

ASPECTS RIGoureux DE LA MÉCANIQUE STATISTIQUE À L'ÉQUILIBRE

Jérémy Bouttier et Guilhem Semerjian

Corrigé de l'examen du 4 juin 2015

1 Le modèle de Potts en champ moyen

1. Pour une configuration $\underline{\sigma} = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ donnée, définissons $x_\sigma(\underline{\sigma}) = (\sum_{i=1}^N \delta_{\sigma_i, \sigma})/N$ la fraction de spins dans l'état σ . Par définition, $\sum_\sigma x_\sigma = 1$. L'énergie d'une configuration s'exprime alors précisément comme $H(\underline{\sigma}) = Ne(x_1(\underline{\sigma}), \dots, x_q(\underline{\sigma}))$, avec la fonction $e(x_1, \dots, x_q)$ définie dans l'énoncé. Par ailleurs, le nombre de configurations où $N_1 = Nx_1$ spins sont dans l'état 1, $N_2 = Nx_2$ dans l'état 2, ..., $N_q = Nx_q$ dans l'état q est le facteur multinomial

$$\mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N = \binom{N}{N_1, N_2, \dots, N_q} = \frac{N!}{N_1! N_2! \dots N_q!} = \frac{N!}{(Nx_1)! (Nx_2)! \dots (Nx_q)!} . \quad (1)$$

Dans la somme de l'énoncé les valeurs de x_σ sont donc de la forme N_σ/N avec N_σ un entier $\in [0, N]$, et obéissent à la condition $x_1 + \dots + x_q = 1$.

2. De la formule de Stirling, on obtient

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N = - \sum_{\sigma=1}^q x_\sigma \ln x_\sigma , \quad (2)$$

où l'on reconnaît l'expression de l'entropie de Shannon pour une variable aléatoire pouvant prendre q valeurs avec les probabilités x_1, \dots, x_q . On peut donc écrire à l'ordre exponentiel dominant

$$Z \sim \sum_{x_1, \dots, x_q} \exp \left[-N\beta \hat{f}(x_1, \dots, x_q, T) \right] , \quad (3)$$

et évaluer cette somme par la méthode de Laplace quand $N \rightarrow \infty$. Dans la minimisation, les variables x_σ sont des réels entre 0 et 1, soumis à la condition $x_1 + \dots + x_q = 1$.

3. Par invariance sous les permutations des variables,

$$\langle \delta_{\sigma_i, \sigma} \rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\sigma_i, \sigma} \right\rangle = \frac{\sum_{x_1, \dots, x_q} x_\sigma \mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N e^{-N\beta e(x_1, \dots, x_q)}}{\sum_{x_1, \dots, x_q} \mathcal{N}_{x_1, \dots, x_q}^N e^{-N\beta e(x_1, \dots, x_q)}} . \quad (4)$$

On peut alors évaluer numérateur et dénominateur par la méthode de Laplace dans la limite thermodynamique pour obtenir le résultat de l'énoncé. Cette expression correspond à la probabilité qu'un spin soit dans l'état σ , et généralise la notion d'aimantation du modèle d'Ising.

4. Pour des températures très élevées, l'énergie libre \hat{f} est dominée par la contribution de l'entropie ; le minimum de \hat{f} correspond donc au maximum de l'entropie de Shannon, i.e. le point symétrique $(x_1^*, \dots, x_q^*) = (1/q, \dots, 1/q)$. On est alors dans une phase paramagnétique, ou désordonnée.
5. A température nulle, la minimisation de l'énergie libre coïncide avec celle de l'énergie. A champ nul, il faut donc maximiser $x_1^2 + \dots + x_q^2$ sous la contrainte $x_1 + \dots + x_q = 1$. Il y a q solutions équivalentes à ce problème d'optimisation, $(x_1^*, \dots, x_q^*) = (1, 0, \dots, 0)$ ou $(0, 1, \dots, 0), \dots$, ou $(0, \dots, 0, 1)$, qui décrivent des phases ferromagnétiques (ou ordonnées) du système. Cela peut se voir en écrivant l'identité

$$1 = \left(\sum_{\sigma=1}^q x_\sigma \right)^2 = \sum_{\sigma=1}^q x_\sigma^2 + \sum_{\sigma \neq \sigma'} x_\sigma x_{\sigma'} \quad (5)$$

