychev adaptée en dimension 2.

7.4.1 Décomposition

Nous rappelons ici une propriété justifiant l'utilisation des polynômes de Tchebychev comme polynômes d'interpolation en dimension 2.

Décomposition de Tchebychev 2D. Soient a, b deux réels tels que $b > a$. Soit $f : [a, b]^2 \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue aux variations bornées (comme définies en [14]). On suppose que l'une des dérivées partielles de f existe et est bornée dans $[a, b]$. Alors il existe une suite des coefficients réels $\{c_{ij}\}_{(i,j) \in \mathbb{N}^2}$ tels que la série f_n définie par :

$$f_n(x, y) = \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^n c_{ij} T_i \left(\frac{2x - a - b}{b - a} \right) T_j \left(\frac{2y - a - b}{b - a} \right) \quad (97)$$

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

Ce théorème et sa démonstrations se trouvent dans l'ouvrage [14, 15] dans le cas $a = -1$, $b = 1$. La généralisation à a et b ($b > a$) quelconques est immédiate. Par la présence du régulateur qui est \mathcal{C}^∞ nous travaillons, comme dans le modèle φ^4 continu avec des fonctions de que l'on suppose très régulières. On peut alors supposer que cette propriété s'applique à nos fonctions [15]. On peut même, comme en Sec. ?? montrer que nos fonctions semi-discrétisé en temps sont de classe \mathcal{C}^∞ selon les variables ϕ , p_x et p_y (ou leurs équivalents adimensionnés).

7.4.2 Décomposition méthode 1

Soient a, b deux réels ($b > a$). Soit f une fonction de $[a, b]^2$ 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 basée sur la méthode 1D. Supposons, en effet, que l'on veuille effectuer une décomposition à l'ordre $n_c - 1$ et donc écrire

$$f(x, y) \simeq \sum_{i=0}^{n_c-1} \sum_{j=0}^{n_c-1} c_{ij} T_i \left(\frac{2x-a-b}{b-a} \right) T_j \left(\frac{2y-a-b}{b-a} \right) \quad (98)$$

Pour trouver la valeur des coefficients de la matrice $((c_{ij}))_{i,j}$ on peut prendre 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 Eq. (98) en ces points, ce qui revient aussi à écrire,

$$f \left(\frac{a+b}{2} + x_m \frac{a-b}{2}, \frac{a+b}{2} + y_n \frac{a-b}{2} \right) = \sum_{i=0}^{n_c-1} \sum_{j=0}^{n_c-1} c_{ij} T_i(x_m) T_j(y_n) \quad (99)$$

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

$$c_{ij} = \frac{A_{ij}}{n_c^2} \sum_{m=0}^{n_c-1} \sum_{n=0}^{n_c-1} T_i(x_m) T_j(y_n) \times f \left(\frac{a+b}{2} + x_m \frac{b-a}{2}, \frac{a+b}{2} + y_n \frac{b-a}{2} \right), \quad (100)$$

avec la notation

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j = 0 \\ 2 & \text{si } i = 0 \text{ et } j \neq 0 \\ 2 & \text{si } i \neq 0 \text{ et } j = 0 \\ 4 & \text{si } i \neq 0 \text{ et } j \neq 0 \end{cases} \quad (101)$$

Cette méthode est coûteuse puisque pour calculer l'ensemble des coefficients de $((c_{ij}))_{i,j}$ cela demande un algorithme de complexité évoluant en $\mathcal{O}(n_c^2)$. En outre pour ensuite obtenir $f(x, y)$ en tout point $(x, y) \in [a, b]^2$, il faut utiliser un algorithme qui est aussi de complexité $\mathcal{O}(n_c^2)$.

Afin d'obtenir de meilleurs temps de calcul sur les interpolations à précision fixée nous avons implémenté la deuxième méthode suivante.

7.4.3 Décomposition méthode 2

Il existe une méthode plus astucieuse que celle développée précédemment, inspirée de ce qui est mis en place dans le paquet *chebfun* [9] permettant justement de traiter les interpolations de Tchebychev sous Matlab. Cette méthode est développée dans [22].

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

$$\mathcal{F} = \left(\left(f \left(\frac{a+b}{2} + x_m \frac{b-a}{2}, \frac{a+b}{2} + y_n \frac{b-a}{2} \right) \right) \right)_{m,n} \quad (102)$$

et faire de cette matrice une approximation de rang faible par élimination Gaussienne avec l'algorithme suivant, en ε de l'ordre de la précision machine.

-
- 1: Initialisation : $\mathcal{E}^0 = \mathcal{F}$; $\mathcal{F}_0 = 0$; $k = 1$;
 - 2: **while** $\|\mathcal{E}^k\|_\infty < \varepsilon \|\mathcal{E}^0\|_\infty$ **do**
 - 3: $(i_k, j_k) = \operatorname{argmax}_{(i,j)} \{|\mathcal{E}_{i,j}^{k-1}|\}$
 - 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 ($Q \leq n_c$) le rang de l'approximation obtenue. La matrice \mathcal{F} peut être approximée, à la précision machine, par

$$\mathcal{F} \simeq \tilde{\mathcal{F}} = \sum_{j=1}^Q d_j \mathcal{C}^j \mathcal{R}^j \quad (103)$$

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

$$f(x, y) \simeq \sum_{j=1}^Q d_j c^j(y) r^j(x) \quad (104)$$

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

Afin de récupérer la valeur de f en un point quelconque $(x, y) \in [a, b]^2$ nous utilisons simplement la méthode de Clenshaw à une variable sur les fonctions c^j et r^j déjà mentionnée en Sec. ?? . Ainsi l'algorithme de décomposition

possède une complexité en $\mathcal{O}(Qn_c)$ et il en est de même pour le calcul de f en $(x, y) \in [a, b]^2$. Le gain n'est pas extrêmement important pour ce qui est du temps de calcul mais il a eu son importance pour permettre d'atteindre des résultats convenables en des temps raisonnables. En effet nous avons pour une grande partie de la résolution $Q < n_c$ de par la régularité des fonctions.

7.5 Le calcul des intégrales

Pour calculer numériquement les différentes intégrales nous nous servons des propriétés de symétrie que nous avons détaillé des différentes fonctions. Cependant il s'est aussi posé le choix de la méthode à utiliser pour réaliser cette quadrature. Comme les intégrales sont à calculer sur une forme géométrique simple, un carré (ou la moitié d'un carré), nous avons opté pour une version "tensorielle" d'une quadrature à une dimension de Gauss-Legendre. Cependant nous avons eu d'autres idées que nous n'avons pas retenues pour diverses raisons expliquées ci-dessous.

7.5.1 Le choix de la quadrature

On interpole la partie en moment des fonctions avec des polynômes de Tchebychev et on utilise toujours une méthode pseudo-spectrale⁸. 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 pensé au calcul d'intégrale par la *première règle de Fejer* [23] qui permet cela. Les points de quadrature de cette méthode sont identiques à ceux de l'interpolation de Tchebychev. Ainsi on d'affranchi du calcul par la méthode de Clenshaw en $\mathcal{O}(n_c^2)$ de la fonction à intégrer.

Cependant cette méthode s'est avérée être inefficace puisque il faut de manière générale plus de points pour obtenir la même précision qu'une quadrature de Gauss Legendre. De plus le passage le plus long du code est le calcul des intégrales J_3 , \bar{J}_3 , \tilde{J}_3 et cette quadrature ne permet pas de réaliser ce calcul plus vite. En effet pour calculer ces intégrales il faut évaluer les fonctions Δ_k , $\bar{\Delta}_k$, \tilde{Y}_k en des points $(p_x + q_x, p_y + q_y, \phi)$, ce qui, à cause de la somme des impulsion nécessite, d'interpoler. Et ce, avec n'importe quelle discrétisation en impulsion faite sur une grille de points non régulièrement espacés.

Une alternative complètement différente aurait alors consisté à ne pas utiliser une discrétisation en impulsion sur une base de polynôme de Tchebychev mais plutôt une discrétisation en impulsion sur une grille de points régulièrement espacés. Il est alors possible d'écrire en deux dimensions une quadrature qui ne demande de connaître la fonction à intégrer qu'aux points de discrétisations et

ceci même pour la fonction J_3 et ses versions adimensionnées (en effet si p_x et q_x appartiennent à la grille de discrétisation alors $p_x + q_x$ aussi⁹). Cependant les quadratures alors testées (basées sur une triangulation régulière de l'espace et des descriptions des fonctions par éléments finis) demandaient un nombre trop important de points de discrétisation pour obtenir des précisions suffisantes en comparaison de la quadrature de Gauss-Legendre.

7.5.2 Calcul des intégrales I , \bar{I} , \tilde{I}

Soit $a > 0$ un réel. Soit f une fonction de $[-a, a]^2$ 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,

$$\int_{-a}^a \int_{-a}^a f(x, y) dx dy = 4 \int_0^a \int_0^a f(x, y) dx dy \quad (105)$$

Ce qui se calcule en utilisant une quadrature de Gauss-Legendre sur chaque dimension d'intégration,

$$\int_{-a}^a \int_{-a}^a f(x, y) dx dy \simeq a^2 \sum_{i=0}^{n_{gl}} \sum_{j=0}^{n_{gl}} w_i w_j f\left(\frac{a}{2}(\xi_i + 1), \frac{a}{2}(\xi_j + 1)\right) \quad (106)$$

Où $\{\xi_i\}_{i \in [1, n_{gl}]}$ sont les points de la quadrature et $\{w_i\}_{i \in [1, n_{gl}]}$ les poids 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,

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a \int_{-a}^a f(x, y) dx dy \simeq & a^2 \sum_{i=0}^{n_{gl}} \sum_{j=0}^{i-1} w_i w_j 2f\left(\frac{a}{2}(\xi_i + 1), \frac{a}{2}(\xi_j + 1)\right) + \\ & a^2 \sum_{i=0}^{n_{gl}} w_i^2 f\left(\frac{a}{2}(\xi_i + 1), \frac{a}{2}(\xi_i + 1)\right) \end{aligned} \quad (107)$$

Ce qui permet de réduire le temps de calcul en réduisant légèrement le nombre d'opérations à effectuer.

7.5.3 Calcul des intégrales J , \bar{J} , \tilde{J}

Soit $a > 0$. Soit $(b, c) \in [0, a]^2$. Soit maintenant g et h deux fonctions de \mathbb{R}^2 dans \mathbb{R} et g définie sur $[-a, a]^2$ par $g : (x, y) \rightarrow u(x + b, y + c)$. On suppose, comme précédemment, que g 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 2π périodiques. Nous cherchons

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

9. En utilisant la périodicité des fonctions on se ramène encore à un point de la grille quand $p_x + q_x$ en dépasse ou alors on extrapole

alors une formule pour intégrer $g \times h$ sur $[-a, a]^2$. Pour cela remarquons que

$$\begin{aligned} \int_{-a}^a \int_{-a}^a g(x, y) h(x, y) dx dy = \\ \int_0^a \int_0^a [u(x+b, y+c) + u(x+b, y-c)] h(x, y) dx dy + \\ \int_0^a \int_0^a [u(x-b, y+c) + u(x-b, y-c)] h(x, y) dx dy \end{aligned} \quad (108)$$

Et on adopte encore la même quadrature que pour les intégrales I , \tilde{I} , \tilde{I} . Cependant remarquons que ce calcul impose de connaître les valeurs de u en des points $(x \pm b, y \pm c)$ qui sont en dehors du carré $[0, a]^2$. Or, à cause de la discrétisation, u est une fonction que l'on connaît par sa décomposition en série de polynômes de Tchebychev sur $[0, a]^2$, ainsi, on ne peut pas connaître la valeur de u en tout $(x \pm b, y \pm c)$. Lorsque l'on s'intéresse au calcul de J cela ne pose pas de problèmes car on peut utiliser la périodicité des fonctions (raison pour laquelle nous résolvons en premier lieu le système \mathcal{E}_1 dimensionné). En revanche pour \tilde{J} et \tilde{J} , la périodicité est brisée dans les équations et nous sommes obligés d'extrapoler u en dehors de $[0, a]^2$

7.6 Dérivées numériques en champ

Les dérivées numériques en champ ϕ ou $\tilde{\phi}$ sont encore calculées sur 5 points pour essayer d'avoir la meilleure précision possible. Cependant comme nous l'avons mentionné nous avons du dans des premières versions du code utilisé des dérivées sur trois points à cause d'instabilité en bords des grilles de discrétisation. Nous pouvons justifier rapidement la présence de telles instabilités. En effet, comme nous ne disposons pas de conditions aux bords pour nos équations il se trouve que nous sommes obligés d'utiliser des schémas de discrétisation à cinq points fortement décentrés sur les bords, n'utilisant que des points à l'intérieur de la grille.

Or, pour étudier simplement ces schémas nous les appliquons à une équation d'advection du type $\partial_x u + a \partial_t u = 0$ et nous en faisons une analyse de Von-Neumann. Il est donc possible de calculer les facteurs d'amplification de ces schémas, comme en Fig. 10, montrant que les schémas à 5 points peuvent rapidement introduire des instabilités.

Bien que nos équations soient assez éloignées d'une simple équation d'advection cette rapide étude permet de donner une idée de la raison pour laquelle l'utilisation de dérivées à trois points a probablement permis de résoudre des problèmes d'instabilité en bord de grille en champ.

