



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

Intérpolation de Tchebychev

Calcul des intégrales

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

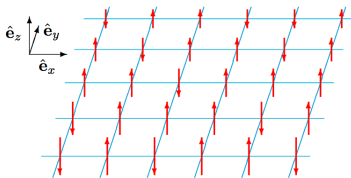


FIGURE – Modèle d'Ising.

- 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 :

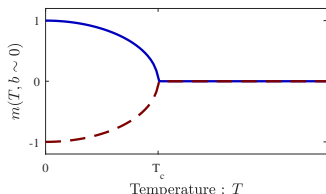


FIGURE – Aimantation m vs T

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 :

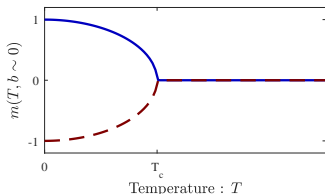


FIGURE – Aimantation m vs T

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 :

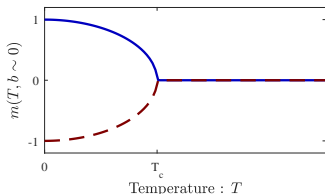


FIGURE – Aimantation m vs T

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

Calcul des intégrales

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

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

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 $\phi \in \mathbb{R}$ et pour tout $k \in]0, \Lambda]$,

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

Avec les notations,

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

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

Définition du propagateur et du régulateur

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

Condition initiale en $k = \Lambda$ connue, dépend de \mathcal{H}_μ .

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

3. La résolution en trois étapes

- 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 $p_x \in [-\pi, \pi]$, $p_y \in [-\pi, \pi]$, $\phi \in \mathbb{R}$, $k \in [k_a, \Lambda]$

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

avec la condition initiale

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

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

Calcul des intégrales

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.
- Discrétisation en moment : méthode pseudo-spectrale
- Calcul des intégrales : quadrature de Gauss-Legendre

◇ 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
```

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

◇ 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 Tchebychev

Calcul des intégrales

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

5. Conclusions

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

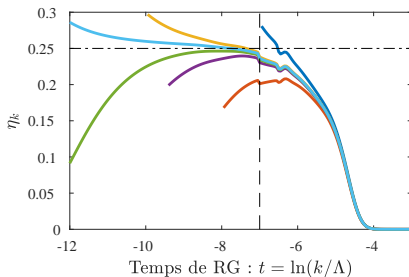


FIGURE – Évolution de η_k en fonction de t pour différentes valeurs de la température T .

- 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

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

5. Conclusions