Étude numérique des équations du groupe de renormalisation non perturbatif

Master 2 Analyse Modélisation Simulation

Gaétan Facchinetti

Encadré par : Nicolas Dupuis et Bertrand Delamotte

Laboratoire de Physique Théorique de la Matière Condensée

Université Paris-Saclay – École Normale Supérieure Paris-Saclay

École Nationale Supérieure des Techniques Avancées - UVSQ

28 septembre 2017

A. Modèle d'Ising

- Modèle d'Ising 2D carré :
  - Réseau carré de pas a.
  - N_s spins à une composantes.

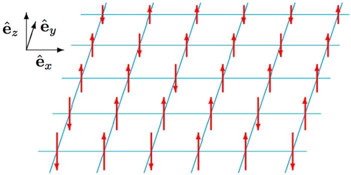

FIGURE – Modèle d'Ising.

- Spin et configuration :

$$S_{\mathbf{r}} \in \{-1, 1\}, \quad \mathscr{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}$$

- Energie d'une configuration $\mathscr{M}$:

$$\mathcal{H}(\mathscr{M}) = \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} - \sum_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}$$

- Probabilité d'une configuration :

$$p(\mathscr{M}) = \sum_{\mathscr{M}} \frac{1}{\mathcal{Z}} \exp(-\mathcal{H}(\mathscr{M})/(k_B T))$$

- Fonction de partition :

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathscr{M}} \exp(-\mathcal{H}(\mathscr{M})/(k_B T))$$

- Définition de l'aimantation :

$$m = \sum_{\mathscr{M}=\{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}} p(\mathscr{M}) \left(\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right) = \frac{1}{N_s \beta} \partial_\beta \ln\left(\mathcal{Z}\right)$$

- Définition de l'aimantation :

$$m = \sum_{\mathscr{M}=\{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}} p(\mathscr{M}) \left(\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right) = \frac{1}{N_s \beta} \partial_\beta \ln(\mathcal{Z})$$

- Evolution de l'aimantation m avec la température T :

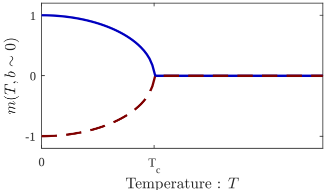

FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:
A $(b_{\mathbf{r}} = 0, T = 0)$: $m = 0$.

Mais problème :

$$\lim_{b \to 0} \left(\lim_{N_s \to \infty} m \right) = 0 \neq \lim_{N_s \to \infty} \left(\lim_{b \to 0} m \right)$$

- Définition de l'aimantation :

$$m = \sum_{\mathscr{M}=\{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}} p(\mathscr{M}) \left(\frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right) = \frac{1}{N_s \beta} \partial_\beta \ln(\mathcal{Z})$$

- Evolution de l'aimantation m avec la température T :

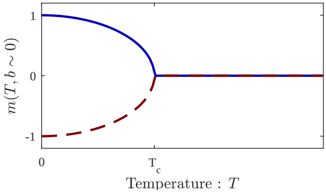

FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:
A $(b_{\mathbf{r}} = 0, T = 0)$: $m = 0$.

Mais problème :

$$\lim_{b \to 0} \left(\lim_{N_s \to \infty} m \right) = 0 \neq \lim_{N_s \to \infty} \left(\lim_{b \to 0} m \right)$$

$\Rightarrow$ Brisure de symétrie & Transition de phase

- Température critique : T_c

- Température critique : T_c

- Transitions de phase du second ordre :
  - ◇ Fonction de corrélation à deux points :

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \equiv \langle S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2} \rangle \equiv \sum_{\mathscr{M}} p\left(\mathscr{M}\right) S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2}$$

$$\text{Pour } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \to \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta},$$

  - ◇ Longueur de corrélation :

$$\xi \underset{T \to T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu}$$

- Température critique : T_c

- Transitions de phase du second ordre :
  - ◇ Fonction de corrélation à deux points :

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \equiv \langle S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2} \rangle \equiv \sum_{\mathscr{M}} p\,(\mathscr{M})\, S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2}$$

$$\text{Pour } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \to \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta},$$

  - ◇ Longueur de corrélation :

$$\xi \underset{T \to T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu}$$

$\Rightarrow$ Exposants critiques : η et ν

- Température critique : T_c

- Transitions de phase du second ordre :
  - ◇ Fonction de corrélation à deux points :

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|) \equiv \langle S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2} \rangle \equiv \sum_{\mathscr{M}} p\,(\mathscr{M})\, S_{\mathbf{r}_1} S_{\mathbf{r}_2}$$

$$\text{Pour } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \to \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta},$$

  - ◇ Longueur de corrélation :

$$\xi \underset{T \to T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu}$$

$\Rightarrow$ Exposants critiques : η et ν

- Universalité des exposants critiques

- Fonction de partition exprimée avec des champs :