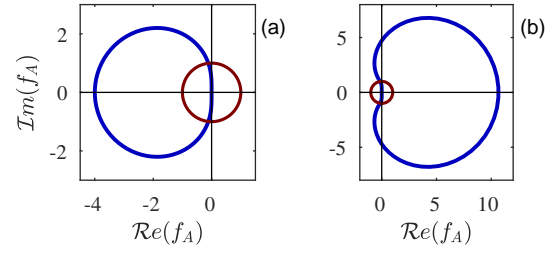


FIGURE 10 – (a) Facteur d'amplification f_A du schéma décentré gauche à 3 points pour la dérivée première obtenu par analyse de Von-Neuman pour $a = 1$ (bleu). Le cercle rouge représente le cercle unité. (b) Même chose pour le schéma décentré gauche à 5 points. Les courbes bleues restent dans le cercle rouge pour des modes de fréquence $|\theta| < \pi/4$ dans les deux cas, mais en dehors du cercle unité f_A conserve une amplitude bien plus modérée dans le cas (a). Ainsi nous pouvons penser que dans notre schéma le schéma à 3 points a plus de chance d'être stable pour un même pas de discrétisation.

8 Resultats : Ising 2D

8.1 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 [19] grain fin sur les boucles en champ. En revanche, à cause de la quadrature précise que l'on souhaite avoir sur le calcul des intégrales J , sans parallélisation, le temps de calcul se trouve évoluer en $\mathcal{O}(Q_{\max} \times n_c^3 \times n_{gl}^2 \times n_\phi)$. Où n_ϕ est le nombre de point de discrétisation en ϕ et $\tilde{\phi}$, et Q_{\max} est le rang maximal nécessaire dans tout le code lors de l'approximation de rang faible de Sec. ???. Pour le vérifier nous avons tracé la courbe Fig. 11

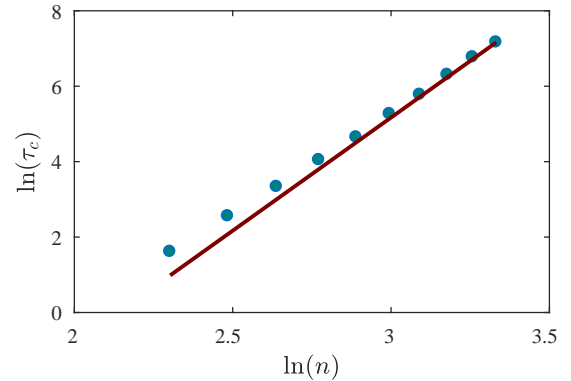


FIGURE 11 – (Points bleus) Logarithme du temps de calcul mesuré τ_c de 10 pas de temps du code en fonction du nombre de points d'intégration et d'interpolation, avec n_ϕ fixé. On a pris $n_c = n_{gl} = n$. (Ligne rouge) droite d'équation $y = 6x + b$ avec b une constante. Il semble que les points se rapproche du comportement de la droite et ainsi que l'on ait $t_c \propto n^6$. Un interpolation linéaire sur les données dont on dispose donne plus précisément $t_c \propto n^{5.7}$ pour les valeurs de n représentées ici.

Ainsi nous pouvons bien constater l'évolution problématique du temps de calcul de cet algorithme de réso-

lution. En revanche nous avons aussi étudié l'effet de la parallélisation sur les points de discrétisation en champ ϕ . Pour un code pouvant être parallélisé au maximum sur 48 coeurs nous obtenons une décroissance en $\sim 1/n_{proc}$ où n_{proc} est le nombre de processeur utilisé lorsque $n_{proc} \lesssim 30$. C'est donc au alentours de ce nombre de points qu'il est préférable d'exécuter le code. Le résultat est représenté dans les courbes de Fig. 12.

Le nombre de processeurs sur lesquels peut être parallélisé efficacement le programme est bridé par le nombre de points de la discrétisation en champ. Ainsi pour tenter d'augmenter la vitesse d'exécution nous avons réalisé une version du code avec une parallélisation MPI [17] de la boucle en champ et une parallélisation OpenMP des boucles de la quadrature de l'intégrale J , \bar{J} ou \tilde{J} . Il s'avère qu'alors il faut communiquer un nombre de données trop important entre les processeurs, le code s'en trouvait alors ralenti, voire inutilisable.

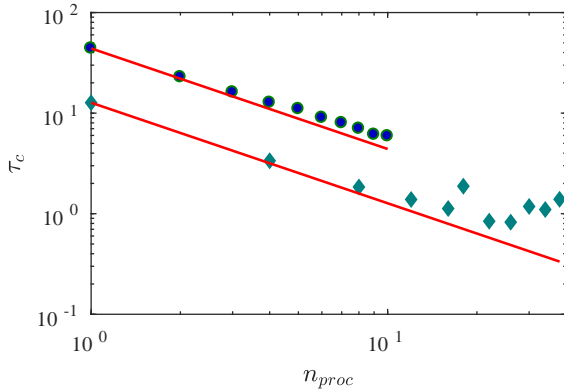


FIGURE 12 – Évolution du temps de calcul τ_c d'un pas de temps de la résolution avec le nombre n_{proc} de processeurs utilisés. (points verts). Ce temps est déterminé en faisant une moyenne sur plusieurs pas de temps de la résolution. En exécutant le code sur les ordinateurs du laboratoire limités, pour ceux que nous avons pu utiliser, à 10 ou 12 coeurs. (losanges verts). En exécutant le code sur le calculateur Mesu. Les courbes continues rouges représentent la décroissance idéale en $1/n_{proc}$. Nous pouvons remarquer que sans même paralléliser sur un nombre de cœur plus important le calcul est plus rapide sur Mesu.

8.2 Problème de précision des intégrales

A cause de la complexité des algorithmes il n'est pas possible de choisir n_c et n_{gl} aussi grand qu'on le souhaite pour obtenir la précision voulue. Au début nous pensions qu'un nombre faible de points suffirait mais il s'avère que ce n'est pas spécialement le cas. En effet nous avons dû utiliser le calculateur Mesu [16] de l'université Pierre et Marie Curie pour pouvoir paralléliser notre programme sur 48 ou 96 coeurs et pouvoir augmenter n_c et n_{gl} sans dépasser les 72 heures permises pour une simulation sur la machine. Nous avons comparé les résultats obtenus pour différentes simulations en fixant $n_c = n_{gl} = n$ (Il s'avère que prendre $n_c \neq n_{gl}$ ne change pas vraiment en mieux les résultats). L'influence de n est en Fig. 13.

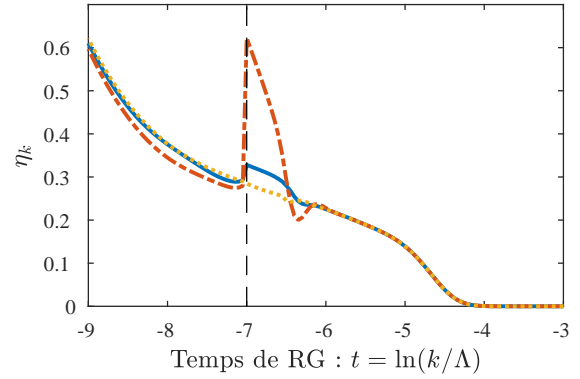


FIGURE 13 – Évolution de η_k en fonction de t pour différentes valeurs du nombre de point d'interpolation et d'intégration (la courbe se lit de gauche à droite). (rouge discontinu) $n = 14$, (bleu continu) $n = 20$, (jaune pointillé) $n = 22$. Le trait vertical noir se trouve à $t_b = \ln(k_b/\Lambda)$ correspondant au passage du problème (\mathcal{P}_2) au (\mathcal{P}_3) . Avec une précision suffisante les courbes devraient être continues cependant ce n'est clairement pas le cas pour $n < 22$. Même pour $n = 22$ il y a une légère différence, mais surtout un épaulement proche de $t = -6$ que l'on ne saurait expliquer.

Ainsi pour $n = 22$ les résultats semblent être relativement corrects avec toutefois quelques irrégularités. Ceci nous confirme qu'une partie des imprécisions sur les résultats que peut permettre de sortir ce code de simulation sont dues au calcul des intégrales. Malheureusement il n'est pas vraiment possible de quantifier cette erreur et de la comparer aux erreurs qui peuvent provenir aussi d'une discrétisation en champ pas assez précise ou d'un pas de temps trop élevé.

8.3 Estimation de la température critique et de l'exposant critique η

Enfin, malgré les erreurs que nous avons pu observer, provenant d'une précision non suffisante dans les calculs des intégrales nous avons tenté de récupérer la valeur de la température critique et de l'exposant η_k du modèle tout de même. Ainsi en utilisant $n_c = n_{gl} = 22$ nous avons obtenu une température critique dans l'encadrement

$$2.350 J/k_B < T_c^{BMW} < 2.375 J/k_B \quad (109)$$

Nous savons que la température critique théorique attendu est de $T_c^{th} = 2.2691 J/k_B$. Nous avons donc un résultat proche du résultat attendu avec une erreur

$$err = \frac{|T_c^{BMW} - T_c^{th}|}{T_c^{th}} \sim 4\% \quad (110)$$

Comme nous pouvons le voir en Fig. 14, en plus de nous donner la température critique, le code nous permet aussi de retrouver η autour de 0.25 pour $d = 2, N = 1$ comme nous l'avions déjà déterminé en Sec. ??

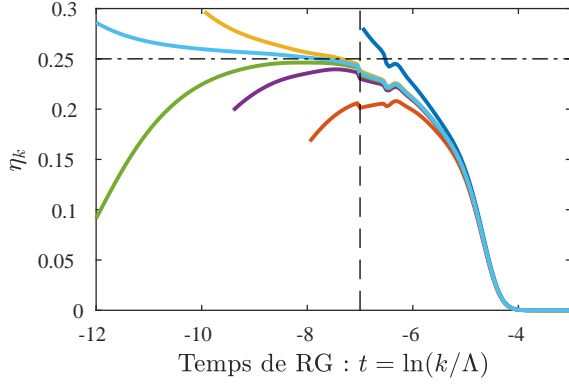


FIGURE 14 – Évolution de η_k en fonction de t pour différentes valeurs de la température T du système (la courbe se lit de droite à gauche). $n_c = 22$, $n_{gl} = 22$. Le trait vertical noir se trouve à $t_b = \ln(k_b/\Lambda)$ correspondant au passage du problème (\mathcal{P}_2) au (\mathcal{P}_3) . Le trait horizontal noir correspond à la valeur théorique $\eta = 0.25$ attendue.

Les résultats sur la température critique T_c dépendent de α et μ à cause de la discrétisation numérique. Ils dépendent aussi du nombre de point de discrétisation en champ utilisé. L'estimation précédente est donc une première estimation grossière que nous avons eu le temps de réaliser en prenant en compte ces variations, en revanche il serait nécessaire d'approfondir l'influence des différents paramètres pour obtenir une valeur plus précise et peut être plus proche de la valeur théorique attendue. Avec l'étude de temps de calcul que nous avons effectuée il serait

9 Conclusion

Nous avons réussi à reprendre un code de simulation d
...

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] 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.
- [4] CW Clenshaw. A note on the summation of chebyshev series. *Mathematics of Computation*, 9(51) :118–120, 1955.
- [5] Richard Courant, Kurt Friedrichs, and Hans Lewy. On the partial difference equations of mathematical physics. *IBM journal of Research and Development*, 11(2) :215–234, 1967.
- [6] Bertrand Delamotte. *An Introduction to the Non-perturbative Renormalization Group*, pages 49–132. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [7] B. Diu, C. Guthmann, and D. Lederer. *Thermodynamique*. Collection Enseignement des sciences. Hermann, 2007.
- [8] Bernard Diu, Claudine Guthmann, Danielle Lederer, and Bernard Roulet. *Éléments de physique statistique*. Hermann, Juillet 1996.
- [9] Tobin A Driscoll, Nicholas Hale, and Lloyd N Trefethen. *Chebfun guide*, 2014.
- [10] Michael E Fisher. Renormalization group theory : Its basis and formulation in statistical physics. *Reviews of Modern Physics*, 70(2) :653, 1998.
- [11] LP Kadanoff. Scaling laws for ising models near critical points. In *pp 24-36 of Proceedings of the 1966 Midwest Conference on Theoretical Physics, Indiana University, May 20–21, 1966. Lichtenberg, DB (ed.). Bloomington, Ind., Indiana University, 1966*. Univ. of Illinois, Urbana, 1967.
- [12] Frédéric Léonard. *Criticalité et phase de brisée de modèles avec symétrie discrète*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2016.
- [13] 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.
- [14] J. C. Mason and D. C. Handscomb. *Chebyshev Polynomials*. CRC Press, Florida, 2003.
- [15] JC Mason. Near-best multivariate approximation by fourier series, chebyshev series and chebyshev interpolation. *Journal of Approximation Theory*, 28(4) :349–358, 1980.
- [16] MeSU. Main page — mesu., 2017. [Online ; accessed 25-July-2017].
- [17] Open MPI. Open source high performance computing, 2012.
- [18] Lars Onsager. Crystal statistics. i. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65 :117–149, Feb 1944.
- [19] C OpenMP. C++ application program interface, 2002.
- [20] Jie Shen. Efficient spectral-galerkin method i. direct solvers of second-and fourth-order equations using legendre polynomials. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 15(6) :1489–1505, 1994.
- [21] JC Toledano and P Toledano. The landau theory of phase transitions world scientific. *Singapore, New Jersey, Hong Kong*, page 451, 1987.
- [22] Alex Townsend. *Computing with functions in two dimensions*. PhD thesis, University of Oxford, 2014.
- [23] Jörg Waldvogel. Fast construction of the fejer and clenshaw–curtis quadrature rules. *BIT Numerical Mathematics*, 46(1) :195–202, 2006.
- [24] Christof Wetterich. Exact evolution equation for the effective potential. *Physics Letters B*, 301(1) :94, 1993.
- [25] Kenneth G Wilson. Renormalization group and critical phenomena. i. renormalization group and the kadanoff scaling picture. *Physical review B*, 4(9) :3174, 1971.
- [26] Kenneth G Wilson. Renormalization group and critical phenomena. ii. phase-space cell analysis of critical behavior. *Physical Review B*, 4(9) :3184, 1971.