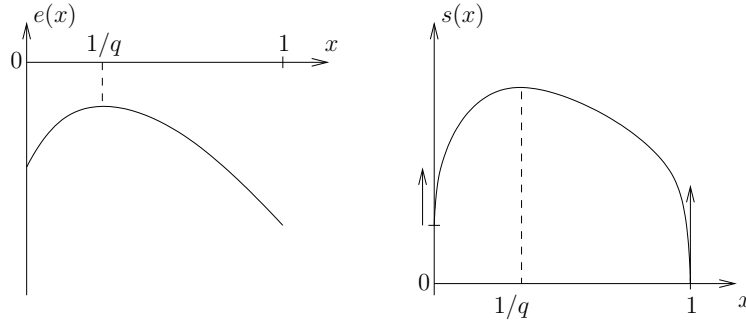
Le fondamental est dégénéré q fois, ce sont les configurations microscopiques avec $\sigma_1 = \sigma_2 = \dots = \sigma_N$.

6. On a $x_2 = \dots = x_q = \frac{1-x}{q-1}$. On trouve donc

$$e(x) = -J \frac{q}{q-1} \left(x - \frac{1}{q} \right)^2 - \frac{J}{q}, \quad s(x) = -x \ln(x) - (1-x) \ln(1-x) + (1-x) \ln(q-1). \quad (6)$$

7. Le modèle de la FK percolation, où l'on donne un poids q à chaque composante connexe d'un modèle de percolation sur les liens du réseau, coïncide avec le modèle de Potts quand q est entier et le généralise pour q réel arbitraire.

8. La fonction $e(x)$ a un maximum en $x = 1/q$, et des pentes finies en 0 et 1 ; la fonction $s(x)$ a un maximum en $x = 1/q$, et des tangentes verticales en 0 et 1 :



9. Le maximum de $s(x)$ est atteint en $x_0 = 1/q$. Ce point est aussi un extremum de $e(x)$, on aura donc $\hat{f}'(x_0) = 0$ à toute température. Pour déterminer la nature de ce point, on calcule la dérivée seconde :

$$\hat{f}''(x) = -2J \frac{q}{q-1} + T \frac{1}{x(1-x)}, \quad \text{d'où} \quad \hat{f}''(x_0) = \frac{q}{q-1} (-2J + Tq). \quad (7)$$

Donc x_0 est un minimum (resp. maximum) local de \hat{f} pour $T > T_c^{(2)}$ (resp. $T < T_c^{(2)}$), avec $T_c^{(2)} = \frac{2J}{q}$.

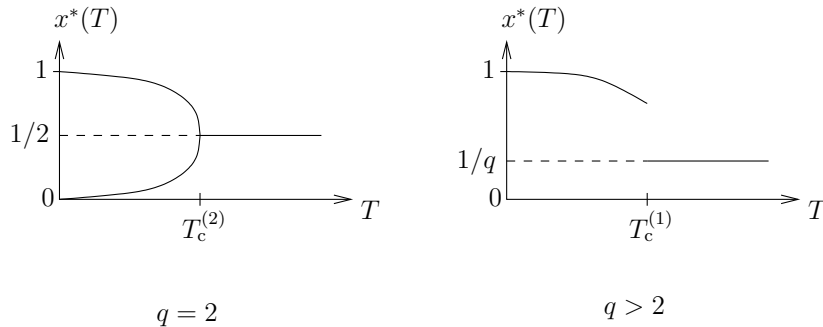
10. A $T = T_c^{(2)}$ on a $\hat{f}'''(x_0) = -2J \left(\frac{q}{q-1} \right)^2 (q-2) < 0$ puisque $q > 2$. Donc \hat{f} passe en-dessous de sa valeur en x_0 pour $x > x_0$. Comme \hat{f} a une pente $+\infty$ en $x = 1$, il y a forcément un minimum local pour une valeur $x^* > x_0$, avec $\hat{f}(x^*) < \hat{f}(x_0)$. Comme $\hat{f}(x, T)$ est monotone en T , il y a une température $T_c^{(1)} > T_c^{(2)}$ en-dessous de laquelle x_0 n'est plus le minimum global.

