



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

Objectifs de l'étude

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

Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

L'équation de l'approximation BMW

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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation de Tchebychev

Vue d'ensemble

## 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

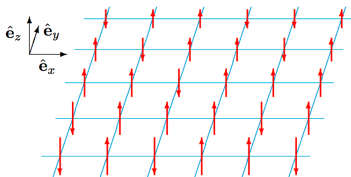


FIGURE – Modèle d'Ising.

- Spin et configuration :

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

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

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

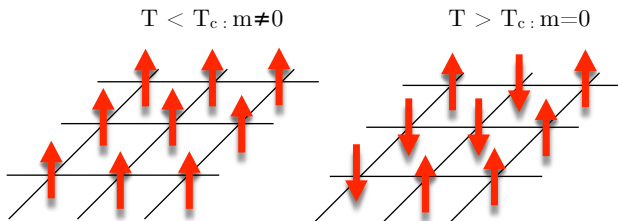
- Probabilité d'une config.  $\mathcal{M} :$

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

# 1. Introduction du problème

## 1. Physique statistique et modèle d'Ising

- 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 :

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

## 1. Introduction du problème

### 2. Objectifs de l'étude

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

# 1. Introduction du problème

## 2. Objectifs de l'étude

- ⇒ 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 cette résolution

- Objectif :

Calculer de  $T_c$  avec la méthode NPRG et l'approximation BMW

Benchmarking de l'approximation BMW

## 1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Objectifs de l'étude

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

Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

L'équation de l'approximation BMW

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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation de Tchebychev

Vue d'ensemble

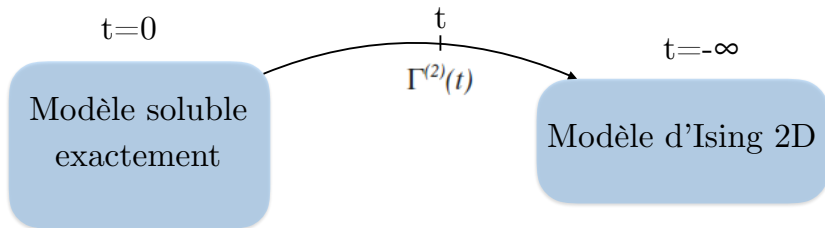
## 4. Etude du modèle d'Ising 2D : Résultats

## 5. Conclusions

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

### 1. Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

- Le principe du NPRG :





- 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

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

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

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

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

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

## 1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Objectifs de l'étude

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

Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

L'équation de l'approximation BMW

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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation de Tchebychev

Vue d'ensemble

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

## 5. Conclusions

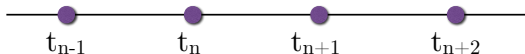
### 3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

#### 1. Discrétisation en temps et en champs

Objectif : discrétiser et faire des calculs sur la fonction

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

- Discrétisation en temps  $t$  :
  - ◇ Grille de points  $\{t_n\}_n$  régulièrement espacés.
  - ◇ Schéma d'Euler explicite :  $\partial_t \Gamma^{(2)}(t, \dots) = \left( \Gamma^{(2)}(t_n, \dots) - \Gamma^{(2)}(t_{n-1}, \dots) \right) / \delta t$
- Discrétisation en champ  $\phi$  :
  - ◇ Grille de points  $\{\phi_n\}_n$  régulièrement espacés.
  - ◇ Calcul des dérivées  $\partial_\phi \Gamma^{(2)}(\dots, \phi)$  avec des schémas à 5 points.