A Outils pour le développement des équations

A.1 Notations des normes

On définit les notations utilisées pour les normes. Soit $d \in \mathbb{N}^*$. Soit un vecteur $\mathbf{u} = (u_1, u_2, \dots, u_d) \in \mathbb{R}^d$, on définit

$$\|\mathbf{u}\|_\infty = \max_{i \in \llbracket 1, d \rrbracket} |u_i|, \quad (111)$$

$$\|\mathbf{u}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^d |u_i|^2}. \quad (112)$$

Soit maintenant $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Soit $f \in \mathcal{C}^0(\Omega)$, on note

$$\|f\|_\infty = \sup_{x \in \Omega} |f|. \quad (113)$$

A.2 Transformée de Fourier

On rappelle ici les notations utilisées pour définir les transformées de Fourier. Pour cela on considère φ une application de $L^2(\mathbb{R}^d)^N$. On définit alors la transformée de Fourier de φ , notée $\hat{\varphi}$ ou $\text{TF}[\varphi]$ par,

$$\forall \mathbf{q} \in \mathbb{R}^d \quad \hat{\varphi}(\mathbf{q}) = \text{TF}[\varphi](\mathbf{q}) = \int_{\mathbb{R}^d} \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (114)$$

Avec la relation inverse,

$$\forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^d \quad \varphi(\mathbf{r}) = \text{TF}^{-1}[\hat{\varphi}](\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{q} \quad (115)$$

On utilise alors la notation plus compacte

$$\frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \dots d\mathbf{q} \equiv \int_{\mathbf{q}} \dots \quad \text{et} \quad \int_{\mathbb{R}^d} \dots d\mathbf{r} \equiv \int_{\mathbf{r}} \dots \quad (116)$$

Dans le cas où l'on a des fonctions définies non pas sur \mathbb{R}^d mais sur un domaine $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ fini alors nous aurons les mêmes propriétés avec la relation "d'équivalence"

$$\int_{\mathbf{q}} \dots \xrightarrow{\Omega \text{ fini}} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \dots \quad (117)$$

Remarquons que lorsque l'on introduit la transformée de Fourier (Sec. ??) pour l'utiliser dans le RG les fonctions φ sont tout d'abord définies sur un ouvert Ω fini mais par des considérations physique, en passant à "la limite thermodynamique" on en vient à considérer Ω comme devenant \mathbb{R} tout entier. En outre, dans le cas où $\varphi \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)^N$ (espace des distributions tempérées) on étend la notion de transformée de Fourier $\hat{\varphi}$ de φ à l'aide du crochet de dualité,

$$\forall u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^N) \quad \langle \hat{\varphi}, u \rangle_{\mathcal{S}', \mathcal{S}} = \langle \varphi, \hat{u} \rangle_{\mathcal{S}', \mathcal{S}} \quad (118)$$

A.3 Transformée de Fourier Semi-Discrete (TFSD)

Dans le modèle d'Ising à deux dimensions nous introduisons une transformée de Fourier semi discrète car nous travaillons non pas avec des fonctions mais avec des suites. Ainsi soit $\varphi_{\mathbf{r}} \in \ell^2$. On peut définir $\hat{\varphi} \in L^2(\mathbb{R})$ par

$$\hat{\varphi}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (119)$$

Avec la relation inverse,

$$\varphi_{\mathbf{r}} = \int_{\mathbb{R}^d} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{q} \equiv \int_{\mathbf{q}} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \quad (120)$$

On peut de plus démontrer que cette transformation est une isométrie $\| \cdot \|$.

A.4 Derivation fonctionnelle

A.4.1 Définition

Soit U et V deux espaces de Banach. Soit F une fonctionnelle de U dans V . Soit $f \in U$. On appelle, si elle existe, dérivée (au sens de Fréchet) de la fonctionnelle F prise en f , l'application linéaire continu de $\mathcal{L}(U, V)$, notée $D_f F$ telle que, pour $\varepsilon > 0$,

$$\forall h \in U \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\|F[f + \varepsilon h] - F[f] - \varepsilon D_f F.h\|_V}{\varepsilon} = 0 \quad (121)$$

Dans le cas où $U = L^2(\mathbb{R}^d)^N$ et $V = \mathbb{R}$ alors $D_f F \in U'$ (espace des forme linéaires continues de U) et on sait qu'il existe, par le théorème de Frechet-Riesz, une quantité unique que l'on note $\delta F[f]/\delta f \in U' (\simeq U)$ telle que

$$\forall h \in U \quad D_f F.h = \left\langle \frac{\delta F[f]}{\delta f}, h \right\rangle_U = \int \frac{\delta F[f]}{\delta f(\mathbf{r})} h(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (122)$$

A.4.2 Transformée de Fourier d'une dérivée fonctionnelle

Soit F une fonctionnelle de $U = L^2(\mathbb{R}^d)^N$ dans $(\mathbb{R}, | \cdot |)$ et $\varphi \in U$. Soit $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$. Alors,

$$\frac{\delta F}{\delta \varphi(\mathbf{r})} = \int_{\mathbf{q}} \frac{\delta F}{\delta \hat{\varphi}(-\mathbf{q})} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} = \text{TF}^{-1} \left[\frac{\delta F}{\delta \hat{\varphi}(-\mathbf{q})} \right](\mathbf{r}) \quad (123)$$

Et réciproquement nous avons alors aussi, pour $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$,

$$\frac{\delta F}{\delta \hat{\varphi}(-\mathbf{p})} = \int_{\mathbf{r}} \frac{\delta F}{\delta \varphi(\mathbf{r})} e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} = \text{TF} \left[\frac{\delta F}{\delta \varphi(\mathbf{r})} \right](\mathbf{p}) \quad (124)$$

En effet, par la règle de la chaine de la dérivation de Fréchet nous pouvons écrire,

$$\forall \mathbf{h} \in U \quad D_{\varphi} F.h = D_{\hat{\varphi}} F.D_{\varphi} \hat{\varphi}.h \quad (125)$$

Cependant, $\hat{\varphi}$ est une fonctionnelle de φ (par définition de la TF) de U dans U qui est linéaire en φ . Soit $\varepsilon > 0$,

$$\forall \mathbf{h} \in U \quad \hat{\varphi}[\varphi + \varepsilon \mathbf{h}] - \hat{\varphi}[\varphi] = \varepsilon \hat{\mathbf{h}} \quad (126)$$

Il vient directement, par définition de la dérivation au sens de Frechet, $D_{\varphi}\hat{\varphi}.\mathbf{h} = \hat{\mathbf{h}}$. Ainsi, $D_{\varphi}F.\mathbf{h} = D_{\varphi}F.\hat{\mathbf{h}}$. On peut alors écrire,

$$\forall \mathbf{h} \in U \quad D_{\varphi}F.\mathbf{h} = \int_{\mathbf{q}} \frac{\delta F}{\delta \varphi(\mathbf{q})} \int_{\mathbf{r}} \mathbf{h}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \quad (127)$$

$$\forall \mathbf{h} \in U \quad D_{\varphi}F.\mathbf{h} = \int_{\mathbf{r}} \int_{\mathbf{q}} \frac{\delta F}{\delta \varphi(\mathbf{q})} e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \mathbf{h}(\mathbf{r}) \quad (128)$$

A.5 Opérateurs à noyaux

Nous détaillons dans cette sections quelques propriétés élémentaires des opérateurs à noyaux. Pour plus de détails on pourra regarder [1]. Ceci permet de comprendre quelques unes des étapes dans la détermination des équations de flot et BMW.

A.5.1 Définition

On appelle S un opérateur à noyaux, une application de $(L^2(\mathbb{R}^d))^N$, telle que pour tout $(i, j) \in \llbracket 1, N \rrbracket^2$, il existe une application $A_{i,j} \in L^2(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)$ telle que, pour tout $\varphi \in (L^2(\mathbb{R}^d))^N$ et $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$

$$S[\varphi]_i(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}'} \sum_{j=1}^N A_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}') \quad (129)$$

La matrice $A : (\mathbf{r}, \mathbf{r}') \rightarrow ((A_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'))_{i,j})$ est appelée noyau de S . On identifiera alors dans les notations S et A indépendamment. Par Cauchy-Schwartz cette définition a bien un sens. De plus, on peut montrer que S est un endomorphisme de $(L^2(\mathbb{R}^d))^N$. Pour plus de clarté, nous utiliserons par la suite la notation d'Einstein : on n'écrit plus la somme sur j dans l'expression de S , et de manière générale lorsque un indice est répété dans une expression on suppose qu'il est sommé de 1 à N ,

$$S[\varphi]_i(\mathbf{r}) \equiv \int_{\mathbf{r}'} A_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}') \quad (130)$$

A.5.2 TF d'un opérateur à noyau

Nous avons vu que S définie comme précédemment était un endomorphisme de $(L^2(\mathbb{R}^d))^N$. Ainsi il est possible d'en définir la transformée de Fourier. Introduisons tout d'abord la transformée de Fourier du noyaux, pour $(i, j) \in \llbracket 1, N \rrbracket^2$ et $(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \in (\mathbb{R}^d)^2$

$$\hat{A}_{i,j}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}') = \iint_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} A_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}'.\mathbf{r}'} \quad (131)$$

Ce qui implique alors

$$\hat{S}[\varphi]_i(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{q}'} \hat{A}_{i,j}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}') \hat{\varphi}_j(\mathbf{q}') \quad (132)$$

En effet, ceci se démontre en développant le calcul de la transformée de Fourier. Soit $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$, $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$

$$\hat{S}[\varphi]_i(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{r}} \int_{\mathbf{r}'} A_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \varphi_j(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \quad (133)$$

$$\hat{S}[\varphi]_i(\mathbf{q}) = \iint_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \int_{\mathbf{q}'} A_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \hat{\varphi}_j(\mathbf{q}') e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}'} \quad (134)$$

$$\hat{S}[\varphi]_i(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{q}'} \hat{\varphi}_j(\mathbf{q}') \left\{ \iint_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} A_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}.\mathbf{r}'} \right\} \quad (135)$$

$$\hat{S}[\varphi]_i(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{q}'} \hat{\varphi}_j(\mathbf{q}') \hat{A}_{i,j}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}') \quad (136)$$

A.5.3 Composition de deux opérateurs

Considérons deux opérateurs à noyaux, S et T de noyaux respectifs A et B . La composition de ces deux opérateurs est définie, pour $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$, par

$$S.T[\varphi]_i(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{r}'} \left\{ \int_{\mathbf{r}''} A_{i,k}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') B_{k,j}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \right\} \varphi_j(\mathbf{r}') \quad (137)$$

On notera alors aussi pour $(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \in (\mathbb{R}^d)^2$

$$(A.B)_{i,j}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int_{\mathbf{r}''} A_{i,k}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') B_{k,j}(\mathbf{r}'', \mathbf{r}') \quad (138)$$

Par transformée de Fourier, et par un calcul analogue à celui fait pour un simple noyau, il vient, pour $(\mathbf{q}, \mathbf{q}') \in (\mathbb{R}^d)^2$,

$$\widehat{(A.B)}_{i,j}(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \int_{\mathbf{q}''} \hat{A}_{i,k}(\mathbf{q}, \mathbf{q}'') \hat{B}_{k,j}(-\mathbf{q}'', \mathbf{q}') \quad (139)$$

A.5.4 Trace d'un opérateur à noyau

On définit la trace d'un opérateur S de noyaux A par

$$\text{Tr } S \equiv \text{Tr } A = \int_{\mathbf{r}} A_{i,i}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \quad (140)$$

Nous pouvons alors de manière similaire à ce qui a été fait pour démontrer l'expression de la transformée de Fourier d'un opérateur à noyau, calculer la relation sur la trace de la transformée de Fourier

$$\text{Tr } \hat{A} = \int_{\mathbf{q}} \hat{A}_{i,i}(\mathbf{q}, -\mathbf{q}) \quad (141)$$

A.5.5 Inverse d'un opérateur à noyau

Soit S un opérateur à noyau de noyaux A . On fait l'hypothèse, sans justifications, que pour les systèmes physiques que l'on étudie il existe une grandeur appelée l'inverse de S , également un opérateur à noyau, endomorphisme de $(L^2(\mathbb{R}^d))^N$, notée S^{-1} telle que, pour $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ et $\varphi \in (L^2(\mathbb{R}^d))^N$,

$$\forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^d \quad S.S^{-1}[\varphi]_i(\mathbf{r}) = \varphi_i(\mathbf{r}) \quad (142)$$

Si A est le noyau de S , on note A^{-1} le noyau de S^{-1} .

B Les formalismes du RG et NPRG

Nous détaillons dans les grandes lignes ci-après comment nous aurions pu utiliser le RG pour parvenir à calculer la fonction de partition de systèmes décrits avec des champs. Nous définissons ensuite les systèmes possédant une symétrie $O(N)$ afin de leur appliquer le NPRG, qui découle des principes du RG, et l'approximation BMW que nous avons utilisé pour faire des calculs numériques.