11. Quand $q > 2$, l'allure de $\hat{f}(x, T)$ pour différentes températures est donnée Fig. 1

12. Les conditions fixant $T_c^{(1)}$ et $x^{(1)}$ sont $\begin{cases} \hat{f}(x^{(1)}, T_c^{(1)}) = \hat{f}(x_0, T_c^{(1)}) \\ \left. \frac{\partial \hat{f}}{\partial x} \right|_{(x^{(1)}, T_c^{(1)})} = 0 \end{cases}$, comme on peut le constater sur

la figure ci-dessous à T_d . En insérant les formes proposées par l'énoncé, on détermine $\alpha = 1$.

13. Pour $q = 2$ (resp. $q > 2$) la fonction $x^*(T)$ est continue (resp. discontinue) :



On peut définir $x^*(T) - 1/q$ comme paramètre d'ordre, puisqu'il est nul dans la phase paramagnétique à haute température. Pour $q = 2$ la transition est du deuxième ordre, $\beta_{cm} = 1/2$ puisque $x^*(T = T_c^{(2)} - \varepsilon) - (1/2) \sim \varepsilon^{1/2}$. Pour $q > 2$ la transition est du premier ordre, le paramètre d'ordre est discontinu à la transition, on ne peut donc pas définir d'exposant critique.

