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

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

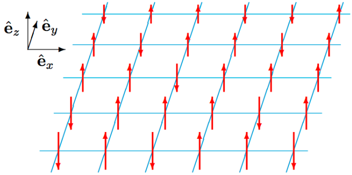


FIGURE – Modèle d'Ising.

- Spin et configuration :

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

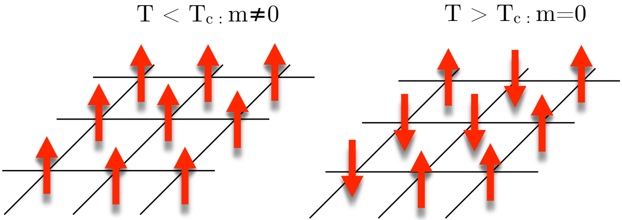
- Energie d'une config. $\mathscr{M}$: $\mathcal{H}(\mathscr{M}, b)$

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

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

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

- Définition de l'aimantation : $m(T, b) = \left\langle \frac{1}{N_s} \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}} \right\rangle$
- Evolution de m avec la température T : **transition de phase**



- Fonction de corrélation à deux points :

$$G^{(2)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \langle S_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}'} \rangle \quad \text{et} \quad \Gamma^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \simeq \frac{1}{G^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}$$

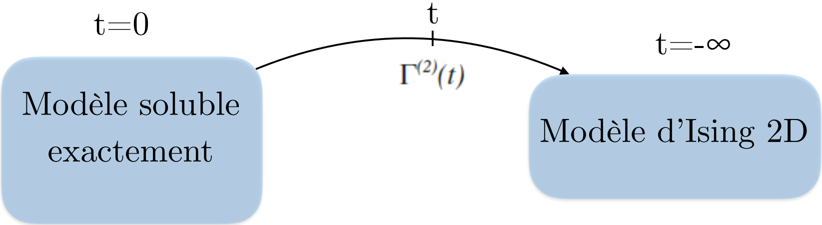
$\Rightarrow$ Calcul de la température critique : T_c
$\Rightarrow$ Calcul des exposants critiques

⇒ Calcul de la température critique : T_c
⇒ Calcul des exposants critiques

• Contexte :
Calcul de T_c très complexe : pas de méthode générale.
Méthode du Groupe de Renormalisation Non Perturbatif (NPRG)
Résolution par approximation BMW (Blaizot - Méndez-Galain - Wschebor)
Des codes existants mettent déjà en oeuvre la méthode NPRG + BMW

• Objectif :
Calculer de T_c avec la méthode NPRG et l'approximation BMW
Benchmarking de l'approximation BMW

- Le principe du NPRG :



- Transformation continue vers le modèle étudié (asymptotiquement).
- t : temps du groupe de renormalisation (de RG).

- L'équation de BMW à résoudre :

Trouver $\Gamma^{(2)}$ *tel que pour tout* $(\mathbf{p},\phi,t)\in[-\pi,\pi]^2\times\mathbb{R}\times]-\infty,0]$,

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

Avec les notations

$$J_n(t,\mathbf{p},\phi)=\int_{[-\pi,\pi]^2}\partial_t\mathcal{R}(t,\mathbf{q})\,G(t,\mathbf{p}+\mathbf{q},\phi)\,G^{n-1}(t,\mathbf{q},\phi)\mathrm{d}\mathbf{q}\,,$$

$$I_n(t,\phi)=J_n(t,\mathbf{p}=0,\phi)$$

$$G(t,\mathbf{q},\phi)=\frac{1}{\Gamma^{(2)}(t,\mathbf{q},\boldsymbol{\phi})+\mathcal{R}(t,\mathbf{q})}\qquad\textit{(propagateur)}$$

$$\mathcal{R}(t,\mathbf{q})\in\mathcal{C}^\infty(\mathbb{R}^3)\qquad\textit{(régulateur)}$$

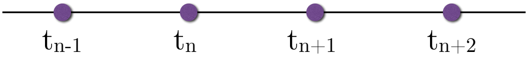
- Condition initiale : en $t=0$, dépend de la température T.
- Détermination de T_c : calcul de $\Gamma^{(2)}$ en $t\to-\infty$