Pour conserver des expressions mathématiques simples nous introduirons généralement le terme $k_B T$ des équations dans le hamiltonien et dans l'action. C'est à dire qu'au lieu d'écrire $\mathcal{H}/(k_B T)$ nous écrirons simplement \mathcal{H} dans la fonction de partition, par exemple.

B.1 Le groupe de renormalisation (RG)

B.1.1 Transformée de Fourier

Il nous faut commencer par définir la transformée de Fourier du champ φ appartenant à $L^2(\Omega)$ par

$$\begin{aligned}\hat{\varphi}_{\mathbf{p}} &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \\ \varphi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{\varphi}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}}\end{aligned}\quad (143)$$

On appelle \mathbf{p} la variable de moment. On fait l'hypothèse qu'il existe un réel Λ tel que pour $\|\mathbf{p}\|_{\infty} > \Lambda$, $\hat{\varphi}(\mathbf{p}) \simeq 0$. On considère donc $\mathbf{p} \in [0, \Lambda]^d$. Ceci signifie que φ est une fonction suffisamment régulière et cette valeur Λ correspond physiquement à l'inverse de la plus petite longueur caractéristique du système (comme le pas du réseau par exemple). En pratique on suppose que dans la limite thermodynamique on étudie des systèmes macroscopiques tels que $|\Omega| \gg 1/\Lambda^d$. Ainsi on fait l'approximation physique selon laquelle les moments ne sont plus des variables discrètes mais continues avec les équivalences

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\Omega|} \sum_{\mathbf{p}} &\rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} \dots d\mathbf{p} \equiv \int_{\mathbf{p}} \dots \\ \int_{\Omega} \dots d\mathbf{r} &\rightarrow \int_{\mathbb{R}} \dots d\mathbf{r} \equiv \int_{\mathbf{r}} \dots\end{aligned}\quad (144)$$

Pour φ fixé la suite $\hat{\varphi}_{\mathbf{p}}$ dans ℓ^2 devient une fonction $\hat{\varphi} : \mathbf{p} \rightarrow \hat{\varphi}(\mathbf{p})$ de $L^2(\mathbb{R})$. Remarquons aussi que si $\hat{\mathcal{H}}$ est la transformée de Fourier de \mathcal{H} alors nous avons toujours

$$\mathcal{Z}[T; \mathbf{b}] = \int \mathcal{D}\hat{\varphi} \exp\left(-\hat{\mathcal{H}}[\hat{\varphi}, \mathbf{b}]\right). \quad (145)$$

Dès lors qu'il n'y aura pas d'ambiguïté possible, nous pourrions donc oublier à partir de maintenant la notation avec le chapeau en notant que c'est la variable utilisée \mathbf{r} ou \mathbf{p} (ou aussi parfois \mathbf{q} pour les moments) qui nous permet de savoir si l'on travaille avec la fonction considérée ou sa transformée de Fourier.

B.1.2 Idée générale

Les principales idées du RG ont été développées par Wilson [25, 26, 10]. L'objectif est de calculer la fonction de partition à champ magnétique extérieur \mathbf{b} nul,

$$\mathcal{Z}[T] = \int \mathcal{D}\varphi \exp(-H[\varphi]). \quad (146)$$

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

$$\varphi_{k,>}(\mathbf{p}) = \begin{cases} \varphi(\mathbf{p}) & \text{si } \mathbf{p} \in [k, \Lambda] \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (147)$$

Ceci permet de définir un hamiltonien effective H_k ,

$$H_k[\varphi_{k,<}] \equiv \int \mathcal{D}\varphi_{k,<} \exp\{S[\varphi_{k,>} + \varphi_{k,<}]\}, \quad (148)$$

(on oublie la dépendance en \mathbf{b} dans la notation), et de réécrire la fonction de partition comme

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi_{k,<} \exp\{-H_k[\varphi_{k,<}]\}. \quad (149)$$

De manière générale l'hamiltonien H ne s'exprime pas seulement en fonction du champ φ mais son expression contient aussi des constantes de couplage qui caractérisent la physique du système. Dans le modèle d'Ising 2D, J est une constante de couplage par exemple. Ces constantes sont notées $\{g_i\}_i$ avec $i \in \mathbb{N}$. On écrit alors $H[\varphi] = H[\varphi; \{g_i\}]$. Le nouvel hamiltonien $H_k[\varphi_{k,<}]$ peut alors s'exprimer aussi sous la forme $H_k[\varphi_{k,<}; \{g_{k,i}\}_i]$ où $\{g_{k,i}\}_i$ sont de nouvelles constantes de couplage.

Bien entendu, il n'est pas directement possible de calculer H_k pour k quelconque, sinon le problème serait résolu en calculant S_0 . On considère alors plutôt une intégration infinitésimale entre $[\Lambda - d\Lambda, \Lambda]$ pour obtenir le nouvel hamiltonien H_{k_1} , où $k_1 = \Lambda - d\Lambda$. On introduit aussi $s_1 = \Lambda/k_1$. Ce calcul là, contrairement au calcul direct pour k quelconque, peut être réalisé grâce à des approximations comme nous le détaillerons ensuite. Maintenant, avec l'expression de ce nouvel hamiltonien, on réalise ce que l'on appelle un adimensionnement qui se déroule en trois étapes listées ci-dessous.

Tout d'abord, comme \mathbf{p} est homogène à L^{-1} (ou L est la dimension d'une longueur) on introduit $\tilde{\mathbf{p}} = s_1 \mathbf{p}$. Ensuite on montre que le champ $\varphi_{k_1,<}$ est homogène à $L^{d-2-\eta}$ (avec η l'exposant critique défini dans l'introduction), on pose donc $\tilde{\varphi}_{k_1,<}$ tel que $\varphi_{k_1,<}(\mathbf{p}) = s_1^{-d+2+\eta} \tilde{\varphi}_{k_1,<}(\tilde{\mathbf{p}})$ pour tout $\mathbf{p} \in [0, \Lambda]^d$. Enfin la constante $g_{k_1,i}$ pour tout $i \in \mathbb{N}$ est aussi homogène à L^{b_i} avec b_i une

constante. On écrit donc de nouvelles constantes de couplage $\{\tilde{g}_{k_1,i}\}_i$ telles que $g_{k_1,i} = s_1^{-b_i} \tilde{g}_{k_1,i}$. Ceci définit un hamiltonien \tilde{H} ,

$$\tilde{H}_{k_1}[\tilde{\varphi}_{k_1,<}; \{\tilde{g}_{k_1,i}\}_i] = H_{k_1}[\varphi_{k_1,<}; \{g_{k_1,i}\}_i] \quad (150)$$

La fonction de partition (dont il ne sert en fait à rien de connaître le préfacteur numérique) est alors simplement exprimée comme

$$\mathcal{Z} \propto \int \mathcal{D}\tilde{\varphi}_{k_1,<} \exp \left\{ -\tilde{H}_{k_1}[\tilde{\varphi}_{k_1,<}, \{\tilde{g}_{k_1,i}\}_i] \right\}. \quad (151)$$

Ce changement est purement technique cependant il a un fondement physique puisqu'il permet de faire comme si \tilde{H}_{k_1} était l'hamiltonien d'un "nouveau système" identique au système originel étudié mais dans lequel toutes les échelles de moment ont été dilatées d'un facteur s_1 et les échelles de longueur alors réduites d'un facteur s_1 . Or on rappelle que pour une transition de phase du second ordre la longueur ξ du système originel diverge pour $T \rightarrow T_c$. Ce "nouveau système" possède alors une longueur de corrélation $\xi_1 = \xi/s_1$ qui diverge aussi à la transition : $\xi, \xi_1 \rightarrow \infty$. Ainsi, à la transition de phase, et uniquement à la transition, les deux systèmes possèdent la même physique. Si ξ ne divergeait pas (et donc si l'on n'était pas à la transition de phase) ce ne serait pas le cas puisque alors $\xi_1 \neq \xi$, et deux systèmes avec des longueurs de corrélations différentes, ne représenteraient pas la même chose.

Pour réaliser l'intégration complète sur $[0, \Lambda]$ on peut donc ensuite itérer ce processus de transformations infinitésimales en repartant de l'expression de \mathcal{Z} en fonction de $\tilde{H}_{k_1}[\tilde{\varphi}_{k_1,<}, \{\tilde{g}_{k_1,i}\}_i]$. On reproduit le même procédé, par exemple au deuxième pas de l'itération, en calculant l'intégration infinitésimale entre $[\Lambda - 2d\Lambda, \Lambda - d\Lambda]$ avec $k_2 = \Lambda - 2d\Lambda$. A la fin de cette deuxième itération nous avons donc intégré sur $[\Lambda - 2d\Lambda, \Lambda]$.

B.1.3 Notion de point fixe

On introduit à l'itération $p \in \mathbb{N}$ - itération à laquelle on a intégré sur $[k_p, \Lambda]$ - l'opérateur O_p qui envoie $\{\tilde{g}_i\}_i$ sur $\{\tilde{g}_{k_p,i}\}_i$. L'hypothèse fondamentale du RG, qui n'est pas prouvée mais toujours vérifiée, est qu'il existe un point fixe de O_p pour $p \rightarrow \infty$, si l'on est à la température critique (et/ou pression critique, ...). Ceci signifie plus exactement qu'il existe $\{\tilde{g}_i^*\}_i$ tel que

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \tilde{g}_{k,i} = \lim_{\substack{p \rightarrow \infty \\ d\Lambda \rightarrow 0}} \tilde{g}_{k_p,i} = \tilde{g}_i^* \quad (152)$$

Sans entrer plus en profondeur dans les calculs du RG on admet que l'on peut montrer que l'existence de ce point fixe explique l'universalité des exposants critiques [6]. Deux systèmes avec les mêmes propriétés de symétries auront le même point fixe, ce qui revient à dire d'une autre manière qu'ils auront bien un comportement, une physique, 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 développements du hamiltonien en puissances de ces constantes adimensionnées à chaque itération. Ce sont ces approximations qui permettent de faire des calculs mais elles limitent les applications possibles. Le NPRG développe alors une technique reprenant la même idée de calcul mais sans faire ces approximations, grâce à une astuce.

C Fonctions de corrélation dans le calcul du NPRG

Dans le formalisme du NPRG il est possible de définir un tenseur de fonctions de corrélations connectées à deux points¹⁰. On considère pour cela \mathbf{r}_1 et \mathbf{r}_2 deux positions. On définit $i_1 \in \llbracket 1, N \rrbracket$ un indice représentant un degré de liberté à la position \mathbf{r}_1 . De même on définit aussi i_2 .

$$G_{c,k,i_1 i_2}^{(2)}[\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{h}] \equiv \frac{\delta^2 W_k[\mathbf{b}]}{\delta b_{i_1}(\mathbf{r}_1) \delta b_{i_2}(\mathbf{r}_2)}. \quad (153)$$

En transformée de Fourier elle devient

$$G_{c,k,i_1 i_2}^{(2)}[\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2; \mathbf{h}] \equiv \frac{\delta^2 W_k[\mathbf{b}]}{\delta b_{i_1}(-\mathbf{p}_1) \delta b_{i_2}(-\mathbf{p}_2)} \quad (154)$$

Cette fonction de corrélations ressemble fortement celle à deux points que nous avons introduite pour le modèle d'Ising 2D à la subtilité que l'on utilise W et non pas \mathcal{Z} dans le numérateur. On comprendra donc qu'elle contiennent aussi l'information sur les exposants critiques η et ν . On s'intéresse plus particulièrement à l'expression de $G_{c,k,ii}^{(2)}$ pour $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ pris en $\{\mathbf{p}, -\mathbf{p}\}$. En effet seul ce cas là a une utilité dans les équations de flot. On notera donc cette expression, pour être concis,

$$G_{k,ii}[\mathbf{p}; \mathbf{h}] \equiv G_{c,k,ii}^{(2)}[\mathbf{p}, -\mathbf{p}; \mathbf{h}] = \frac{\delta^2 W_k[\mathbf{h}]}{\delta b_i(-\mathbf{p}) \delta b_i(\mathbf{p})}. \quad (155)$$

On montre alors qu'au sens d'inverse des opérateurs

$$G_k[\mathbf{p}; \mathbf{h}] = \left(\Gamma_k^{(2)}[\mathbf{p}, \phi] + \mathcal{R}_k(\mathbf{p}) \right)^{-1} \quad (156)$$

Dans le texte principal nous avons posé ce résultat comme une définition par simplicité. En revanche

10. Notons qu'il est très facile d'extrapoler la définition suivante à un tenseur de fonctions de corrélations connectées à $n \in \mathbb{N}$ points

D Modélisation du modèle d'Ising 2D avec des champs

Commençons alors la transformation pour obtenir une fonction de partition s'exprimant avec des champs et décrivant le modèle d'Ising 2D. Afin d'écarter un problème qui apparaîtrait dans la suite des calculs nous commençons par définir un hamiltonien du modèle d'Ising légèrement modifié. Pour \mathcal{M} micro-état, on pose

$$H_\mu(\mathcal{M}) = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - \mu N_S \quad (157)$$

$$H_\mu(\mathcal{M}) = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - \mu \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^2 \quad (158)$$

Avec les notations du modèle d'Ising, $L+1$ étant le nombre de spins dans une direction, la somme sur \mathbf{r} signifie

$$\sum_{\mathbf{r}} \dots \equiv \sum_{m=0}^L \sum_{n=0}^L \dots, \quad (159)$$

où $\mathbf{r} \equiv m\hat{\mathbf{e}}_x + n\hat{\mathbf{e}}_y$. La pas a du réseau n'apparaît pas car, pour simplifier les calculs, on exprime ici toutes les longueurs en unité du pas du réseau. Le nombre $N_s \equiv (L+1)^2$ est le nombre total de spins. Physiquement, ajouter une constante à H ne change rien car cela ne fait que décaler l'origine arbitraire des énergies. En revanche cela a un avantage mathématique. En effet, on pose $A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}$ la matrice définie implicitement dans $\mathcal{M}_{L+1, L+1}(\mathbb{R})$ (espace des matrices réelles carrés $L+1$ par $L+1$) par

$$H_\mu = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)} S_{\mathbf{r}'} \quad (160)$$

Il est alors possible de choisir μ suffisamment grand pour que $A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}$ soit à diagonale strictement dominante et donc inversible. Il suffit de prendre $\mu > 2J$. Cette condition d'inversibilité sera primordiale pour pouvoir aboutir à un résultat.