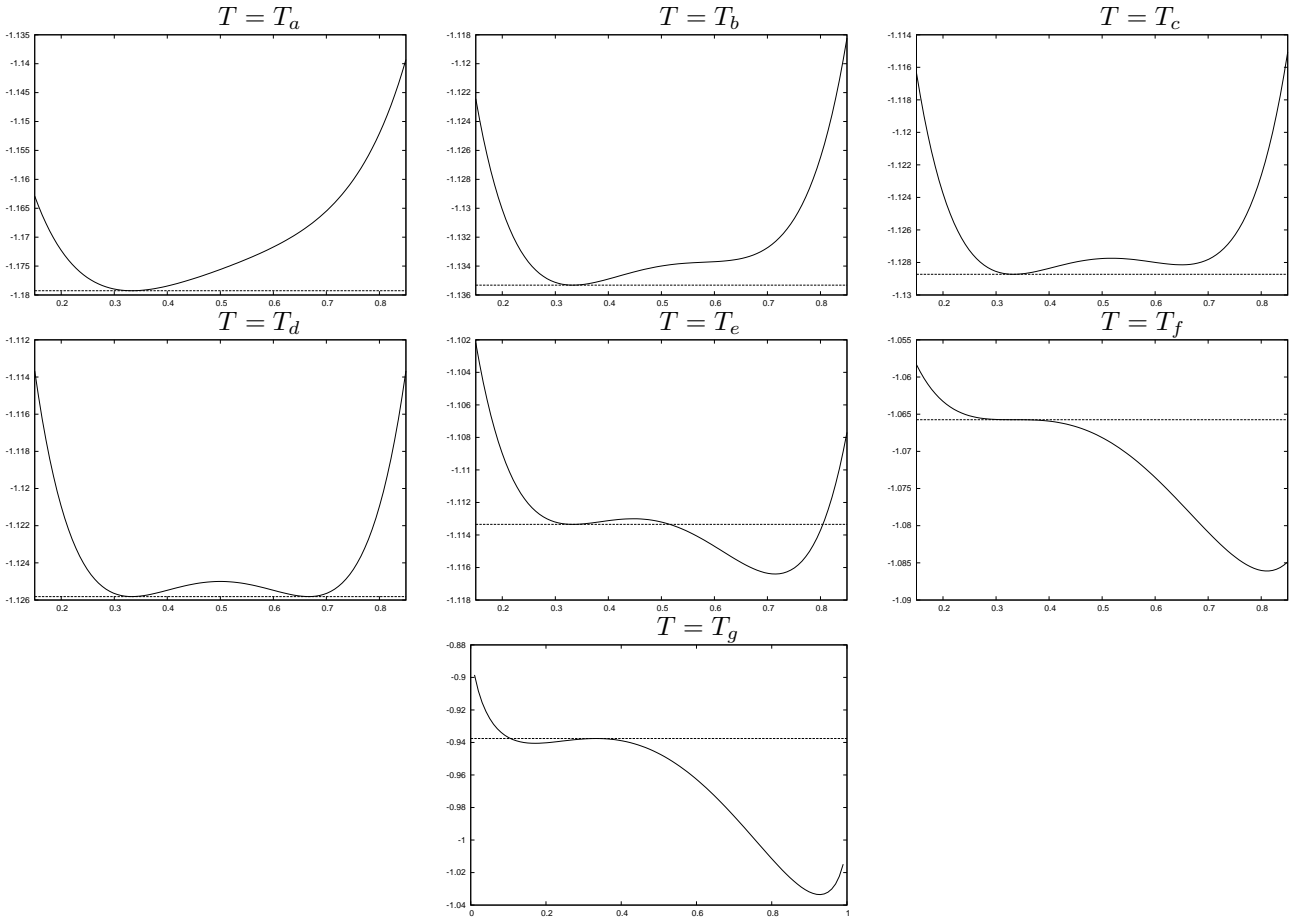


FIGURE 1 – Séquence des profils $\hat{f}(x, T)$ en fonction de x , pour $T_a > T_b > \dots > T_g$, et $T_d = T_c^{(1)}$, $T_f = T_c^{(2)}$. Le trait pointillé horizontal correspond à la valeur de $\hat{f}(x_0, T)$. On a ici $q = 3$, soit $x_0 = 1/3$.

2 Autour du modèle des arbres couvrants

Le modèle de Potts à $q \rightarrow 0$

1. La fonction de partition s'écrit

$$Z_G(q) = \sum_{\sigma \in \{1, \dots, q\}^V} \prod_{\langle i, j \rangle \in E} e^{\beta J_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}} = \sum_{\sigma \in \{1, \dots, q\}^V} \prod_{\langle i, j \rangle \in E} (1 + v_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j})$$

où on utilise le fait que $\delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ ne prend que les valeurs 0 et 1. On développe ensuite le produit comme une somme sur les sous-graphes couvrants :

$$Z_G(q) = \sum_{\sigma \in \{1, \dots, q\}^V} \sum_{E' \subset E} \prod_{\langle i, j \rangle \in E'} v_{\langle i, j \rangle} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}.$$

On intervertit alors les deux sommes : le produit $\prod_{\langle i, j \rangle \in E'} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}$ vaut 1 si σ est constant dans chaque composante connexe du sous-graphe couvrant $H = (V, E')$, et vaut 0 sinon, ce qui donne

$$\sum_{\sigma \in \{1, \dots, q\}^V} \prod_{\langle i, j \rangle \in E'} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} = q^{c(H)}$$

d'où on déduit l'expression

$$Z_G(q) = \sum_{\substack{H=(V, E') \\ E' \subset E}} q^{c(H)} \prod_{e \in E'} v_e.$$

Cette expression est polynomiale en q ce qui permet d'étendre sa définition aux valeurs non entières de q .

2. On fait à présent tendre q vers 0.

- (a) Si on garde les v_e fixés, la somme est dominée par les sous-graphes H minimisant $c(H)$, c'est-à-dire les sous-graphes couvrants connexes pour lesquels $c(H) = 1$ (G étant supposé connexe). On obtient

$$\lim_{q \rightarrow 0} \frac{Z_G(q)}{q} = \sum_{\substack{H=(V,E') \\ E' \subset E \\ H \text{ connexe}}} \prod_{e \in E'} v_e.$$

- (b) Posons $v_e = qw_e$, on réécrit alors

$$Z_G(q) = \sum_{\substack{H=(V,E') \\ E' \subset E}} q^{|E'|+c(H)} \prod_{e \in E'} w_e = q^{|V|} \sum_{\substack{H=(V,E') \\ E' \subset E}} q^{\ell(H)} \prod_{e \in E'} w_e$$

où $\ell(H) = |E'| - |V| + c(H)$ est le nombre cyclomatique du sous-graphe couvrant H . Il n'est pas difficile de voir que $\ell(H) = 0$ si H est une forêt couvrante (chaque composante connexe est un arbre, contenant un sommet de plus que d'arête) et $\ell(H) > 0$ sinon (si H contient un cycle, enlever une arête de ce cycle réduit le nombre cyclomatique de 1). On en déduit que

$$\lim_{\substack{q \rightarrow 0 \\ w_e = \frac{v_e}{q} \text{ fixés}}} \frac{Z_G(q)}{q^{|V|}} = \sum_{\substack{H=(V,E') \\ E' \subset E \\ H \text{ forêt}}} \prod_{e \in E'} w_e.$$

