



école _____
normale _____
supérieure _____
paris—saclay _____



université
PARIS-SACLAY

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

1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Transition de phase

Objectifs

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

Calcul de la fonction de partition

Le NPRG et les équations BMW

La résolution en trois étapes

3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

Méthode générale

Interpolation de Tchebychev

4. Etude du modèle d'Ising 2D : Résultats

5. Conclusions

1. Introduction du problème

1. Physique statistique et modèle d'Ising

- Modèle d'Ising 2D carré : N_s spins à une composante sur un quadrillage

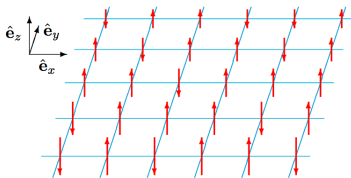


FIGURE – Modèle d'Ising.

- Spin et configuration :

$$S_{\mathbf{r}} \in \{-1(\downarrow), 1(\uparrow)\}, \quad \mathcal{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}$$

- Energie d'une config. $\mathcal{M} : \mathcal{H}(\mathcal{M}, b)$

- Probabilité d'une config. $\mathcal{M} :$

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

- Fonction de partition :

$$\mathcal{Z}(b, T) = \sum_{\mathcal{M}} \exp \left(-\frac{\mathcal{H}(\mathcal{M}, b)}{k_B T} \right)$$

- Définition de l'aimantation :

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

1. Introduction du problème

1. Physique statistique et modèle d'Ising

- Définition de l'aimantation :

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

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

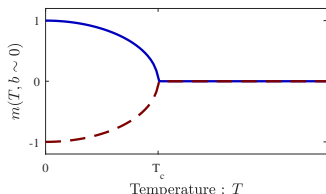


FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:

$$\mathcal{H}(\mathcal{M}, b = 0) = \mathcal{H}(-\mathcal{M}, b = 0)$$

◇ symétrie \mathbb{Z}_2

◇ à $(b = 0, T = 0)$: $m = 0$.

1. Introduction du problème

1. Physique statistique et modèle d'Ising

- Définition de l'aimantation :

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

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

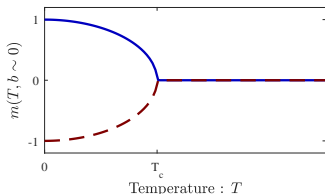


FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:

$$\mathcal{H}(\mathcal{M}, b = 0) = \mathcal{H}(-\mathcal{M}, b = 0)$$

◇ symétrie \mathbb{Z}_2

◇ à $(b = 0, T = 0)$: $m = 0$.

Mais problème :

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

1. Introduction du problème

1. Physique statistique et modèle d'Ising

- Définition de l'aimantation :

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

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

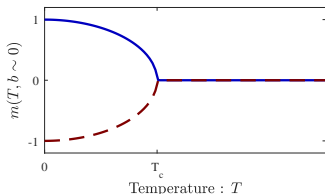


FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:

$$\mathcal{H}(\mathcal{M}, b = 0) = \mathcal{H}(-\mathcal{M}, b = 0)$$

◇ symétrie \mathbb{Z}_2

◇ à $(b = 0, T = 0)$: $m = 0$.

Mais problème :

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

⇒ Brisure de symétrie & Transition de phase

1. Introduction du problème

2. Transition de phase

- Température critique : T_c

1. Introduction du problème

2. Transition de phase

- Température critique : T_c
- Transitions de phase du second ordre :
 - ◊ Fonction de corrélation à deux points :

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

- ◊ Longueur de corrélation ξ :

$$G^{(2)}(r > \xi) \simeq 0 \quad \text{et} \quad G^{(2)}(r < \xi) \neq 0$$

1. Introduction du problème

2. Transition de phase

- Température critique : T_c
- Transitions de phase du second ordre :
 - ◊ Fonction de corrélation à deux points :

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

- ◊ Longueur de corrélation ξ :

$$G^{(2)}(r > \xi) \simeq 0 \quad \text{et} \quad G^{(2)}(r < \xi) \neq 0$$

- Exposants critiques η et ν :

$$\xi \underset{T \rightarrow T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu} \quad \text{et à } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta}$$

1. Introduction du problème

2. Transition de phase

- Température critique : T_c
- Transitions de phase du second ordre :
 - ◊ Fonction de corrélation à deux points :

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

- ◊ Longueur de corrélation ξ :

$$G^{(2)}(r > \xi) \simeq 0 \quad \text{et} \quad G^{(2)}(r < \xi) \neq 0$$

- Exposants critiques η et ν :

$$\xi \underset{T \rightarrow T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu} \quad \text{et à } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta}$$