Maintenant que cette première étape a été réalisée on peut réaliser la transformée de Hubbard-Stratanovitch nous permettant d'écrire la fonction de partition du système avec des variables définies dans \mathbb{R} . Pour cela commençons par écrire la fonction de partition du système modèle (en intégrant le terme $(1/k_B T)$ dans H_μ),

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathcal{M}} e^{-H_\mu(\mathcal{M})} = \sum_{\mathcal{M}} \exp \left(-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} S_{\mathbf{r}} A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)} S_{\mathbf{r}'} \right). \quad (161)$$

La transformée de Hubbard-Stratanovitch est, en fait, une simple intégration gaussienne *inverse*, il vient,

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &\propto \sum_{\mathcal{M}} \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \varphi_{\mathbf{r}} (A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)})^{-1} \varphi_{\mathbf{r}'} + \sum_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}} \\ \mathcal{Z} &\propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \varphi_{\mathbf{r}} (A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)})^{-1} \varphi_{\mathbf{r}'} + \sum_{\mathbf{r}} \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}}))}. \end{aligned} \quad (162)$$

Les variables $\phi_{\mathbf{r}}$ sont définies dans \mathbb{R} tout entier. Cependant cela soulève un autre problème. En effet nous ne pouvons pas exprimer facilement $(A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)})^{-1}$ (qui existe bien car $A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}$ est inversible). Pour cela il est pratique de réaliser une transformée de Fourier Semi-Discrete (TFSD - c.f. Ann. A.3) en posant, pour $\mathbf{q} \in [-\pi, \pi]^2$,

$$\varphi(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} \varphi_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad \text{et} \quad \varphi_{\mathbf{r}} = \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \quad (163)$$

Ainsi, comme expliqué ci-après, la matrice (qui devient un opérateur en TFSD) $(A^{(\mu)})^{-1}$ est "diagonal" en TFSD. Montrons le en commençant par poser K_μ l'expression

$$K_\mu = \sum_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'} \varphi_{\mathbf{r}} (A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}) \varphi_{\mathbf{r}'} \quad (164)$$

En utilisant la définition implicite de $(A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)})$ et en passant en TFSD nous obtenons

$$\begin{aligned} K_\mu &= -J\beta \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \varphi(\mathbf{q}) \varphi(\mathbf{q}') e^{i(\mathbf{q}\mathbf{r} + \mathbf{q}'\mathbf{r}')} \\ &\quad - \mu\beta \sum_{\mathbf{r}} \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \varphi(\mathbf{q}) \varphi(\mathbf{q}') e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}')\mathbf{r}} \end{aligned} \quad (165)$$

Notons donc simplement, pour $\nu = x, y$

$$\lambda_\mu(\mathbf{q}) = -\beta \left\{ J \sum_{\nu} e^{\pm i\mathbf{q}\hat{\mathbf{e}}_\nu} + \mu \right\} \quad (166)$$

Ainsi, il vient,

$$K_\mu = \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \varphi(\mathbf{q}) \varphi(\mathbf{q}') \lambda_\mu(\mathbf{q}') \sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{q} + \mathbf{q}')\mathbf{r}} \quad (167)$$

$$K_\mu = \iint_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} \varphi(\mathbf{q}) \varphi(\mathbf{q}') \lambda_\mu(\mathbf{q}') D_{N_S}(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \quad (168)$$

En définissant le noyau de Dirichlet D_{N_S} par

$$\forall \mathbf{p} \in [-\pi, \pi]^d \quad D_{N_S}(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \quad (169)$$

Ainsi, en prenant la limite $N_S \rightarrow +\infty$ et en raisonnant au sens des distributions, par les propriétés du noyau de Dirichlet, il vient formellement

$$\lim_{N_S \rightarrow +\infty} K_\mu = - \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \lambda_\mu(\mathbf{q}) \varphi(-\mathbf{q}) \quad (170)$$

Dans la suite nous ferons l'hypothèse de la limite thermodynamique, selon laquelle N_S est suffisamment grand pour que l'on écrive, par abus de notation, $K_\mu = \lim_{N_S \rightarrow +\infty} K_\mu$.

Nous obtenons alors

$$K_\mu = - \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \lambda_\mu(\mathbf{q}) \varphi(-\mathbf{q}) \quad (171)$$

Et on en déduit la transformée de Fourier de $A_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}^{(\mu)}$

$$A(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \begin{cases} \lambda_\mu(\mathbf{q}) & \text{si } \mathbf{q}' = -\mathbf{q} \\ 0 & \text{si } \mathbf{q}' \neq -\mathbf{q} \end{cases} \quad (172)$$

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

$$\gamma(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} (\cos(q_x) + \cos(q_y)) \quad (173)$$

L'expression de λ_μ se trouve alors être

$$\lambda_\mu(\mathbf{q}) = 2\beta (2J\gamma(\mathbf{q}) + \mu) \quad (174)$$

Par les propriétés de la TFSD il vient,

$$\mathcal{Z} \propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} \exp(-\mathcal{H}_\mu[\varphi]) , \quad (175)$$

avec l'hamiltonien \mathcal{H}_μ s'écrivant :

$$\mathcal{H}_\mu[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \frac{1}{\lambda_\mu(\mathbf{q})} \varphi(-\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{r}} \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) \quad (176)$$

Par isometrie de la transformation de Fourier, et donc par le théorème de Parseval, nous réécrivons \mathcal{H}_μ sous la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\mu[\varphi] = & \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{\lambda_\mu(\mathbf{q})} - \frac{1}{\lambda_\mu(0)} \right] \varphi(-\mathbf{q}) \\ & + \sum_{\mathbf{r}} \left[\frac{1}{2\lambda_\mu(0)} \varphi_{\mathbf{r}}^2 - \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) \right] \end{aligned} \quad (177)$$

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

$$\varphi \rightarrow 2\delta\sqrt{\beta J} \varphi \quad (178)$$

On obtient alors

$$\mathcal{H}_\mu[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \varepsilon_0(\mathbf{q}) \varphi(-\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{r}} U(\varphi(\mathbf{r})) \quad (179)$$

Avec, en posant $\tilde{\mu} = \mu/(2J)$ et $\tilde{\beta} = 2\beta J$,

$$\varepsilon_0(\mathbf{q}) = \delta^2 \frac{1 - \gamma(\mathbf{q})}{(\gamma(\mathbf{q}) + \tilde{\mu})(1 + \tilde{\mu})} \quad (180)$$

$$U(\phi) = \delta^2 \frac{1}{1 + \tilde{\mu}} \frac{1}{2} \phi^2 - \ln \left(\cosh \left(\delta \sqrt{2\tilde{\beta}} \phi \right) \right) \quad (181)$$

E Propriétés des fonctions à discrétiser

E.1 Symétries et périodicité des fonctions inconnues

Partons de l'équation BMW Eq. (39).

$$\partial_t \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = J_3(\mathbf{p}, \phi) \left(\partial_\phi \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right)^2 - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \quad (182)$$

Soit u une application linéaire, difféomorphisme de classe \mathcal{C}^1 de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R}^d tel que $\det(\text{Jac}(u)) = \pm 1$. Supposons que $\mathcal{R}_k(u(\mathbf{q})) = \mathcal{R}_k(\mathbf{q})$ pour tout $\mathbf{q} \in \mathbb{R}^d$ et $k \in]0, \Lambda]$. On pose le schéma semi-discrétisé d'Euler en temps de l'équation précédente. Il vient, pour $n \in \mathbb{N}$,

$$\Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) + \delta t \left\{ J_3(\mathbf{p}, \phi) \left(\partial_\phi \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right)^2 - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right\} \quad (183)$$

Soit $\phi \in \mathbb{R}$ fixé. Supposons que pour tout $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$ nous ayons $\Gamma_{k_0}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) = \Gamma_\Lambda^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) = \Gamma_\Lambda^{(2)}(\mathbf{p}, \phi)$. Montrons par induction qu'alors pour tout $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$, $\Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) = \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi)$ pour tout $n \in \mathbb{N}$.

Soit $n \in \mathbb{N}$, $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$ supposons la propriété au vraie au rang n , il vient directement

$$\partial_\phi \Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) = \partial_\phi \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \quad \text{et} \quad \partial_\phi^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) = \partial_\phi^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \quad (184)$$

De plus nous avons

$$\begin{aligned} J_3(u(\mathbf{p}), \phi) &= \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}) \frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}) + \mathbf{q}, \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(u(\mathbf{p}) + \mathbf{q})} \left(\frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}, \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q})} \right)^2 \\ J_3(u(\mathbf{p}), \phi) &= \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}) \frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}) + u \circ u^{-1}(\mathbf{q}), \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(u(\mathbf{p}) + u \circ u^{-1}(\mathbf{q}))} \left(\frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}, \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q})} \right)^2 \\ J_3(u(\mathbf{p}), \phi) &= \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}) \frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p} + u^{-1}(\mathbf{q})), \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(u(\mathbf{p} + u^{-1}(\mathbf{q})))} \left(\frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}, \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q})} \right)^2 \\ J_3(u(\mathbf{p}), \phi) &= \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}) \frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p} + u^{-1}(\mathbf{q}), \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{p} + u^{-1}(\mathbf{q}))} \left(\frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}, \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q})} \right)^2 \end{aligned} \quad (185)$$

On pose le changement de variable $\mathbf{q}' = u^{-1}(\mathbf{q})$. Nous avons alors $\mathbf{q} = u(\mathbf{q}')$ et les relations

$$\mathcal{R}_{k_n}(u(\mathbf{q}')) = \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}'), \quad \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(u(\mathbf{q}')) = \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}') \quad \text{et} \quad \Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{q}'), \phi) = \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}', \phi) \quad (186)$$

De plus si l'intégrale sur \mathbf{q} est effectuée sur un domaine fini \mathcal{D} alors on suppose aussi que $u(\mathcal{D}) = \mathcal{D}$ (i.e. que $u|_{\mathcal{D}}$ est aussi un \mathcal{C}^1 difféomorphisme). Il vient, par unitarité du jacobien de u , l'expression de l'intégrale

$$\begin{aligned} J_3(u(\mathbf{p}), \phi) &= \int_{\mathbf{q}'} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}') \frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p} + \mathbf{q}', \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{p} + \mathbf{q}')} \left(\frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}', \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}')} \right)^2 \\ J_3(u(\mathbf{p}), \phi) &= J_3(\mathbf{p}, \phi) \end{aligned} \quad (187)$$

Or nous avons

$$\begin{aligned} \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) &= \Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) + \delta t \left\{ J_3(u(\mathbf{p}), \phi) \left(\partial_\phi \Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) \right)^2 - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) \right\} \\ \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) &= \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) + \delta t \left\{ J_3(\mathbf{p}, \phi) \left(\partial_\phi \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right)^2 - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right\} \\ \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(u(\mathbf{p}), \phi) &= \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \end{aligned} \quad (188)$$

Ainsi nous avons montré la propriété.

Remarquons que l'hypothèse $\mathcal{R}_k(u(\mathbf{p})) = \mathcal{R}_k(\mathbf{p})$ est équivalente à l'hypothèse $\varepsilon(u(\mathbf{p})) = \varepsilon(\mathbf{p})$ pour tout $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$ de par l'expression du régulateur. Ainsi dans la première étude, pour le modèle φ^4 , $\varepsilon(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2$, et nous pouvons appliquer la propriété précédente pour tout u ayant la forme d'une rotation dans \mathbb{R}^d : nous avons une symétrie centrale. Dans la deuxième partie, comme $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_0(\mathbf{p})$ nous pouvons appliquer la propriété précédente, avec $\varepsilon(u(\mathbf{p})) = \varepsilon(\mathbf{p})$ pour les fonction u suivantes,

$$\begin{aligned} u : (p_x, p_y) \in \mathbb{R}^2 &\rightarrow (-p_x, p_y) \in \mathbb{R}^2 \\ u : (p_x, p_y) \in \mathbb{R}^2 &\rightarrow (p_x, -p_y) \in \mathbb{R}^2 \\ u : (p_x, p_y) \in \mathbb{R}^2 &\rightarrow (p_y, p_x) \in \mathbb{R}^2 \end{aligned} \quad (189)$$

De plus le même raisonnement fonctionne aussi pour montrer la 2π -périodicité des fonctions en impulsion dans le cas Ising 2D et montrer qu'elles peuvent bien être définies sur \mathbb{R}^2 tout entier.