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\boldsymbol{\varphi} \exp\left(-\mathcal{H}[\boldsymbol{\varphi}]/(k_B T)\right)$$

- Transformée de Fourier :

$$\hat{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \int_\Omega \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r})\, e^{-i\mathbf{p}.\mathbf{r}} \mathrm{d}\,\mathbf{r},$$
$$\boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{p}}\, e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}}$$

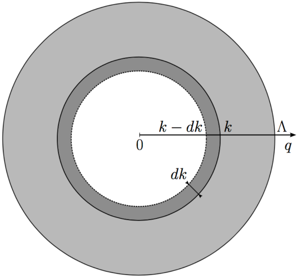

FIGURE – Principe du RG
Thèse de Frédéric Léonard

- $\|\mathbf{p}\|_2 \in [0, \Lambda]$

- En pratique : $\mathcal{Z}_k \underset{\text{NPRG}}{\longrightarrow} \Gamma_k \underset{\text{BMW}}{\longrightarrow} \Gamma_k^{(2)}$

L'équation de flot BMW :

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

Avec les notations,

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

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

Définition du propagateur :

$$G_k(\mathbf{q},\phi) = \frac{1}{\Gamma_k^{(2)}(\mathbf{q},\boldsymbol{\phi}) + \mathcal{R}_k(\mathbf{q})}$$

Condition initiale en $k = \Lambda$ connue

$\Rightarrow$ Calcul des exposants critiques : η et ν

$\Rightarrow$ Calcul des exposants critiques : η et ν
$\Rightarrow$ Calcul de la température critique : T_c

⇒ Calcul des exposants critiques : η et ν
⇒ Calcul de la température critique : T_c

- Première étude :
  - Réécriture en C++ d'un code permettant de calculer η et ν
  - Recherche des problèmes et tentatives de résolution

⇒ Calcul des exposants critiques : η et ν
⇒ Calcul de la température critique : T_c

- Première étude :
  - Réécriture en C++ d'un code permettant de calculer η et ν
  - Recherche des problèmes et tentatives de résolution

- Deuxième étude :
  - Ecriture d'un nouveau code pour calculer T_c : faisable mais difficile
  - Comparaison à la valeur théorique : benchmarking de la méthode

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

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

$$\begin{aligned}
\partial_t \tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho}) = \; & \eta_k (1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho})) + \tilde{p}\, \partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho}) - (2 - d - \eta_k) \tilde{\rho}\, \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho}) \\
& + 2\tilde{\rho}\tilde{p}^{-2} \left[\left(\tilde{p}^2 \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho}) + \tilde{u}_k(\tilde{\rho}) \right)^2 \tilde{J}_3(\tilde{p}, \tilde{\rho}) \right] - 2\tilde{\rho}\tilde{p}^{-2} \left[\tilde{u}_k^2(\tilde{\rho}) \tilde{I}_3(\tilde{\rho}) \right] \\
& - \tilde{I}_2(\tilde{\rho}) \left(\partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho})/2 + \tilde{\rho}\, \partial^2_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\tilde{p}, \tilde{\rho}) \right) \\
\partial_t \tilde{W}_k = \; & (\eta_k - 2) \tilde{W}_k(\tilde{\rho}) + (d - 2 + \eta_k) \tilde{\rho}\, \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{W}_k(\tilde{\rho}) + \frac{1}{2} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{I}_1(\tilde{\rho}) \,,
\end{aligned}$$

avec la définition

$$\eta_k = \frac{1}{2} \tilde{I}_2(\tilde{\rho} = 0) \partial_\rho \tilde{Y}_k(\tilde{p} = 0, \tilde{\rho} = 0) \,,$$

et les conditions initiales,

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

- Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite

- Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite
- Discrétisation en champ : Grille fixe. Dérivée avec schémas à 5 points

- Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite
- Discrétisation en champ : Grille fixe. Dérivée avec schémas à 5 points
- Discrétisation en moments : Méthode pseudo-spectrale
  - Interpolation de Tchebytechev
  - Intégration de Gauss-Legendre

- Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite
- Discrétisation en champ : Grille fixe. Dérivée avec schémas à 5 points
- Discrétisation en moments : Méthode pseudo-spectrale
  - Interpolation de Tchebytechev
  - Intégration de Gauss-Legendre

- A propox de l'intégration

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

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

- Réecriture de la fonction de partition :

$$\mathcal{Z} \propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} \mathrm{d}\varphi_{\mathbf{r}} \, \exp\left(-\mathcal{H}_\mu[\varphi]\right) \,, \tag{2}$$

avec l'hamiltonien $\mathcal{H}_\mu$ définit par

$$\mathcal{H}_\mu[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \frac{1}{\lambda_\mu(\mathbf{q})} \varphi(-\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{r}} \ln\left(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})\right) \,, \tag{3}$$

- :

- Réecriture de la fonction de partition :