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
   - Intérpolation de Tchebytchev
   - Calcul des intégrales

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

5. Conclusions

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

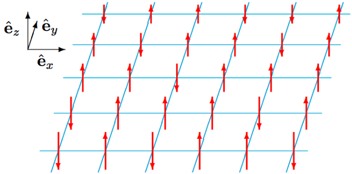

FIGURE – Modèle d'Ising.

- Spin et configuration :

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

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

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

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

- Fonction de partition :

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

- Définition de l'aimantation :

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

- Définition de l'aimantation :

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

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

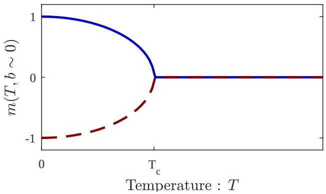

FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:
$\mathcal{H}(\mathscr{M}, b = 0) = \mathcal{H}(-\mathscr{M}, b = 0)$

- ◇ symétrie $\mathbb{Z}_2$
- ◇ à $(b = 0, T = 0)$: $m = 0$.

- Définition de l'aimantation :

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

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

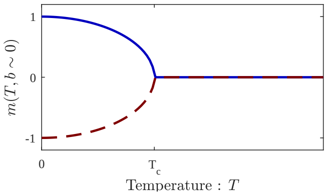

FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:
$\mathcal{H}(\mathscr{M}, b=0) = \mathcal{H}(-\mathscr{M}, b=0)$

- ◇ symétrie $\mathbb{Z}_2$
- ◇ à $(b=0, T=0)$: $m=0$.

Mais problème :

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

- Définition de l'aimantation :

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

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

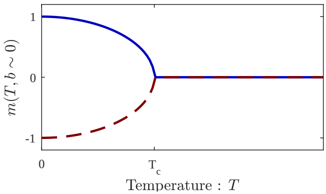

FIGURE – Aimantation m vs T

Invariance par échange de $\hat{\mathbf{e}}_z$ en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:
$\mathcal{H}(\mathscr{M}, b = 0) = \mathcal{H}(-\mathscr{M}, b = 0)$

- ◇ symétrie $\mathbb{Z}_2$
- ◇ à $(b = 0, T = 0)$: $m = 0$.

Mais problème :

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

$\Rightarrow$ 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 :

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

  - ◇ Longueur de corrélation ξ :

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

- Température critique : T_c

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

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

  - ◇ 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 :

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

- Température critique : T_c

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

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

  - ◇ 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 :

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

$\Rightarrow$ Universalité des exposants critiques

$\Rightarrow$ 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 :
  - Réecriture 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 :
  - Réecriture 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 Tchebytchev
  Calcul des intégrales

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

5. Conclusions

• 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 :

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

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

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

- 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 :

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

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

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

avec $\mu > 1$, un réel, λ_μ une fonction $\mathcal{C}^\infty$ et la notation

$$\int_{\mathbf{q}} \ldots \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ldots \mathrm{d}\, q_x \mathrm{d}\, q_y$$

- 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* $\phi \in \mathbb{R}$,

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

Avec les notations, $\partial_t \ldots = k\partial_k \ldots$ *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) $\quad G_k(\mathbf{q}, \phi) = \dfrac{1}{\Gamma_k^{(2)}(\mathbf{q}, \boldsymbol{\phi}) + \mathcal{R}_k(\mathbf{q})}$

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

- Condition initiale : en $k = \Lambda$, dépend de $\mathcal{H}_\mu$.
- Objectif : Calculer $\Gamma_k^{(2)}$ en $k \to 0$.

- Résolution des équations BMW en trois étapes :
  - ◇ Intérêt des trois étapes : précision du calcul
  - ◇ Mise en pratique : 3 systèmes à résoudre à la suite

- Première étape :

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

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

avec la condition intiale

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

- Problème :

$$\partial_t \mathcal{R}_k \tag{1}$$

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 Tchebytchev
Calcul des intégrales

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

5. Conclusions

- Discrétisation en temps : schéma d'Euler explicite.
- Discrétisation en champ : grille fixe. Dérivée avec schéma à 5 points.
- Discrétisation en moment : méthode pseudo-spectrale
- Calcul des intégrales : quadrature de Gauss-Legendre

◇ Interpolation de Tchebytechev 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 Tchebytchev 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 Tchebytechev 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: $\quad (i_k, j_k) = \text{argmax}_{(i,j)} \left\{ \left| \mathcal{E}^{k-1}_{i,j} \right| \right\}$
4: $\quad \mathcal{C}^k_j = \mathcal{E}^k_{i_k,j}$; $\mathcal{R}^k_i = \mathcal{E}^k_{i,j_k}$; $d_k = \mathcal{E}^k_{i_k,j_k}$
5: $\quad \mathcal{E}^k_{i,j} = \mathcal{E}^{k-1}_{i,j} - d_k^{-1} \mathcal{C}^k_j \mathcal{R}^k_i$
6: $\quad \mathcal{F}^k_{i,j} = \mathcal{F}^{k-1}_{i,j} + d_k^{-1} \mathcal{C}^k_j \mathcal{R}^k_i$
7: **end while**

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

◇ Calcul des intégrales : quadrature de Gauss-Legendre ◇ Utilisation des symétries

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 Tchebytchev
Calcul des intégrales

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

5. Conclusions

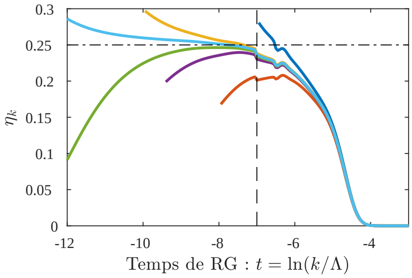

FIGURE – Évolution de η_k en fonction de t pour différentes valeurs de la températue T.

- Encadrement de la température critique

$$2.350\, J/k_B < T_c^{BMW} < 2.375\, J/k_B \tag{2}$$

- Comparaison à la température théorique attendue

$$err = \frac{|T_c^{BMW} - T_c^{th}|}{T_c^{th}} \sim 4\% \tag{3}$$

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 Tchebytchev
   - Calcul des intégrales

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

5. Conclusions

- Une première étude sans grandes avancées.
  - Réorganisation du code
  - Réécriture de la méthode de quadrature
  - Quelques changements sans résultats conséquents

- Une seconde étude inachevée mais avec des résultats
  - 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