Soit maintenant $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^d$. Supposons que pour tout $\phi \in \mathbb{R}$, nous ayons $\Gamma_{k_0}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) = \Gamma_{\Lambda}^{(2)}(u(\mathbf{p}), -\phi) = \Gamma_{\Lambda}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi)$ (i.e. que ce soit une fonction paire). Montrons que pour tout $\phi \in \mathbb{R}$, $\Gamma_{k_n}^{(2)}(u(\mathbf{p}), -\phi) = \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi)$.

Soit $n \in \mathbb{N}$, $\phi \in \mathbb{R}$, supposons la propriété vraie au rang n , il vient

$$\partial_{\phi} \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) = -\partial_{\phi} \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \quad \text{et} \quad \partial_{\phi}^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) = \partial_{\phi}^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \quad (190)$$

De plus nous avons

$$I_2(-\phi) = \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}, -\phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q})} \right)^2 = \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q}) \left(\frac{1}{\Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{q}, \phi) + \mathcal{R}_{k_n}(\mathbf{q})} \right)^2 = I_2(\phi) \quad (191)$$

Ce qui vaut aussi pour $J_3(\mathbf{p}, -\phi) = J_3(\mathbf{p}, \phi)$. Ainsi

$$\begin{aligned} \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) &= \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) + \delta t \left\{ J_3(\mathbf{p}, -\phi) \left(\partial_{\phi} \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) \right)^2 - \frac{1}{2} I_2(-\phi) \partial_{\phi}^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) \right\} \\ \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) &= \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) + \delta t \left\{ J_3(\mathbf{p}, \phi) \left(-\partial_{\phi} \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right)^2 - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_{\phi}^2 \Gamma_{k_n}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right\} \\ \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(\mathbf{p}, -\phi) &= \Gamma_{k_{n+1}}^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \end{aligned} \quad (192)$$

Nous avons donc montré la propriété de parité. Remarquons que lorsque l'on utilise des fonctions ρ cette propriété ne tient plus puisque $\rho > 0$.

E.2 Régularité

On considère le schéma semi-discret en temps de l'équation Eq. (??). On veut montrer pour un pas de temps n donné la fonction \tilde{Y}_{k_n} est une fonction de classe \mathcal{C}^{∞} sur $[0, +\infty[$ et \tilde{W}_{k_n} sur $[0, +\infty[$. On suppose que l'on ne rencontre jamais de pôle du propagateur, c'est à dire qu'il n'existe aucun couple $(\tilde{p}, \tilde{\rho})$ tel que $(\tilde{G}_{k_n}(\tilde{p}, \tilde{\rho}))^{-1} = 0$. Pour cela on procède par récurrence. Soit $n \in \mathbb{N}$ on suppose que \tilde{Y}_{k_n} et \tilde{W}_{k_n} sont des fonctions \mathcal{C}^{∞} . Le schéma semi-discret en temps est

$$\begin{aligned} \tilde{Y}_{k_{n+1}} &= \tilde{Y}_{k_n} + \delta t \left\{ \eta_{k_n} (1 + \tilde{Y}_{k_n}) + \tilde{p} \partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_{k_n} - (2 - d - \eta_{k_n}) \tilde{\rho} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_{k_n} \right. \\ &\quad \left. + 2\tilde{\rho} \tilde{p}^{-2} \left[\left(\tilde{p}^2 \partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_{k_n} + \tilde{u}_{k_n} \right)^2 \tilde{J}_3 - \tilde{u}_{k_n}^2 \tilde{I}_3 \right] - \tilde{I}_2 \left(\partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_{k_n} / 2 + \tilde{\rho} \partial_{\tilde{\rho}}^2 \tilde{Y}_{k_n} \right) \right\} \\ \tilde{W}_{k_{n+1}} &= \tilde{W}_{k_n} + \delta t \left\{ (\eta_{k_n} - 2) \tilde{W}_{k_n} + (d - 2 + \eta_{k_n}) \tilde{\rho} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{W}_{k_n} + \frac{1}{2} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{I}_1 \right\} \end{aligned} \quad (193)$$

Ainsi on peut vérifier que tous les termes du membre de droite sont bien \mathcal{C}^{∞} . En effet, \tilde{Y}_{k_n} l'est par hypothèse, et η_{k_n} n'est qu'un nombre. De plus comme \tilde{Y}_{k_n} est \mathcal{C}^{∞} , ses dérivées par rapport à $\tilde{\rho}$ ou \tilde{p} le sont aussi. De même \tilde{W}_{k_n} est aussi \mathcal{C}^{∞} par hypothèse et donc \tilde{u}_{k_n} , qui s'exprime simplement en fonction de \tilde{W}_{k_n} , l'est au même titre que ses dérivées par rapport à $\tilde{\rho}$.

Il manque alors à vérifier si cela fonctionne pour les intégrales. En effet montrons que \tilde{J}_m est alors bien une fonction \mathcal{C}^∞ . Commençons donc par montrer que \tilde{J}_m est de classe \mathcal{C}^1 . Rappelons que

$$\tilde{J}_m(\tilde{p}, \tilde{\rho}) \propto \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\tilde{q}) \tilde{G}_{k_n}^{m-1}(\tilde{q}, \rho) \tilde{G}_{k_n}(\|\tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{q}}\|, \rho) \quad (194)$$

Avec l'expression des propagateurs

$$\tilde{G}_{k_n}(\tilde{q}, \tilde{\rho}) \propto \frac{1}{\tilde{q}^2 (1 + \tilde{Y}_{k_n}(\tilde{q}, \rho) + r_{k_n}(\tilde{q})) + \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{W}(\tilde{\rho})} \quad (195)$$

Ainsi, comme on exclu la présence de pôle dans les propagateurs que l'on calcule on peut montrer facilement que $\tilde{\rho} \rightarrow \tilde{G}_{k_n}(\tilde{p}, \tilde{\rho})$ est bien \mathcal{C}^1 pour tout \tilde{p} et $\tilde{\mathbf{p}} \rightarrow \tilde{G}_{k_n}(\|\tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{q}}\|, \tilde{\rho})$ est bien \mathcal{C}^1 pour tout $\tilde{\rho}$. En outre ce sont donc des fonctions bornées car par hypothèses physiques, on suppose qu'elle converge vers 0 quand $\tilde{\rho}$ ou \tilde{p} tendent vers 0. Ainsi,

$$|\mathcal{R}_{k_n}(\tilde{q}) \tilde{G}_{k_n}^{m-1}(\tilde{q}, \rho) \tilde{G}_{k_n}(\|\tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{q}}\|, \rho)| \leq \left(\sup(\tilde{G}_{k_n}) \right)^m |\mathcal{R}_{k_n}(\tilde{q})| \quad (196)$$

$$|\mathcal{R}_{k_n}(\tilde{q}) \tilde{G}_{k_n}^m(\tilde{q}, \rho)| \leq \left(\sup(\tilde{G}_{k_n}) \right)^m |\mathcal{R}_{k_n}(\tilde{q})| \quad (197)$$

Ainsi, comme $\tilde{q} \rightarrow \partial_t \mathcal{R}_{k_n}(\tilde{q})$ est une fonction L^1 et d'après le théorème de dérivation sous le signe somme, nous pouvons en conclure que \tilde{J}_m est bien de classe \mathcal{C}^1 . Par récurrence immédiate on en déduit alors qu'elle est de classe \mathcal{C}^∞ . Enfin notons que \tilde{I}_m est alors aussi de classe \mathcal{C}^∞ pour les mêmes raisons.

Enfin le dernière point important est la présence de \tilde{p}^{-2} dans l'équation de $\tilde{Y}_{k_{n+1}}$. En effet ceci pourrait rompre la définition même de la fonction en $\tilde{p} = 0$. Cependant le terme qui pose problème est de la forme

$$(\tilde{J}_3 - \tilde{I}_3)/\tilde{p}^2 \quad (198)$$

En effectuant un développement limité on montre alors qu'en $\tilde{p} \rightarrow 0$

$$(\tilde{J}_3 - \tilde{I}_3)/\tilde{p}^2 \sim C_0 + \iota(p) \quad (199)$$

Et de même pour les dérivées successives en faisant un développement limité à l'ordre n de \tilde{J}_3 ,

$$\partial_{\tilde{p}}^n \left((\tilde{J}_3 - \tilde{I}_3)/\tilde{p}^2 \right) \simeq C_n + \iota(p) \quad (200)$$

F Complément des algorithmes

F.1 Formules de dérivation à 5 points

On suppose que l'on dispose d'une grille fixe à une dimension de points régulièrement espacées d'une distance h . Soit u une fonction de classe \mathcal{C}^5 sur l'intervalle que définit la grille. Soit j un entier tel que le point d'abscisse $x_j = jh$ soit sur la grille. On note $u_j = u(x_j)$. Les schémas centrés et décentrés d'ordre 5 ci-dessous permettent de calculer les dérivées première et seconde de u par différences finies sur l'ensemble de la grille en n'utilisant sans utiliser de conditions aux limites.

Schéma centré :

$$\begin{aligned}\partial_x u(jh) &= \frac{1}{12h} (u_{j-2} - 8u_{j-1} + 8u_{j+1} - u_{j+2}) \\ \partial_x^2 u(jh) &= \frac{1}{12h^2} (-u_{j-2} + 16u_{j-1} - 30u_{j+1} - u_{j+2})\end{aligned}$$

Schémas décentrés gauches :

$$\begin{aligned}\partial_x u(jh) &= \frac{1}{12h} (-25u_j + 48u_{j+1} - 36u_{j+2} + 16u_{j+3} - 3u_{j+4}) \\ \partial_x^2 u(jh) &= \frac{1}{12h^2} (35u_j - 104u_{j+1} + 114u_{j+2} - 56u_{j+3} + 11u_{j+4}) \\ \partial_x u(jh) &= \frac{1}{12h} (-3u_{j-1} - 10u_j + 18u_{j+1} - 6u_{j+2} + u_{j+3}) \\ \partial_x^2 u(jh) &= \frac{1}{12h^2} (11u_{j-1} - 20u_j + 6u_{j+1} + 4u_{j+2} - u_{j+3})\end{aligned}$$

Schémas décentrés droits :

$$\begin{aligned}\partial_x u(jh) &= \frac{1}{12h} (25u_j - 48u_{j-1} + 36u_{j-2} - 16u_{j-3} + 3u_{j-4}) \\ \partial_x^2 u(jh) &= \frac{1}{12h^2} (35u_j - 104u_{j-1} + 114u_{j-2} - 56u_{j-3} + 11u_{j-4}) \\ \partial_x u(jh) &= \frac{1}{12h} (3u_{j+1} + 10u_j - 18u_{j-1} + 6u_{j-2} - u_{j-3}) \\ \partial_x^2 u(jh) &= \frac{1}{12h^2} (11u_{j-1} - 20u_j + 6u_{j+1} + 4u_{j+2} - u_{j+3})\end{aligned}$$

F.2 Propriétés élémentaires des polynômes de Tchebychev

On rappelle ici quelques propriétés des polynômes de Tchebychev. Tout d'abord on définit

$$T_n : x \rightarrow \cos(n(\arccos(x))) \quad \forall x \in [-1, 1], \quad \forall n \in \mathbb{N} \quad (201)$$

La fonction T_n est une fonction polynomiale associée à un polynôme de $\mathbb{R}_n[X]$ alors appelé polynôme de Tchebychev de première espèce d'ordre n . Nous confondons dans les notations la fonction polynomiale et le polynôme qui lui est associé. Il est alors possible de montrer la relation de récurrence

$$T_n(X) = 2XT_n(X) - T_{n-1}(X) \quad \forall n \geq 1 \quad (202)$$

Avec $T_0(X) = 1$ et $T_1(X) = X$. Le polynôme T_n possède n racines distinctes réelles $\{x_k\}_k$ dans $[-1, 1]$, situées

$$x_k = \cos\left(\frac{\pi(k+1/2)}{n}\right) \quad \forall k \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket \quad (203)$$

Enfin mentionnons que ces polynômes satisfont à une relation d'orthogonalité discrète. Soit $\{x_k\}_{k \in \llbracket 0, n-1 \rrbracket}$ les n racines de T_n . Alors nous avons

$$\sum_{k=0}^{n-1} T_i(x_k) T_j(x_k) = \begin{cases} 0 & \text{si } i \neq j \\ n/2 & \text{si } i = j \neq 0 \\ n & \text{si } i = j = 0 \end{cases} \quad (204)$$

Enfin, soit $n_c \in \mathbb{N}$, posons f une fonction de $[-1, 1]$ dans \mathbb{R} de classe \mathcal{C}^{n_c} . On note f_{n_c} le développement en série de polynômes de Tchebychev de f à l'ordre n_c s'écrivant

$$f_{n_c} = \sum_{j=0}^{n_c-1} c_j T_j \quad (205)$$

Or il est possible de montrer la relation de récurrence

$$T'_i(x) = 2iT_{i-1}(x) + \frac{i}{i-2}T'_{i-2}(x) \quad \forall x \in [-1, 1], \quad \forall i \in \llbracket 3, n_c \rrbracket, \quad (206)$$

et la dérivée de f peut se mettre sous la forme

$$f' = \sum_{j=0}^{n_c-1} c'_j T_j, \quad (207)$$

avec les relations

$$\begin{aligned} c'_{n_c-1} &= 0, & c'_{n_c-2} &= 2(n_c-1)c_{n_c-1}, \\ c'_i &= 2(i+1)c_{i+1} + c'_{i+2} \quad \forall i \in \llbracket 0, n_c-2 \rrbracket \end{aligned} \quad (208)$$

F.3 Quadratures pour le calcul des intégrales à une dimension

Soit f une fonction définie sur $[-1, 1]$ suffisamment régulière. On souhaite exprimer l'intégrale de f sous la forme d'une quadrature d'ordre $n \in \mathbb{N}$ comme :

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq \sum_{i=1}^n f(\xi_i) w_i \quad (209)$$

Les $\{\xi_i\}_i$ sont les points d'intégration et les $\{w_i\}_i$ les poids. Nous allons regarder différents types de quadratures auxquelles nous avons pensé.