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

#### 2. Intégration de Gauss Legendre

- Calcul des intégrales :

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

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

- Premier problème :

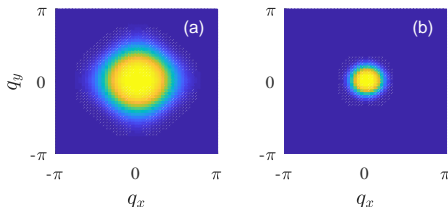


FIGURE – Représentation de  $\partial_t \mathcal{R}(t_1, q_x, q_y)$ ,  $\partial_t \mathcal{R}(t_2, q_x, q_y)$ , avec  $t_2 < t_1$

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

- Quadrature de Gauss-Legendre :

◊ Utilisation de  $\{\xi_i\}_i$  points d'intégrations de Gauss-Legendre (zéros du polynômes de Legendre d'ordre  $n_{gl}$ ) sur  $[-1, 1]$  et  $\{w_i\}_i$  les poids associés :

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

Avec  $q_i = \frac{\pi}{2} (\xi_i + 1)$

◊ 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

◊ Nécessité d'intégrer des fonctions de  $(p_x + q_x, p_y + q_y)$

◊  $p_j = \frac{\pi}{2} (\xi_j + 1)$ ,  $q_i = \frac{\pi}{2} (\xi_i + 1) \rightarrow$  on ne connaît pas  $\Gamma^{(2)}(t, q_i + p_j, \dots)$

◊ La solution : interpoler  $\Gamma^{(2)}$

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

#### 3. Interpolation de Tchebychev

- Interpolation de Tchebychev en deux dimensions :

On note maintenant  $\{x_n\}_{n \in \llbracket 1, n_c \rrbracket}$  l'ensemble des  $n_c$  racines dans  $[-1, 1]$  du polynôme de Tchebychev d'ordre  $n_c$ .

On introduit :  $\mathcal{F} = \left\langle \Gamma^{(2)}(t_i, \pi x_m, \pi x_n, \phi_j) \right\rangle_{m,n}$

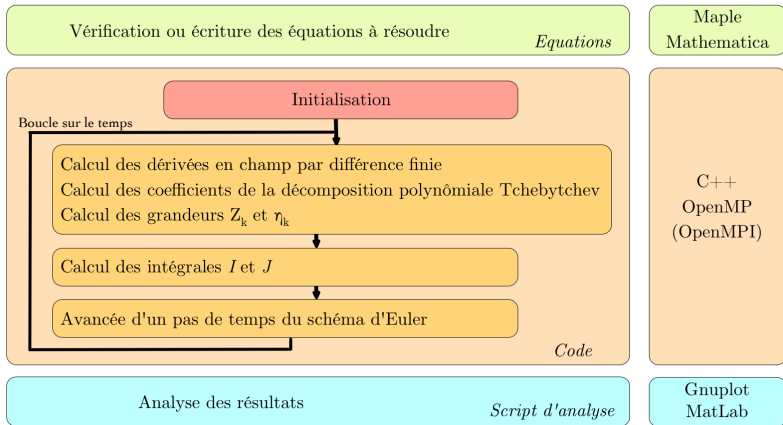
$\Rightarrow$  Approximation de rang faible de  $\mathcal{F}$  par élimination gaussienne

- 
- 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**
- 

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

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

#### 4. Vue d'ensemble



## 1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Objectifs de l'étude

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

Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

L'équation de l'approximation BMW

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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation de Tchebychev

Vue d'ensemble

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

## 5. Conclusions



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

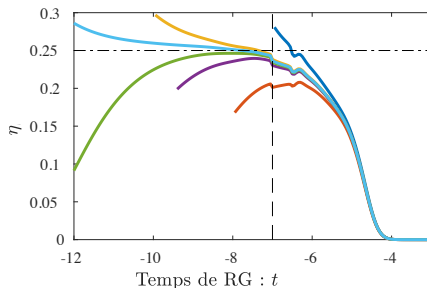


FIGURE – Évolution de  $\eta$  en fonction de  $t$  pour différentes valeurs de la température  $T$ .

- Encadrement de la température critique

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

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

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

## 1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Objectifs de l'étude

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

Le groupe de renormalisation non perturbatif (NPRG)

L'équation de l'approximation BMW

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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation de Tchebychev

Vue d'ensemble

## 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
- ⇒ Calcul de  $T_c$  possible avec cette méthode !