



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

## 2. Groupe de renormalisation et objectif

Le groupe de renormalisation (RG)  
Les équations BMW  
Objectifs

## 3. Le problème du modèle d'Ising 2D

Mise en équations  
Méthodes numériques

- Modèle d'Ising 2D carré :
  - ▶ Réseau carré de pas  $a$ .
  - ▶  $N_s$  spins à une composante.

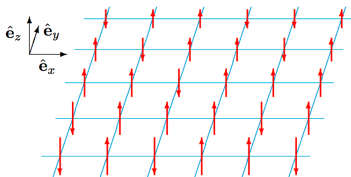


FIGURE – Modèle d'Ising.

- 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.  $\mathcal{M} :$

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

- Fonction de partition :

$$Z = \sum_{\mathcal{M}} \exp(-\mathcal{H}(\mathcal{M}, b)/(k_B T))$$

- 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  $T$  :

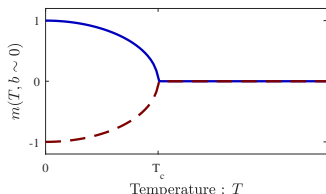


FIGURE – Aimantation  $m$  vs  $T$

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  $T$  :

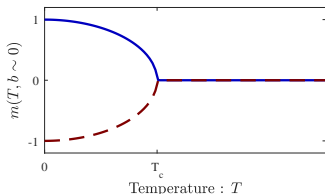


FIGURE – Aimantation  $m$  vs  $T$

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  $T$  :

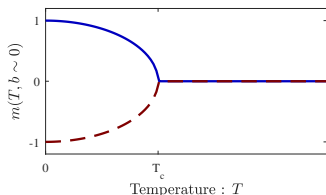


FIGURE – Aimantation  $m$  vs  $T$

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 :

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

$$\text{Pour } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta},$$

- ◊ Longueur de corrélation :

$$\xi \underset{T \rightarrow T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu}$$

# 1. Introduction du problème

## 2. Transition de phase

- Température critique :  $T_c$
- Transitions de phase du second ordre :
  - ◊ Fonction de corrélation à deux points :

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

$$\text{Pour } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta},$$

- ◊ Longueur de corrélation :

$$\xi \underset{T \rightarrow T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu}$$

$\Rightarrow$  Exposants critiques :  $\eta$  et  $\nu$

# 1. Introduction du problème

## 2. Transition de phase

- Température critique :  $T_c$
- Transitions de phase du second ordre :
  - ◊ Fonction de corrélation à deux points :

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

$$\text{Pour } T = T_c, \quad G^{(2)}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} |r|^{2-d-\eta},$$

- ◊ Longueur de corrélation :

$$\xi \underset{T \rightarrow T_c}{\sim} |T - T_c|^{-\nu}$$

$\Rightarrow$  Exposants critiques :  $\eta$  et  $\nu$

- Universalité des exposants critiques

## 2. Groupe de renormalisation et objectif

### 1. Le groupe de renormalisation (RG)

- Fonction de partition exprimée avec des champs :

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}\varphi \exp(-\mathcal{H}[\varphi]/(k_B T))$$

- Transformée de Fourier :

$$\hat{\varphi}_{\mathbf{p}} = \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r},$$

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{\varphi}_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$$

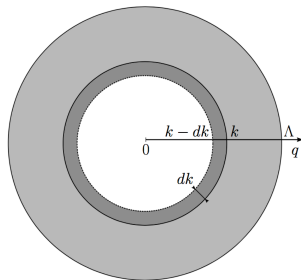


FIGURE – Principe du RG  
Thèse de Frédéric Léonard

- $\|\mathbf{p}\|_2 \in [0, \Lambda]$

- En pratique :  $\mathcal{Z}_k \xrightarrow{\text{NPRG}} \Gamma_k \xrightarrow{\text{BMW}} \Gamma_k^{(2)}$

- 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,

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

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

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

⇒ Calcul des exposants critiques :  $\eta$  et  $\nu$

- ⇒ Calcul des exposants critiques :  $\eta$  et  $\nu$
- ⇒ Calcul de la température critique :  $T_c$

⇒ Calcul des exposants critiques :  $\eta$  et  $\nu$

⇒ Calcul de la température critique :  $T_c$

- Première étude :

- ▶ Réécriture en C++ d'un code permettant de calculer  $\eta$  et  $\nu$
- ▶ Recherche des problèmes et tentatives de résolution



⇒ Calcul des exposants critiques :  $\eta$  et  $\nu$

⇒ Calcul de la température critique :  $T_c$

- Première étude :

- ▶ Réécriture en C++ d'un code permettant de calculer  $\eta$  et  $\nu$
- ▶ 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

## 2. Groupe de renormalisation et objectif

Le groupe de renormalisation (RG)  
Les équations BMW  
Objectifs

## 3. Le problème du modèle d'Ising 2D

Mise en équations  
Méthodes numériques

### 3. Le problème du modèle d'Ising 2D

#### 1. Mise en équations

- Réécriture de la fonction de partition :

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

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

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

### 3. Le problème du modèle d'Ising 2D

#### 1. Mise en équations

- 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  $\mathcal{H}_{\mu}$  définit par

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

### 3. Le problème du modèle d'Ising 2D

#### 1. Mise en équations

- 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  $\mathcal{H}_{\mu}$  définit par

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

Avec la notation des intégrales :  $\int_{\mathbf{q}} \dots \equiv \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \dots d q_x d q_y$

Nous avons aussi introduit les fonctions

$$\gamma(\mathbf{q}) = \frac{1}{2} (\cos(q_x) + \cos(q_y))$$

$$\lambda_{\mu}(\mathbf{q}) = 2\beta (2J\gamma(\mathbf{q}) + \mu) .$$

### 3. Le problème du modèle d'Ising 2D

#### 1. Mise en équations

- 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  $(\Delta_k, X_k)$ , 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*

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

- Discrétisation en temps : schéma d'Euler explicite.
- Discrétisation en champ : grille fixe. Dérivée avec schéma à 5 points.
- Discrétisation en moment : méthode pseudo-spectrale

◇ 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 :

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

⇒ Approximation de rang faible de cette matrice

### 3. Le problème du modèle d'Ising 2D

#### 2. Méthodes numériques

- Discrétisation en temps : schéma d'Euler explicite.
- Discrétisation en champ : grille fixe. Dérivée avec schéma à 5 points.
- Discrétisation en moment : méthode pseudo-spectrale

◊ 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