F.3.1 Quadrature de Gauss-Legendre

On commence par poser L_n le polynôme de Legendre d'ordre $n \in \mathbb{N}$ dans $\mathbb{R}_n[X]$ défini par la relation de récurrence

$$L_{i+1}(X) = \frac{2i+1}{i+1}XL_i(X) - \frac{i}{i+1}L_{i-1}(X) \quad \forall i \in \llbracket 1, n-1 \rrbracket \quad (210)$$

Avec $L_0 = 1$, et $L_1 = X$. On identifie encore dans les notations les polynômes et les fonctions polynômiales associées. La quadrature de Gauss-Legendre d'ordre n utilise alors les points $\{\xi_i\}_i$ racines de L_n . Pour trouver ces points on part d'une approximation du i -ème zéro ($i \in \llbracket 1, n_c \rrbracket$) de L_n comme

$$\xi_i \simeq \cos\left(\frac{\pi(i-1/4)}{n+1/2}\right), \quad (211)$$

et on utilise ensuite une méthode de Newton pour calculer ce zéro à la précision machine. On obtient les poids associées avec la formule

$$w_i = \frac{2}{(1 - \xi_i^2)(L'_n(\xi_i))^2} \quad (212)$$

F.3.2 Première règle de Fejer

La première règle de Fejer d'ordre n utilise les zéros du polynôme de Tchebychev d'ordre n de première espèce : T_n . Ainsi nous avons

$$\xi_i = \cos\left(\frac{\pi(i-1/2)}{n}\right) \quad \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket \quad (213)$$

Et, en notant $[n/2]$ la partie entière de $n/2$, les poids associées sont définis par

$$w_i = \frac{2}{N} \left(1 - 2 \sum_{j=1}^{[n/2]} \frac{\cos\left(j \cos\left(\frac{(2i-1)\pi}{n}\right)\right)}{4j^2 - 1} \right) \quad \forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket \quad (214)$$

G Equations du modèle d'Ising 2D

G.1 Introduction

On part de la fonction de partition

$$\mathcal{Z} \propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} e^{-S_{\mu}[\varphi]} \quad (215)$$

Avec l'action S s'écrivant :

$$S_{\mu}[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \frac{1}{\lambda_{\mu}(\mathbf{q})} \varphi(-\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{r}} \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) \quad (216)$$

Par le théorème de Parseval, nous récrivons S sous la forme

$$\begin{aligned} S_{\mu}[\varphi] &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \left[\frac{1}{\lambda_{\mu}(\mathbf{q})} - \frac{1}{\lambda_{\mu}(0)} \right] \varphi(-\mathbf{q}) \\ &\quad + \sum_{\mathbf{r}} \left[\frac{1}{2\lambda_{\mu}(0)} \varphi_{\mathbf{r}}^2 - \ln(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})) \right] \end{aligned} \quad (217)$$

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

$$\varphi \rightarrow \delta \sqrt{2\beta J d} \varphi \quad (218)$$

On obtient alors

$$S_{\mu}[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \hat{\varphi}(\mathbf{q}) \varepsilon_0(\mathbf{q}) \hat{\varphi}(-\mathbf{q}) + \sum_{\mathbf{r}} U(\varphi(\mathbf{r})) \quad (219)$$

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

$$\varepsilon_0(\mathbf{q}) = \delta^2 \frac{1 - \gamma(\mathbf{q})}{(\gamma(\mathbf{q}) + \tilde{\mu})(1 + \tilde{\mu})} \quad (220)$$

$$U(\rho) = \delta^2 \frac{1}{1 + \tilde{\mu}} \rho - \ln \left(\cosh \left(2\delta \sqrt{\tilde{\beta} \rho} \right) \right) \quad (221)$$

De plus, on note $\tilde{\beta}_c^{\text{MF}}$ la valeur de $\tilde{\beta}$ en champ moyen à la température critique. En faisant un développement limité à l'ordre 1 en ρ nous avons

$$U(\rho) = \delta^2 \left(\frac{1}{1 + \tilde{\mu}} - 2\tilde{\beta} \right) \rho + \mathcal{O}(\rho^2) \quad \Rightarrow \quad \tilde{\beta}_c^{\text{MF}} \simeq \frac{1}{2(1 + \tilde{\mu})} \quad (222)$$

G.2 Les équations BMW en ρ dimensionnées

On pose

$$\Gamma_k^{(2)}(p_x, p_y, \rho) = \varepsilon_0(p_x, p_y) + \Delta_k(p_x, p_y, \rho) + \partial_{\phi}^2 V(\phi) \quad (223)$$

$$W(\phi) = \partial_{\phi} V(\phi) \quad \text{et} \quad X(\phi) = \partial_{\phi}^2 V(\phi) \quad (224)$$

Les équations à résoudre numériquement sont

$$\begin{aligned} \partial_t \Delta_k(p_x, p_y, \rho) &= -2\rho I_3(\rho) u_k^2(\rho) + 2\rho J_3(p_x, p_y, \rho) [u_k(\rho) + \partial_{\rho} \Delta_k(p_x, p_y, \rho)]^2 \\ &\quad - \frac{1}{2} I_2(\rho) [\partial_{\rho} \Delta_k(p_x, p_y, \rho) + 2\rho \partial_{\rho}^2 \Delta_k(p_x, p_y, \rho)] \end{aligned} \quad (225)$$

$$\partial_t W_k(\rho) = \frac{1}{2} \partial_{\rho} I_1(\rho) \quad (226)$$

Avec les notations

$$J_n(p_x, p_y, \rho) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^{n-1}(q_x, q_y, \rho) G_k(p_x + q_x, p_y + q_y, \rho) dq_x dq_y \quad (227)$$

$$I_n(\rho) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^n(q_x, q_y, \rho) dq_x dq_y \quad (228)$$

$$G_k(q_x, q_y, \rho) = \frac{1}{\varepsilon_0(q_x, q_y) + \Delta_k(q_x, q_y, \rho) + m_k^2(\rho) + \mathcal{R}_k(q_x, q_y)} \quad (229)$$

$$\partial_\rho I_n(\rho) = -n \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^{n+1}(q_x, q_y, \rho) (\partial_\rho \Delta_k(p_x, p_y, \rho) + u_k(\rho)) \, dq_x \, dq_y \quad (230)$$

$$m_k^2(\rho) = \partial_\phi^2 V(\phi) = W(\rho) + 2\rho \partial_\rho W(\rho) \quad (231)$$

$$u_k(\rho) = \partial_\rho m_k^2(\rho) = 3\partial_\rho W(\rho) + 2\rho \partial_\rho^2 W(\rho) \quad (232)$$

On pose la fonction

$$\tau(q_x, q_y) = \frac{\varepsilon_0(q_x, q_y)}{2k^2 \|\varepsilon_0\|_\infty} \quad (233)$$

On choisit alors le régulateur

$$\mathcal{R}_k(q_x, q_y) = \frac{\alpha \varepsilon_0(q_x, q_y)}{\exp(2\tau(q_x, q_y)) - 1} \quad (234)$$

$$\partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) = \alpha \varepsilon_0(q_x, q_y) \frac{\tau(q_x, q_y)}{\sinh^2(\tau(q_x, q_y))} \quad (235)$$

Et nous pouvons calculer

$$\|\varepsilon_0\|_\infty = \sup_{(p_x, p_y) \in [-\pi, \pi]^2} \varepsilon_0(p_x, p_y) = \frac{2\delta^2}{\mu^2 - 1} \quad (236)$$

G.3 Les équations BMW en ϕ

G.3.1 Les équations BMW en ϕ dimensionnées

On rappelle les notations :

$$W(\phi) = \partial_\phi V(\phi) \quad \text{et} \quad X_k(\phi) = \partial_\phi^2 V(\phi) \quad (237)$$

On doit alors résoudre

$$\begin{aligned} \partial_t \Delta_k(p_x, p_y, \phi) &= J_3(p_x, p_y, \phi) (\partial_\phi \{\Delta_k(p_x, p_y, \phi) + X_k(\phi)\})^2 \\ &\quad - I_3(\phi) (\partial_\phi X_k(\phi))^2 - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Delta_k(p_x, p_y, \phi) \end{aligned} \quad (238)$$

$$\partial_t X_k(\phi) = \frac{1}{2} \partial_\phi^2 I_1(\phi) \quad (239)$$

On garde ici des expressions similaires pour les intégrales que ce que l'on avait en ρ ,

$$J_n(p_x, p_y, \phi) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^{n-1}(q_x, q_y, \phi) G_k(p_x + q_x, p_y + q_y, \phi) \, dq_x \, dq_y \quad (240)$$

$$I_n(\phi) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^n(q_x, q_y, \phi) \, dq_x \, dq_y \quad (241)$$

$$G_k(q_x, q_y, \phi) = \frac{1}{\varepsilon_0(q_x, q_y) + \Delta_k(q_x, q_y, \phi) + X_k(\phi) + \mathcal{R}_k(q_x, q_y)} \quad (242)$$

$$\partial_\phi I_n(\phi) = -n \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^{n+1}(q_x, q_y, \phi) (\partial_\phi \Delta_k(p_x, p_y, \phi) + \partial_\phi X_k(\phi)) \, dq_x \, dq_y \quad (243)$$

$$\begin{aligned} \partial_\phi^2 I_n(\phi) &= -n \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^{n+1}(q_x, q_y, \phi) (\partial_\phi^2 \Delta_k(p_x, p_y, \phi) + \partial_\phi^2 X_k(\phi)) \, dq_x \, dq_y \\ &\quad + n(n+1) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) G_k^{n+2}(q_x, q_y, \phi) (\partial_\phi \Delta_k(p_x, p_y, \phi) + \partial_\phi X_k(\phi))^2 \, dq_x \, dq_y \end{aligned} \quad (244)$$

G.3.2 Les équations BMW en ϕ adimensionnées en impulsion

On note $\tilde{p}_x = k^{-1}p_x$ et $\tilde{p}_y = k^{-1}p_y$. Ainsi que

$$\begin{aligned}\bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) &= \Delta_k(p_x, p_y, \phi); \bar{J}_n(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) = J_n(p_x, p_y, \phi); \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y) = \mathcal{R}_k(p_x, p_y); \bar{X}_k(\phi) = X_k(\phi) \\ \bar{\varepsilon}_0(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y) &= \varepsilon_0(p_x, p_y); \bar{\tau}(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y) = \tau(p_x, p_y) = \bar{\varepsilon}_0(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y)/(k^2 \|\varepsilon_0\|_\infty); \bar{\partial}_t \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) = \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y)\end{aligned}$$

Les équations se réécrivent

$$\begin{aligned}\partial_t \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) &= -I_3(\phi)(\partial_\phi \bar{X}(\phi))^2 + \bar{J}_3(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)(\partial_\phi \{\bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) + \bar{X}(\phi)\})^2 \\ &\quad - \frac{1}{2}I_2(\phi)\partial_\phi^2 \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) + \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \bar{\Delta}_k + \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \bar{\Delta}_k\end{aligned}\quad (245)$$

$$\partial_t \bar{X}(\phi) = \frac{1}{2}\partial_\phi^2 I_1(\phi) \quad (246)$$

En effet, l'expression de la nouvelle dérivée par rapport au temps est :

$$\begin{aligned}\partial_t \Delta_k(p_x, p_y, \phi)|_{p_x, p_y, \phi} &= \partial_t \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)|_{\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi} + \partial_t \tilde{p}_x|_{p_x} \partial_{\tilde{p}_x} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) + \partial_t \tilde{p}_y|_{p_y} \partial_{\tilde{p}_y} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) \\ \partial_t \Delta_k(p_x, p_y, \phi)|_{p_x, p_y, \phi} &= \partial_t \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)|_{\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi} - \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) - \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)\end{aligned}\quad (247)$$

De plus nous avons toujours pour dérivée temporelle du régulateur

$$\bar{\partial}_t \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) = \alpha \bar{\varepsilon}_0 \frac{\bar{\tau}}{\sinh^2(\bar{\tau})} \quad (248)$$

Les intégrales se calculent selon

$$\bar{J}_n(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) = \frac{k^2}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \bar{\partial}_t \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) \bar{G}_k^{n-1}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \phi) \bar{G}_k(\tilde{p}_x + \tilde{q}_x, \tilde{p}_y + \tilde{q}_y, \phi) d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y \quad (249)$$

$$I_n(\phi) = \frac{k^2}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \bar{\partial}_t \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) \bar{G}_k^n(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \phi) d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y \quad (250)$$

$$\bar{G}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \phi) = \frac{1}{\bar{\varepsilon}_0(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) + \bar{\Delta}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \phi) + \bar{X}(\phi) + \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y)} \quad (251)$$

$$\begin{aligned}\partial_\phi^2 I_n(\phi) &= -n \frac{k^2}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \bar{\partial}_t \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) \bar{G}_k^{n+1}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \phi) (\partial_\phi^2 \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) + \partial_\phi^2 \bar{X}_k(\phi)) d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y \\ &\quad + n(n+1) \frac{k^2}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \bar{\partial}_t \bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) \bar{G}_k^{n+2}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \phi) (\partial_\phi \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) + \partial_\phi \bar{X}_k(\phi))^2 d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y\end{aligned}\quad (252)$$