- (c) Pour $v_e = q^\alpha y_e$ on peut écrire

$$Z_G(q) = \sum_{\substack{H=(V,E') \\ E' \subset E}} q^{\alpha|E'|+c(H)} \prod_{e \in E'} y_e = q^{\alpha|V|} \sum_{\substack{H=(V,E') \\ E' \subset E}} q^{\alpha\ell(H)+(1-\alpha)c(H)} \prod_{e \in E'} w_e.$$

Comme $\alpha \in (0, 1)$, on $\alpha\ell(H) + (1 - \alpha)c(H) \geq 1 - \alpha$ avec égalité si et seulement si H est un arbre couvrant. On en déduit

$$\lim_{\substack{q \rightarrow 0 \\ y_e = \frac{v_e}{q^\alpha} \text{ fixés}}} \frac{Z_G(q)}{q^{\alpha(|V|-1)+1}} = \sum_{\substack{H=(V,E') \\ E' \subset E \\ H \text{ arbre}}} \prod_{e \in E'} y_e.$$

Arbres couvrants et circuits électriques

3. La matrice laplacienne L est la matrice carrée indicée par les sommets du graphe telle que

$$L_{ij} = \begin{cases} -y_{\langle i,j \rangle} & \text{si } i \neq j, \\ \sum_{k \neq i} y_{\langle i,k \rangle} & \text{si } i = j \end{cases}$$

où, par convention, on pose $y_{\langle i,j \rangle} = 0$ si $\langle i,j \rangle$ n'est pas une arête du graphe. Le théorème de Kirchhoff ou *matrix-tree theorem* affirme que la fonction de partition du modèle des arbres couvrants vaut $\det L_{\{i_0\}}$ pour n'importe quel sommet i_0 (où, anticipant sur la question suivante, $L_{\{i_0\}}$ désigne la matrice obtenue à partir de L en enlevant la ligne et la colonne i_0).

4. On procède comme dans la preuve du théorème de Kirchhoff vue en cours, en développant $\det L_X$ comme une somme sur les permutations ($\epsilon(\cdot)$ étant la signature) :

$$\det L_X = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}(V \setminus X)} \epsilon(\sigma) \prod_{i \in V \setminus X} L_{i\sigma(i)} = \sum_{\sigma \in \mathcal{S}(V \setminus X)} \epsilon(\sigma) \prod_{\substack{i \in V \setminus X \\ i \neq \sigma(i)}} (-y_{\langle i,\sigma(i) \rangle}) \prod_{\substack{i \in V \setminus X \\ i = \sigma(i)}} \left(\sum_{k \neq i} y_{\langle i,k \rangle} \right).$$

On développe alors le dernier produit et on interprète chaque terme du développement comme correspondant à un «fléchage bicolore». Il convient d'adapter légèrement la définition de fléchage par rapport à celle vue en cours : un *fléchage* est un sous-graphe orienté de G tel qu'aucun sommet dans X n'a d'arête sortante, et tout autre sommet a exactement une arête sortante. Un *fléchage bicolore* est un fléchage dont les arêtes sont coloriées en deux couleurs, mettons rouge et bleu, de telle sorte que les arêtes bleues forment des cycles. Pour une permutation σ donnée, le développement de la somme donne tous les fléchages bicolores dont les cycles bleus contiennent précisément les sommets qui ne sont pas des points fixes de σ , et le

signe global est $(-1)^b$ où b est le nombre de tels cycles (un cycle de longueur n contribuant d'un facteur $(-1)^{n-1}$ à la signature). En sommant sur toutes les permutations, on obtient