Objectif : discrétiser et faire des calculs sur la fonction

$$(t, q_x, q_y, \phi) \to \Gamma^{(2)}(t, q_x, q_y, \phi)$$

- Discrétisation en temps t :
  - ◇ Grille de points $\{t_n\}_n$ régulièrement espacés.
  - ◇ Schéma d'Euler explicite : $\partial_t \Gamma^{(2)}(t, ...) = \left(\Gamma^{(2)}(t_n, ...) - \Gamma^{(2)}(t_{n-1}, ...)\right) / \delta t$

- Discrétisation en champ ϕ :
  - ◇ Grille de points $\{\phi_n\}_n$ régulièrement espacés.
  - ◇ Calcul des dérivées $\partial_\phi \Gamma^{(2)}(..., \phi)$ avec des schémas à 5 points.



- Calcul des intégrales :

$$J_3(t, p_x, p_y, \phi) = \int_{[-\pi,\pi]^2} \frac{\partial_t \mathcal{R}(t, q_x, q_y)}{\Gamma^{(2)}(t, p_x + q_x, p_y + q_y, \phi) + \mathcal{R}(t, q_x, q_y)} \times \left\{ \frac{1}{\Gamma^{(2)}(t, q_x, q_y, \phi) + \mathcal{R}(t, q_x, q_y)} \right\}^2 \mathrm{d}q_x \mathrm{d}q_y$$

$$I_2(t, \phi) = \int_{[-\pi,\pi]^2} \partial_t \mathcal{R}(t, q_x, q_y) \left\{ \frac{1}{\Gamma^{(2)}(t, q_x, q_y, \phi) + \mathcal{R}(t, q_x, q_y)} \right\}^2 \mathrm{d}q_x \mathrm{d}q_y$$

- Premier problème :

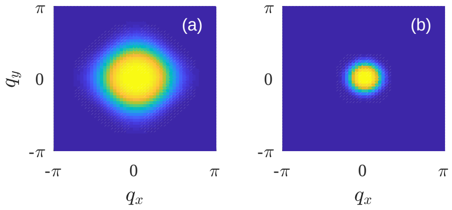


FIGURE – Représentation de $\partial_t \mathcal{R}(t_1, q_x, q_y)$, $\partial_t \mathcal{R}(t_2, q_x, q_y)$, avec $t_2 < t_1$

La solution : Utiliser des variables $(\tilde{q}_x, \tilde{q}_y) = (e^{-t} q_x, e^{-t} q_y)$.

- Quadrature de Gauss-Legendre :

  ⋄ On note $\{\xi_i\}_i$ les zéros du polynômes de Legendre d'ordre $n_{gl}+1$ et $\{w_i\}_i$ les poids de la quadrature associés :

$$I_2(t,\phi) \simeq \pi^2 \sum_{i=1}^{n_{gl}} \sum_{j=1}^{n_{gl}} w_i w_j \partial_t \mathcal{R}(t_n, q_i, q_j) \left\{ \frac{1}{\Gamma^{(2)}(t_n, q_i, q_j, \phi_m) + \mathcal{R}(t_n, q_i, q_j)} \right\}^2$$

  Avec $q_i = \frac{\pi}{2}(\xi_i + 1)$ (points d'intégration de Gauss-Legendre)

  ⋄ Utilisation des symétries de $\Gamma^{(2)}$ pour réduire les calculs.

- Second problème : le calcul de $J_3(t, p_x, p_y, \phi)$ avec cette technique

  ⋄ Impossible de ne connaitre $\Gamma^{(2)}$ qu'au points de Gauss-Legendre
  ⋄ Incompatibilité lors du passage de $t_n \to t_{n+1}$
  ⋄ La solution : interpoler $\Gamma^{(2)}$

- Interpolation de Tchebytchev en deux dimensions :

On note $\{x_n\}_n$ les zéros du polynôme de Tchebytchev d'ordre n_c.