Calcul du Z_k

On commence par définir

$$\varepsilon_0^0 = \left. \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial p_x^2} \right|_{p_x=0, p_y=0} \quad (253)$$

On montre alors en faisant un développement limité que

$$\varepsilon_0(\mathbf{p}) \underset{\mathbf{p}=0}{\sim} \frac{\delta^2}{4(1+\mu)^2} \mathbf{p}^2 \quad \text{avec} \quad \mathbf{p}^2 = p_x^2 + p_y^2 \quad (254)$$

Pour calculer Z_k on utilise une des définitions équivalentes

$$Z_k = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0^0} \left. \frac{\partial \Delta_k}{\partial p_x^2} \right|_{p_x=0, p_y=0, \phi=0} \quad \text{et} \quad Z_k = 1 + \frac{1}{2\varepsilon_0^0} \left. \frac{\partial^2 \Delta_k}{\partial p_x^2} \right|_{p_x=0, p_y=0, \phi=0} \quad (255)$$

Ce qui donne en pratique

$$Z_k = 1 + \frac{2(1+\mu)^2}{\delta^2} \left. \frac{\partial^2 \Delta_k}{\partial p_x^2} \right|_{p_x=0, p_y=0, \phi=0} = 1 + \frac{2(1+\mu)^2}{\delta^2 k^2} \left. \frac{\partial^2 \bar{\Delta}_k}{\partial \tilde{p}_x^2} \right|_{\tilde{p}_x=0, \tilde{p}_y=0, \phi=0} \quad (256)$$

En outre par définition nous avons aussi

$$\eta_k = -\partial_t \ln Z_k \quad (257)$$

G.3.3 Les équations BMW en ϕ totalement adimensionnées

On note $\tilde{\phi} = \sqrt{Z_k}\phi$. Etant donnée que l'on effectue le changement à des valeurs de k très faibles ($k \simeq \exp(-3)$), on considèrera que $\varepsilon_0(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y) \simeq \varepsilon_0^0 k^2(\tilde{p}_x^2 + \tilde{p}_y^2)$. On adimensionne aussi les fonctions en plus des variables :

$$1 + \frac{\bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)}{\varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2} = Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) \quad \text{et} \quad \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) = \frac{1}{Z_k k^2} \bar{X}_k(\phi)$$

Etude des termes en $\bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)$

La dérivée de $\bar{\Delta}_k$ par rapport à t se réécrit :

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)|_{\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi} &= \partial_t (Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 - \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2)|_{\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}} \\ &\quad + \partial_t \tilde{\phi}|_{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} (Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 - \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2) \end{aligned} \quad (258)$$

Ceci donne l'expression suivante

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi)|_{\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi} &= -\varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 \eta_k Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) + 2\varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) \\ &\quad - 2\varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 + \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 Z_k \partial_t \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) - \frac{1}{2} \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 \eta_k Z_k \tilde{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \end{aligned} \quad (259)$$

De plus nous avons aussi concernant les dérivées de $\bar{\Delta}_k$

$$\begin{aligned} \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) &= 2\varepsilon_0^0 \tilde{p}_x^2 Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) + \varepsilon_0^0 \tilde{\mathbf{p}}^2 Z_k \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) - 2\varepsilon_0^0 \tilde{p}_x^2 \\ \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) &= 2\varepsilon_0^0 \tilde{p}_y^2 Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) + \varepsilon_0^0 \tilde{\mathbf{p}}^2 Z_k \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) - 2\varepsilon_0^0 \tilde{p}_y^2 \end{aligned} \quad (260)$$

Et nous en déduisons alors

$$\begin{aligned} \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) + \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) &= 2\varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 Z_k(1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) - 2\varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 \\ &\quad \varepsilon_0^0 \tilde{\mathbf{p}}^2 Z_k \left(\tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) + \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \right) \end{aligned} \quad (261)$$

Ainsi que pour les dérivées par rapport à ϕ

$$\partial_{\phi} \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) = \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 Z_k^{\frac{3}{2}} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \quad \text{et} \quad \partial_{\phi}^2 \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) = \varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2 Z_k^2 \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \quad (262)$$

Etude des termes en $X_k(\phi)$

La dérivée de \bar{X}_k par rapport à t devient de même que pour $\bar{\Delta}$

$$\begin{aligned} \partial_t \bar{X}_k(\phi)|_{\phi} &= \partial_t (Z_k k^2 \tilde{X}_k(\tilde{\phi}))|_{\tilde{\phi}} + \partial_t \tilde{\phi}|_{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} (Z_k k^2 \tilde{X}_k(\tilde{\phi})) \\ \partial_t \bar{X}_k(\phi)|_{\phi} &= Z_k k^2 \partial_t \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) - Z_k k^2 (\eta_k - 2) \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) - \frac{1}{2} Z_k k^2 \eta_k \tilde{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \end{aligned} \quad (263)$$

Et pour la dérivée en ϕ nous avons

$$\partial_{\phi} \bar{X}_k(\phi) = k^2 Z_k^{\frac{3}{2}} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \quad (264)$$

Adimensionnement du régulateur

On remarque qu'avec l'approximations faite sur ε_0 le régulateur s'écrit

$$\bar{\mathcal{R}}_k(q_x, q_y) = \mathcal{R}_k(q) = \alpha \frac{Z_k \varepsilon_0^0 k^2 q^2}{\exp\left(\frac{\varepsilon_0^0}{\|\varepsilon_0\|_{\infty}} \frac{q^2}{k^2}\right) - 1}$$

On adimensionne le régulateur en posant

$$r_k(\tilde{q}) = \frac{\bar{\mathcal{R}}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y)}{\varepsilon_0^0 q^2 Z_k} = \alpha \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_0^0}{\|\varepsilon_0\|_{\infty}} \tilde{q}^2\right) - 1}$$

Ainsi on en déduit

$$\partial_t \mathcal{R}_k(q)|_q = \partial_t(\varepsilon_0^0 q^2 Z_k r_k(\tilde{q}))|_{\tilde{q}} + \partial_t \tilde{q}|_q \partial_{\tilde{q}} r_k(\tilde{q}) \quad (265)$$

$$\partial_t \mathcal{R}_k(q)|_q = \varepsilon_0^0 k^2 Z_k \tilde{q}^2 \{-\eta_k r_k(\tilde{q}) - \tilde{q} \partial_{\tilde{q}} r_k(\tilde{q})\} \quad (266)$$

Avec l'expression

$$\partial_{\tilde{q}} r_k(\tilde{q}) = -\alpha \frac{\varepsilon_0^0}{2\|\varepsilon_0\|_\infty} \tilde{q} \frac{1}{\sinh^2\left(\frac{\varepsilon_0^0}{2\|\varepsilon_0\|_\infty} \tilde{q}^2\right)} \quad (267)$$

Et on remarquera aussi que

$$\frac{\varepsilon_0^0}{\|\varepsilon_0\|_\infty} = \frac{\mu - 1}{8(\mu + 1)} \quad (268)$$

Adimensionnement des intégrales et leur expression

On adimensionne aussi les intégrales

$$\tilde{J}_n(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) = \frac{Z_k^{n-1}}{k^{2(2-n)}} \bar{J}_n(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \phi) \quad \text{et} \quad \tilde{I}_n(\tilde{\phi}) = \frac{Z_k^{n-1}}{k^{2(2-n)}} I(\phi)$$

Et leurs équations deviennent

$$\tilde{J}_n(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \varepsilon_0^0 \tilde{q}^2 \{-\eta_k r_k(\tilde{q}) - \tilde{q} \partial_{\tilde{q}} r_k(\tilde{q})\} \tilde{G}_k^{n-1}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \tilde{\phi}) \tilde{G}_k(\tilde{p}_x + \tilde{q}_x, \tilde{p}_y + \tilde{q}_y, \tilde{\phi}) d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y \quad (269)$$

$$\tilde{I}_n(\tilde{\phi}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \varepsilon_0^0 \tilde{q}^2 \{-\eta_k r_k(\tilde{q}) - \tilde{q} \partial_{\tilde{q}} r_k(\tilde{q})\} \tilde{G}_k^n(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \tilde{\phi}) d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y \quad (270)$$

$$\tilde{G}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \phi) = \frac{1}{\varepsilon_0^0 \tilde{q}^2 \left\{1 + \tilde{Y}_k(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \tilde{\phi}) + r_k(\tilde{q})\right\} + \tilde{X}_k(\tilde{\phi})} \quad (271)$$

$$\begin{aligned} \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{I}_n(\tilde{\phi}) &= -n \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \varepsilon_0^0 \tilde{q}^2 \{-\eta_k r_k(\tilde{q}) - \tilde{q} \partial_{\tilde{q}} r_k(\tilde{q})\} \tilde{G}_k^{n+1}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \tilde{\phi}) \left(\varepsilon_0^0 \tilde{q}^2 \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) + \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \right) d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y \\ &+ n(n+1) \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \int_{-\frac{\pi}{k}}^{\frac{\pi}{k}} \varepsilon_0^0 \tilde{q}^2 \{-\eta_k r_k(\tilde{q}) - \tilde{q} \partial_{\tilde{q}} r_k(\tilde{q})\} \tilde{G}_k^{n+2}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y, \tilde{\phi}) \left(\varepsilon_0^0 \tilde{q}^2 \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) + \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \right)^2 d\tilde{q}_x d\tilde{q}_y \end{aligned} \quad (272)$$

Ecriture des équations finales

En rassemblant toute les expressions précédents ceci nous permet d'écrire les équations

$$\begin{aligned} \partial_t \tilde{Y}(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) &= \eta_k (1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi})) + \frac{1}{2} \eta_k \tilde{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) - \frac{1}{2} \tilde{I}_2(\tilde{\phi}) \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \\ &+ \frac{1}{\varepsilon_0^0 \tilde{\mathbf{P}}^2} \left\{ \left(\varepsilon_0^0 \tilde{\mathbf{P}}^2 \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) + \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \right)^2 \tilde{J}_3(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) - \left(\partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) \right)^2 \tilde{I}_3(\tilde{\phi}) \right\} \\ &+ \tilde{p}_x \partial_{\tilde{p}_x} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) + \tilde{p}_y \partial_{\tilde{p}_y} \tilde{Y}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, \tilde{\phi}) \end{aligned} \quad (273)$$

$$\partial_t \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) = (\eta_k - 2) \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) + \frac{1}{2} \eta_k \tilde{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{X}_k(\tilde{\phi}) + \frac{1}{2} \partial_{\tilde{\phi}}^2 \tilde{I}_1(\tilde{\phi}) \quad (274)$$

On notera aussi l'équation de flot qui permet de récupérer le potentiel directement donnée par

$$\partial_t \tilde{V}(\tilde{\phi}) = -2\tilde{V}(\tilde{\phi}) + \frac{1}{2} \eta_k \tilde{\phi} \partial_{\tilde{\phi}} \tilde{V}(\tilde{\phi}) + \frac{1}{2} \tilde{I}_1(\tilde{\phi}) \quad (275)$$

Equation sur η_k

Pour obtenir l'équation sur η_k on commence par partir du fait que

$$\lim_{\mathbf{p} \rightarrow 0} \left\{ 1 + \frac{\bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, 0)}{\varepsilon_0^0 \mathbf{p}^2} \right\} = 1 + \frac{1}{\varepsilon_0^0} \frac{\partial \bar{\Delta}_k(\tilde{p}_x, \tilde{p}_y, 0)}{\partial \mathbf{p}^2} = Z_k \quad (276)$$

En utilisant la définition de \tilde{Y} il vient alors le résultat

$$Z_k = Z_k(1 + \tilde{Y}(0, 0, 0)) \quad \Leftrightarrow \quad \tilde{Y}_k(0, 0, 0) = 0 \quad \forall k \quad (277)$$

Or ce résultat nous donne $\partial_t \tilde{Y}_k(0, 0, 0) = 0$. Et on en déduit

$$\eta_k = \frac{1}{2} \tilde{I}_2(0) \partial_\phi^2 \tilde{Y}(0, 0, 0) \quad (278)$$

Les expressions des régulateurs précédents

Afin d'assurer une compatibilité des équations, et comme maintenant il nous faut avec un régulateur qui est de la même dimension que la dérivée seconde du potentiel il est nécessaire de changer légèrement l'expression de \mathcal{R}_k que l'on a utilisé dans les deux premiers étapes du flot. On prend ici

$$\mathcal{R}_k(q_x, q_y) = \alpha \frac{Z_k \varepsilon_0(q_x, q_y)}{\exp(2\tau(q_x, q_y)) - 1} \quad (279)$$

Ainsi on en déduit directement les formules suivantes

$$\partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) = \alpha Z_k \frac{\varepsilon_0(q_x, q_y)}{\sinh(\tau(q_x, q_y))} \left\{ \frac{\tau(q_x, q_y)}{\sinh(\tau(q_x, q_y))} - \eta_k \frac{1}{2 \exp(\tau(q_x, q_y))} \right\} \quad (280)$$

$$\overline{\partial_t \mathcal{R}_k}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) = \alpha Z_k \frac{\bar{\varepsilon}_0(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y)}{\sinh(\bar{\tau}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y))} \left\{ \frac{\bar{\tau}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y)}{\sinh(\bar{\tau}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y))} - \eta_k \frac{1}{2 \exp(\bar{\tau}(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y))} \right\} \quad (281)$$