\Rightarrow Universalité des exposants critiques

⇒ Calcul des exposants critiques : η et ν

- ⇒ Calcul des exposants critiques : η et ν
- ⇒ 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

1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Transition de phase

Objectifs

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

Calcul de la fonction de partition

Le NPRG et les équations BMW

La résolution en trois étapes

3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

Méthode générale

Intérpolation de Tchebychev

4. Etude du modèle d'Ising 2D : Résultats

5. Conclusions

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

1. Calcul de la fonction de partition

- Calcul de T_c pour le modèle d'Ising avec la méthode NPRG et l'approximation BMW. Comparaison avec le résultat du calcul exact.
- Fonction de partition Ising Ising 2D :

$$\mathcal{Z} = \sum_{\mathcal{M}=\{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}} \exp\left(-\frac{\mathcal{H}(\mathcal{M}, b=0)}{k_B T}\right),$$

avec l'hamiltonien \mathcal{H} définit par

$$\mathcal{H}(\mathcal{M} = \{S_{\mathbf{r}}\}_{\mathbf{r}}, b=0) = -J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} \quad (J > 0)$$

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

1. Calcul de la fonction de partition

- Calcul de T_c pour le modèle d'Ising avec la méthode NPRG et l'approximation BMW. Comparaison avec le résultat du calcul exact.
- Réécriture de la fonction de partition :

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

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

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

avec $\mu > 1$, un réel, λ_{μ} une fonction \mathcal{C}^{∞} et la notation

$$\int_{\mathbf{q}} \dots \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \dots d q_x d q_y .$$

- Avec cette notation \mathcal{H}_{μ} dépend de la température T .

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

2. Le NPRG et les équations BMW

- L'équation de flot BMW à résoudre (pour la symétrie \mathbb{Z}_2) :

Trouver $\Gamma_k^{(2)}$ tel que pour tout $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^2$ vérifiant $\|\mathbf{p}\|_2 < \Lambda$, pour tout $\phi \in \mathbb{R}$,

$$\partial_t \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) = J_3(\mathbf{p}, \phi) \left(\partial_\phi \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \right)^2 - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Gamma_k^{(2)}(\mathbf{p}, \phi) \quad \forall k \in]0, \Lambda]$$

Avec les notations $t = \ln(k/\Lambda)$ donnant $\partial_t \dots = k \partial_k \dots$ et

$$J_n(\mathbf{p}, \phi) = \int_{\mathbf{q}} \partial_t \mathcal{R}_k(\mathbf{q}) G_k(\mathbf{p} + \mathbf{q}, \phi) G_k^{n-1}(\mathbf{q}, \phi), \quad I_n(\mathbf{p}) = J_n(\mathbf{p} = 0, \phi).$$

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

(régulateur) $\mathcal{R}_k(\mathbf{q}) \in \mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^{d+1})$ tq. $\lim_{\|\mathbf{q}\|_2 \rightarrow \infty} \partial_t^m \mathcal{R}_k(\mathbf{q}, \phi) = 0 \quad \forall m \in \mathbb{N}$

- Condition initiale : en $k = \Lambda$, dépend de \mathcal{H}_μ .
- Détermination de T_c
 - ◊ Utilisation d'une version adimensionnée de l'équation.
 - ◊ Calculer $\Gamma_k^{(2)}$ en $k \rightarrow 0$.

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

3. La résolution en trois étapes

- Système d'équation à résoudre :

Trouver (Δ_k, X_k) , solution de (\mathcal{E}_1) , i.e tels que pour tout $p_x \in [-\pi, \pi]$, $p_y \in [-\pi, \pi]$, $\phi \in \mathbb{R}$, $k \in [0, \Lambda]$

$$\begin{aligned}\partial_t \Delta_k(p_x, p_y, \phi) &= J_3(p_x, p_y, \phi) \partial_\phi \{ \Delta_k(p_x, p_y, \phi) + X_k(\phi) \} \\ &\quad - \frac{1}{2} I_2(\phi) \partial_\phi^2 \Delta_k(p_x, p_y, \phi) - I_3(\phi) (\partial_\phi X_k(\phi))^2 \\ \partial_t X_k(\phi) &= \frac{1}{2} \partial_\phi^2 I_1(\phi),\end{aligned}$$

avec la condition initiale

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

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

3. La résolution en trois étapes

- Mais problème :