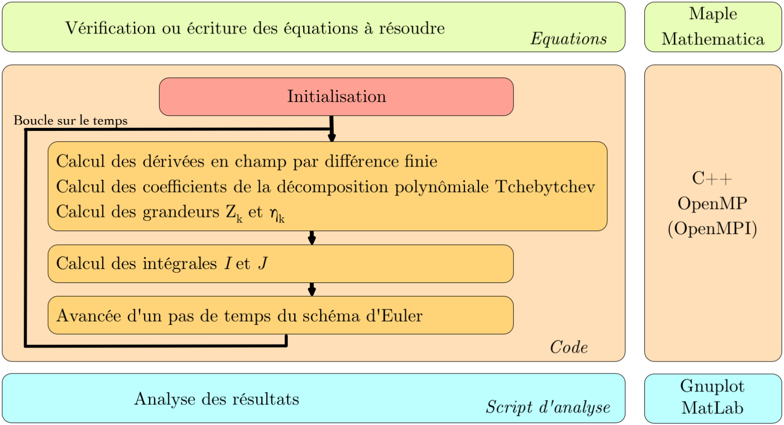
On introduit : $\mathcal{F} = \left(\Gamma^{(2)}\left(t_k, \pi x_m, \pi x_n, \phi_l\right)\right)_{m,n}$

$\Rightarrow$ Approximation de rang faible de $\mathcal{F}$ par élimination gaussienne

---

Initialisation : $\mathcal{E}^0 = \mathcal{F}$; $\mathcal{F}_0 = 0$; $k = 1$;
while $\|\mathcal{E}^k\|_\infty < \varepsilon \|\mathcal{E}^0\|_\infty$ **do**
    $(i_k, j_k) = \operatorname{argmax}_{(i,j)} \left\{\left|\mathcal{E}^{k-1}_{i,j}\right|\right\}$
    $\mathcal{C}^k_j = \mathcal{E}^k_{i_k,j}$; $\mathcal{R}^k_i = \mathcal{E}^k_{i,j_k}$; $d_k = \mathcal{E}^k_{i_k,j_k}$
    $\mathcal{E}^k_{i,j} = \mathcal{E}^{k-1}_{i,j} - d_k^{-1} \mathcal{C}^k_j \mathcal{R}^k_i$
    $\mathcal{F}^k_{i,j} = \mathcal{F}^{k-1}_{i,j} + d_k^{-1} \mathcal{C}^k_j \mathcal{R}^k_i$
end while

$$\mathcal{F} \simeq \sum_{j=1}^{Q} d_j \mathcal{C}^j \mathcal{R}^j \Rightarrow \Gamma^{(2)}(t_k, q_x, q_y, \phi_l) \simeq \sum_{j=1}^{Q} d_j c^j(t_k, q_y, \phi_l) r^j(t_k, q_x, \phi_l)$$


Vérification ou écriture des équations à résoudre
Equations
Maple
Mathematica
Initialisation
Boucle sur le temps
Calcul des dérivées en champ par différence finie
Calcul des coefficients de la décomposition polynômiale Tchebytchev
Calcul des grandeurs Z_k et η_k
Calcul des intégrales I et J
Avancée d'un pas de temps du schéma d'Euler
Code
C++
OpenMP
(OpenMPI)
Analyse des résultats
Script d'analyse
Gnuplot
MatLab

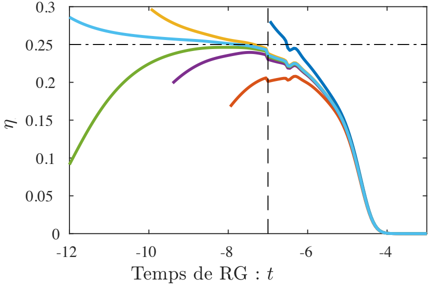


FIGURE – Évolution de η en fonction de t pour différentes valeurs de la températue T.

- Encadrement de la température critique

$$2.350 < T_c^{BMW} < 2.375 \tag{1}$$

- Comparaison à la température théorique attendue $T_c^{exact} \simeq 2.269$

$$err = \frac{|T_c^{BMW} - T_c^{exact}|}{T_c^{exact}} \sim 4\% \tag{2}$$

- 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 calcul
  - ◇ Résultats pour une première série de test : erreur de 4 %
  - ◇ Résultats contrastés car erreurs numériques

$\Rightarrow$ Calcul de T_c semble possible avec cette méthode !