

école———	
normale ———	
supérieure ———	
paris—saclav——	





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

Physique statistique et modèle d'Ising Transition de phase Le groupe de renormalisation (RG) Les équations BMW Objectif

2. Le problème continu

Hamiltonien du modèle continu φ^4 Système d'équations à résoudre Méthodes numériques Résultats

3. Le problème du modèle d'Ising 2D Mise en équations

1. Physique statistique et modèle d'Ising

A. Modèle d'Ising

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

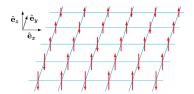


FIGURE – Modèle d'Ising.

• Spin et configuration :

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

ullet Energie d'une configuration \mathcal{M} :

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

• Probabilité d'une configuration :

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

• Fonction de partition :

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

- 1. Introduction du problème
 - 1. Physique statistique et modèle d'Ising
- Définition de l'aimantation :

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

1. Physique statistique et modèle d'Ising

• Définition de l'aimantation :

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

 \bullet Evolution de l'aimantation m avec la température T:

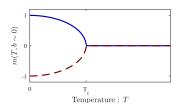


FIGURE - Aimantation m vs T

Invariance par échange de
$$\hat{\mathbf{e}}_z$$
 en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:
A $(b_{\mathbf{r}} = 0, T = 0) : m = 0$.

Mais problème :

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

1. Physique statistique et modèle d'Ising

• Définition de l'aimantation :

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

 \bullet Evolution de l'aimantation m avec la température T:

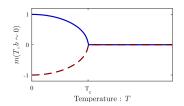


Figure – Aimantation m vs T

Invariance par échange de
$$\hat{\mathbf{e}}_z$$
 en $-\hat{\mathbf{e}}_z$:
A $(b_{\mathbf{r}} = 0, T = 0) : m = 0.$

Mais problème :

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

⇒ Brisure de symétrie & Transition de phase

Introduction du problème
 Transition de phase

 \bullet 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 :

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|) \equiv \langle S_{\mathbf{r}_{1}} S_{\mathbf{r}_{2}} \rangle \equiv \sum_{\mathcal{M}} p\left(\mathcal{M}\right) S_{\mathbf{r}_{1}} S_{\mathbf{r}_{2}}$$

Pour
$$T = T_c$$
, $G^{(2)}(r) \sim_{r \to \infty} |r|^{2-d-\eta}$,

 \diamond Longueur de corrélation :

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

1. Introduction du problème 2. Transition de phase

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

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|) \equiv \langle S_{\mathbf{r}_{1}} S_{\mathbf{r}_{2}} \rangle \equiv \sum_{\mathcal{M}} p\left(\mathcal{M}\right) S_{\mathbf{r}_{1}} S_{\mathbf{r}_{2}}$$

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

♦ Longueur de corrélation :

$$\xi \sim_{T \to T_c} |T - T_c|^{-\nu}$$

 \Rightarrow Exposants critiques : η et ν

1. Introduction du problème 2. Transition de phase

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

$$G^{(2)}(|\mathbf{r}_{1} - \mathbf{r}_{2}|) \equiv \langle S_{\mathbf{r}_{1}} S_{\mathbf{r}_{2}} \rangle \equiv \sum_{\mathscr{M}} p\left(\mathscr{M}\right) S_{\mathbf{r}_{1}} S_{\mathbf{r}_{2}}$$

Pour
$$T = T_c$$
, $G^{(2)}(r) \sim_{r \to \infty} |r|^{2-d-\eta}$,

♦ Longueur de corrélation :

$$\xi \sim_{T \to T_c} |T - T_c|^{-\nu}$$

 \Rightarrow Exposants critiques : η et ν

• Universalité des exposants critiques

3. Le groupe de renormalisation (RG)

• Fonction de partition exprimée avec des champs :

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

• Transformée de Fourier :

$$\begin{split} \hat{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{p}} &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \int_{\Omega} \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}) \, e^{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \mathrm{d} \, \mathbf{r}, \\ \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{|\Omega|}} \sum_{\mathbf{p}} \hat{\boldsymbol{\varphi}}_{\mathbf{p}} \, e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \end{split}$$

• $\|\mathbf{p}\|_2 \in [0, \Lambda]$

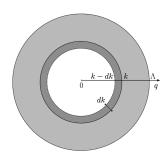


Figure – Principe du RG

Thèse de Frédéric Léonard

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

Introduction du problème Les équations BMW

L'équation de flot BMW :

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

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 :

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

Condition initiale en $k = \Lambda$ connue

1. Introduction du problème 5. Objectif

 \Rightarrow Calcul des exposants critiques : η et ν

Introduction du problème
 Objectif

- \Rightarrow Calcul des exposants critiques : η et ν
- \Rightarrow Calcul de la température critique : T_c

Introduction du problème
 Objectif

- \Rightarrow Calcul des exposants critiques : η et ν
- \Rightarrow Calcul de la température critique : T_c
- Première étude :
 - ightharpoonup Réecriture en C++ d'un code permettant de calculer η et ν
 - ▶ Recherche des problèmes et tentatives de résolution

Introduction du problème
 Objectif

- \Rightarrow Calcul des exposants critiques : η et ν
- \Rightarrow Calcul de la température critique : T_c
- Première étude :
 - \blacktriangleright Réecriture en C++ d'un code permettant de calculer η et ν
 - ▶ Recherche des problèmes et tentatives de résolution
- Deuxième étude :
 - \triangleright Ecriture d'un nouveau code pour calculer T_c : faisable mais difficile
 - ▶ Comparaison à la valeur théorique : benchmarking de la méthode