$$\det L_X = \sum_{F \text{ fléchage bicolore}} (-1)^{b(F)} \prod_{e \in F} y_e$$

où $b(F)$ est le nombre de cycles bleus de F et le produit est pris sur toutes les arêtes formant F . On note alors que toutes les contributions des fléchages ayant au moins un cycle s'annulent entre elles (on peut par exemple le voir en se donnant un ordre total sur V , et en considérant l'involution sur l'ensemble des fléchages ayant au moins un cycle consistant à inverser la couleur du cycle contenant le plus petit élément). On obtient ainsi

$$\det L_X = \sum_{F \text{ fléchage sans cycle}} \prod_{e \in F} y_e.$$

Le résultat voulu s'ensuit car les fléchages sans cycle s'identifient à des forêts couvrantes de G dont chaque composante connexe contient un unique sommet de X .

5. Notons i, j les extrémités de l'arête e . Il y a une bijection évidente entre les arbres couvrants de G contenant e , et les forêts couvrantes de G dont chaque composante connexe contient un unique sommet de $\{i, j\}$ (la bijection consiste à enlever ou rajouter l'arête e). Par le résultat précédent, la somme des poids de telles forêts est $\det L_{\{i, j\}}$, et en comptabilisant l'arête e on trouve que la somme des poids des arbres couvrants contenant e est $y_e \det L_{\{i, j\}}$. En normalisant par la fonction de partition, on en déduit que la probabilité voulue est

$$P(e) = \frac{y_e \det L_{\{i, j\}}}{\det L_{\{i\}}}$$

(où on peut bien sûr remplacer i par j dans le dénominateur).

6. En combinant la loi d'Ohm et la conservation du courant, on voit que le potentiel électrique vérifie

$$\sum_{x' \in G} L_{xx'} U_{x'} = I_x, \quad x \in G \quad (8)$$

où I_x est l'intensité injectée en x . On se place dans la situation où

$$I_x = I_a(\delta_{x,a} - \delta_{x,b})$$

(clairement le courant injecté en a doit ressortir en b).

Il s'agit de résoudre le système linéaire (8) : L n'est pas inversible, mais son noyau est de dimension 1 en vertu du *matrix-tree theorem* (et consiste en les fonctions constantes sur G), son image est donc de codimension 1 et consiste en les fonctions de somme nulle. La fonction I appartient bien à cet espace, et on peut chercher U dans l'espace des fonctions s'annulant en b . Cela revient à enlever l'équation pour $x = b$ dans (8), et résoudre le système inversible

$$\sum_{x' \in G \setminus \{b\}} (L_{\{b\}})_{xx'} U_{x'} = I_a \delta_{x,a}, \quad x \in G \setminus \{b\}.$$

On est en fait uniquement intéressé par la valeur de U en a , par la règle de Cramer il vient immédiatement que

$$U_a = \frac{\det L_{\{a, b\}}}{\det L_{\{b\}}} I_a$$

ce qui montre que la conductance effective entre a et b est

$$Y_{ab} = \frac{\det L_{\{a\}}}{\det L_{\{a, b\}}}.$$

On peut comparer cette expression à celle obtenue à la question 5 : on a

$$P(\langle a, b \rangle) = \frac{y_{\langle a, b \rangle}}{Y_{ab}},$$

autrement dit la probabilité que l'arête $\langle a, b \rangle$ soit présente dans l'arbre couvrant est égale au rapport de sa conductance par la conductance effective du graphe entier entre a et b (il est physiquement clair que ce rapport est bien compris entre 0 et 1, puisque les autres arêtes de G augmentent la conductance effective).

Ce dernier résultat est en fait celui démontré initialement par Kirchhoff. Burton et Pemantle ont démontré en 1993 une généralisation de ce théorème, donnant la probabilité jointe que n arêtes e_1, \dots, e_n soient présentes dans l'arbre couvrant sous forme d'un déterminant de taille n , dont les coefficients sont donnés par les *impédances de transfert* entre arêtes (l'impédance de transfert entre l'arête $\langle a, b \rangle$ et l'arête $\langle c, d \rangle$ est définie comme le rapport I/U , où U est la différence de potentiel entre a et b lorsqu'on branche c et d à un générateur injectant un courant I en c).