



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

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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

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

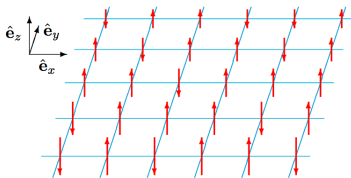


FIGURE – Modèle d'Ising.

- Spin et configuration :

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

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

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

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

- 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 :

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

# 1. Introduction du problème

## 1. Physique statistique et modèle d'Ising

- Définition de l'aimantation :

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

- Evolution de l'aimantation  $m(T, b = 0)$  avec la température  $T$  :

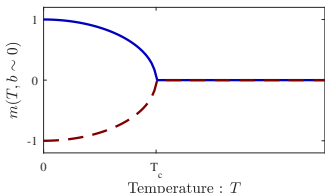


FIGURE – Aimantation  $m$  vs  $T$  à  $b \sim 0$

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  $\mathbb{Z}_2$

$$\diamond m(b = 0, T = 0) = 0.$$

# 1. Introduction du problème

## 1. Physique statistique et modèle d'Ising

- Définition de l'aimantation :

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

- Evolution de l'aimantation  $m(T, b = 0)$  avec la température  $T$  :

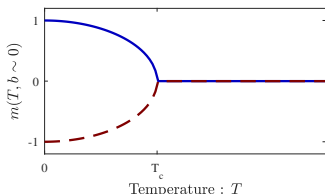


FIGURE – Aimantation  $m$  vs  $T$  à  $b \sim 0$

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  $\mathbb{Z}_2$

$$\diamond m(b = 0, T = 0) = 0.$$

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 :

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

- Evolution de l'aimantation  $m(T, b=0)$  avec la température  $T$  :

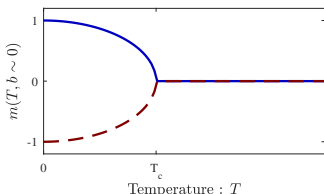


FIGURE – Aimantation  $m$  vs  $T$  à  $b \sim 0$

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  $\mathbb{Z}_2$

$$\diamond m(b=0, T=0) = 0.$$

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. 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
- Méthode : calcul de la fonction de partition  $\mathcal{Z}$
- Utilisation du NPRG
- Utilisation de l'approximation BMW
- Benchmarking de l'approximation BMW

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

- Méthode : calcul de la fonction de partition  $\mathcal{Z}$
- Utilisation du NPRG
- Utilisation de l'approximation BMW
- Benchmarking de l'approximation BMW

- Deuxième étude :
  - ▶ Ecriture d'un nouveau code pour calculer  $T_c$ .
  - ▶ Comparaison à la valeur théorique : benchmarking de la méthode

## 1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Objectifs de l'étude

## 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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation 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.
- Réécriture de la fonction de partition :

$$\mathcal{Z} \propto \int \prod_{\mathbf{r}} d\varphi(\mathbf{r}) \exp(-\mathcal{H}[\varphi]) ,$$

avec  $\varphi \in \mathcal{C}^0(\mathbb{R}^2)$  et l'hamiltonien  $\mathcal{H}$  défini par

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

avec  $\lambda$  une fonction  $\mathcal{C}^\infty$  et la notation

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

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

- L'équation de flot 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  $\mathcal{H}$  et donc de  $T$ .
- Détermination de  $T_c$  : calcul de  $\Gamma^{(2)}$  en  $t \rightarrow -\infty$

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

### 3. La résolution en trois étapes

- Problème :

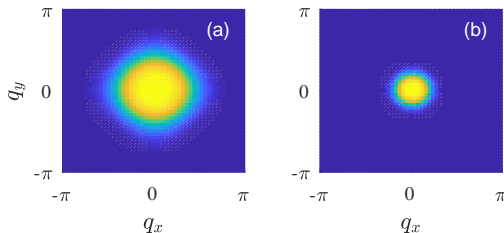


FIGURE – Représentation de  $\partial_t \mathcal{R}(t_1, q_x, q_y)$ ,  $\partial_t \mathcal{R}(t_2, q_x, q_y)$ , avec  $t_2 < t_1$

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

- Changement de système d'équation (pour  $t < t_a$ ) :  
Utilisation des variables  $\tilde{\mathbf{q}} = e^{-t} \mathbf{q} = (e^{-t} q_x, e^{-t} q_y)$
- Changement de système d'équation (pour  $t < t_b < t_a$ ) :  
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

Objectifs de l'étude

## 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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation de Tchebychev

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

## 5. Conclusions

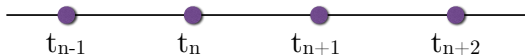
### 3. Etude du modèle d'Ising 2D : Méthodes numériques

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

Objectif : discrétiser et faire des calculs sur des fonctions

$$(t, q_x, q_y, \phi) \rightarrow f(t, q_x, q_y, \phi)$$

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





- Calcul des intégrales : quadrature de Gauss-Legendre

◇ On cherche à calculer :

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

◇ 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 :

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

◇ Utilisation des symétries des fonctions pour réduire les calculs.

- Problème : le calcul de  $J_n(t, p_x, p_y, \phi) = \int g(t, p_x + q_x, p_y + q_y, \phi)$

◇ On ne connaît  $g$  qu'au point de discrétisation des fonctions inconnues.

◇ Si  $q_x = a\xi_i$  et  $p_x = a\xi_j$ , généralement  $p_x + q_x \neq a\xi_m \forall m \in \llbracket 1, n_{gl} \rrbracket$

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

#### 3. Interpolation de Tchebychev

- Interpolation de Tchebychev en deux dimensions :

Soit  $f$  une fonction de deux variables de  $[a, b]^2$  dans  $\mathbb{R}$ . On note  $\{x_n\}_{n \in \llbracket 1, n_c \rrbracket}$  l'ensemble des  $n_c$  racines du polynôme de Tchebychev d'ordre  $n_c$ .

On introduit :

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

$\Rightarrow$  Approximation de rang faible de cette matrice

- Interpolation de Tchebytchev 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

Objectifs de l'étude

## 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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation de Tchebychev

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

## 5. Conclusions

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

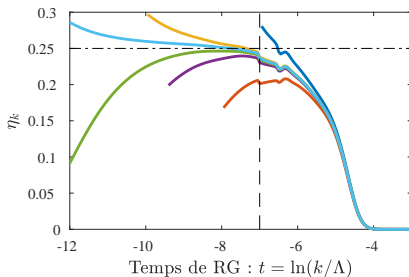


FIGURE – Évolution de  $\eta_k$  en fonction de  $t$  pour différentes valeurs de la température  $T$ .

- Encadrement de la température critique

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

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

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

## 1. Introduction du problème

Physique statistique et modèle d'Ising

Objectifs de l'étude

## 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

Discrétisation en temps et en champs

Intégration de Gauss Legendre

Interpolation 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