Physique statistique et modèle d'Ising Transition de phase Le groupe de renormalisation (RG) Les équations BMW Objectif

2. Le problème continu

Hamiltonien du modèle continu φ^4 Système d'équations à résoudre Méthodes numériques Résultats

3. Le problème du modèle d'Ising 2D Mise en équations

2. Le problème continu

1. Hamiltonien du modèle continu φ^4

$$H[\varphi] = \int_{\mathbf{r}} \left\{ \frac{1}{2} (\nabla \varphi)^2 + \frac{1}{2} r_0 \varphi^2 + \frac{u_0}{4!} (\varphi^2)^2 \right\}$$
 (1)

2. Le problème continu 2. Système d'équations à résoudre

Trouver $(\tilde{Y}_k, \tilde{W}_k)$ tel que pour tout $k \in]0, \Lambda]$, $\tilde{\rho} \in [0, +\infty[$ et $\tilde{p} \in [0, +\infty[$,

$$\begin{split} \partial_t \tilde{Y}_k(\tilde{p},\tilde{\rho}) &= \eta_k (1 + \tilde{Y}_k(\tilde{p},\tilde{\rho})) + \tilde{p} \, \partial_{\tilde{p}} \tilde{Y}_k(\tilde{p},\tilde{\rho}) - (2 - d - \eta_k) \tilde{\rho} \, \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\tilde{p},\tilde{\rho}) \\ &+ 2 \tilde{\rho} \tilde{p}^{-2} \left[\left(\tilde{p}^2 \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\tilde{p},\tilde{\rho}) + \tilde{u}_k(\tilde{\rho}) \right)^2 \tilde{J}_3(\tilde{p},\tilde{\rho}) \right] - 2 \tilde{\rho} \tilde{p}^{-2} \left[\tilde{u}_k^2(\tilde{\rho}) \tilde{I}_3(\tilde{\rho}) \right] \\ &- \tilde{I}_2(\tilde{\rho}) \left(\partial_{\tilde{\rho}} \tilde{Y}_k(\tilde{p},\tilde{\rho}) / 2 + \tilde{\rho} \, \partial_{\tilde{\rho}}^2 \tilde{Y}_k(\tilde{p},\tilde{\rho}) \right) \\ \partial_t \tilde{W}_k &= (\eta_k - 2) \tilde{W}_k(\tilde{\rho}) + (d - 2 + \eta_k) \tilde{\rho} \, \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{W}_k(\tilde{\rho}) + \frac{1}{2} \partial_{\tilde{\rho}} \tilde{I}_1(\tilde{\rho}) \,, \end{split}$$

avec la définition

$$\eta_k = \frac{1}{2}\tilde{I}_2(\tilde{\rho} = 0)\partial_{\rho}\tilde{Y}_k(\tilde{p} = 0, \tilde{\rho} = 0),$$

et les conditions initiales,

$$\tilde{Y}_{\Lambda}(\tilde{p},\tilde{\rho}) = 0$$
 et $\tilde{W}_{\Lambda}(\tilde{\rho}) = \tilde{r}_0 + \tilde{u}_0\tilde{\rho}$

• Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite

- Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite
- Discrétisation en champ : Grille fixe. Dérivée avec schémas à 5 points

- Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite
- Discrétisation en champ : Grille fixe. Dérivée avec schémas à 5 points
- Discrétisation en moments : Méthode pseudo-spectrale
 - ▶ Interpolation de Tchebytechev
 - ▶ Intégration de Gauss-Legendre

- Discrétisation en temps : Schéma d'Euler explicite
- Discrétisation en champ : Grille fixe. Dérivée avec schémas à 5 points
- Discrétisation en moments : Méthode pseudo-spectrale
 - ▶ Interpolation de Tchebytechev
 - ▶ Intégration de Gauss-Legendre
- A propox de l'intégration

$$K = \int_{\mathbb{R}^d} f(\tilde{\mathbf{q}}^2) g((\tilde{\mathbf{p}} + \tilde{\mathbf{q}})^2) \, \mathrm{d}\, \tilde{\mathbf{q}} \,,$$

$$K = S_{d-1} \int_0^{+\infty} d\tilde{q}_2 \, \tilde{q}_2^{d-2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{q}_1 \, f(\tilde{q}_1^2 + \tilde{q}_2^2) g(\tilde{p}^2 + \tilde{q}_1^2 + \tilde{q}_2^2 + 2\tilde{p}\tilde{q}_1)$$

2. Le problème continu 4. Résultats

Physique statistique et modèle d'Ising Transition de phase Le groupe de renormalisation (RG) Les équations BMW Objectif

2. Le problème continu

Hamiltonien du modèle continu φ^4 Système d'équations à résoudre Méthodes numériques Résultats

3. Le problème du modèle d'Ising 2D Mise en équations

3. Le problème du modèle d'Ising 2D 1. Mise en équations

• Réecriture de la fonction de partition :

$$\mathcal{Z} \propto \int_{\mathbb{R}} \prod_{\mathbf{r}} d\varphi_{\mathbf{r}} \exp\left(-\mathcal{H}_{\mu}[\varphi]\right) ,$$
 (2)

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

$$\mathcal{H}_{\mu}[\varphi] = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{q}} \varphi(\mathbf{q}) \frac{1}{\lambda_{\mu}(\mathbf{q})} \varphi(-\mathbf{q}) - \sum_{\mathbf{r}} \ln\left(\cosh(\varphi_{\mathbf{r}})\right) , \qquad (3)$$

3. Le problème du modèle d'Ising 2D 1. Mise en équations

•

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

 \bullet Réecriture de la fonction de partition :