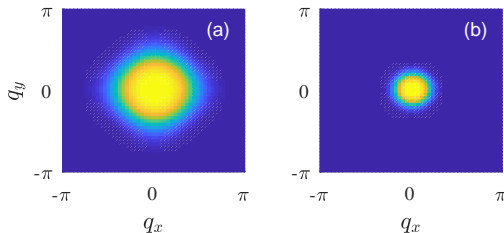


FIGURE – Evolution de $(q_x, q_y) \rightarrow \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y)$

$$I_n, J_n \propto \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \partial_t \mathcal{R}_k(q_x, q_y) \times \dots dq_x dq_y$$

- Changement de système d'équation (pour $k < k_a$) :
Utilisation des variables $\tilde{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/k = (p_x/k, p_y/k)$
- Changement de système d'équation (pour $k < k_b < k_a$) :
Passage à un système d'équations totalement adimensionné.
Recherche d'une solution particulière dite "de point fixe".

1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Transition de phase

Objectifs

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

Calcul de la fonction de partition

Le NPRG et les équations BMW

La résolution en trois étapes

3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

Méthode générale

Interpolation de Tchebychev

4. Etude du modèle d'Ising 2D : Résultats

5. Conclusions

3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

1. Méthode générale

- Discrétisation en temps : schéma d'Euler explicite.
- Discrétisation en champ : grille fixe. Dérivée avec schéma à 5 points.
- Calcul des intégrales : quadrature de Gauss-Legendre
 - ◊ On cherche à calculer :

$$K = \int_{-a}^a \int_{-a}^a f(q_x, q_y) dq_x dq_y$$

- ◊ Utilisation de $\{\xi\}_i$ points d'intégrations de Gauss-Legendre sur $[-1, 1]$ et $\{w_i\}_i$ les poids associés :

$$K \simeq a^2 \sum_{i=1}^{n_{gl}} \sum_{j=1}^{n_{gl}} w_i w_j f(a\xi_i, a\xi_j)$$

- ◊ Utilisation des symétries des fonctions pour réduire les calculs.

- Interpolation de Tchebychev en deux dimensions :

Soit f une fonction de deux variables de $[a, b]^2$ dans \mathbb{R} . On note $\{x_n\}_n$ ou $\{x_n\}_n$ l'ensemble des n_c racines du polynôme de Tchebychev d'ordre n_c .

On introduit :

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

\Rightarrow Approximation de rang faible de cette matrice

- Interpolation de Tchebychev en deux dimensions :

Algorithme d'approximation par élimination Gaussienne

```
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
```

$$\mathcal{F} \simeq \sum_{j=1}^Q d_j \mathcal{C}^j \mathcal{R}^j \Rightarrow f(x, y) \simeq \sum_{j=1}^Q d_j c^j(y) r^j(x)$$

1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Transition de phase

Objectifs

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

Calcul de la fonction de partition

Le NPRG et les équations BMW

La résolution en trois étapes

3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

Méthode générale

Intérpolation de Tchebychev

4. Etude du modèle d'Ising 2D : Résultats

5. Conclusions

4. Etude du modèle d'Ising 2D : Résultats

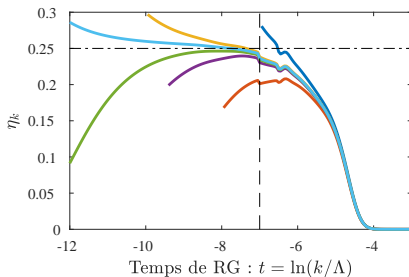


FIGURE – Évolution de η_k en fonction de t pour différentes valeurs de la température T .

- Encadrement de la température critique

$$2.350 J/k_B < T_c^{BMW} < 2.375 J/k_B \quad (1)$$

- Comparaison à la température théorique attendue

$$err = \frac{|T_c^{BMW} - T_c^{th}|}{T_c^{th}} \sim 4\% \quad (2)$$

1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Transition de phase

Objectifs

2. Etude du modèle d'Ising 2D : Mise en équation

Calcul de la fonction de partition

Le NPRG et les équations BMW

La résolution en trois étapes

3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

Méthode générale

Intérpolation de Tchebychev

4. Etude du modèle d'Ising 2D : Résultats

5. Conclusions

- Première étude :
 - ◇ Réorganisation du code
 - ◇ Réécriture de la méthode de quadrature
 - ◇ Quelques changements sans résultats conséquents
- Seconde étude (Ising 2D) :
 - ◇ Mise en place de différentes techniques numériques
 - ◇ Tentative de résolution de problèmes de temps de calculs
 - ◇ Résultats pour une première série de test : erreur de 4 %
 - ◇ Résultats contrastée car erreurs numériques