

ASPECTS RIGoureux DE LA MÉCANIQUE STATISTIQUE À L'ÉQUILIBRE

Jérémye Bouttier et Guilhem Semerjian

Examen du 6 juin 2013

Le sujet est formé de deux parties indépendantes. Vous rédigerez leurs solutions sur deux copies séparées.

Les notes de cours et de TD sont autorisées, à l'exclusion de tout autre document.

1 Les zéros de Lee et Yang

Il est parfois instructif d'étendre le domaine de variation des paramètres d'un problème de leurs valeurs physiques, i.e. réelles, à tout le plan complexe, et d'étudier ainsi leurs propriétés d'analyticité. Considérons par exemple un modèle ferromagnétique et le champ magnétique h comme paramètre. Par définition la fonction de partition Z du modèle n'est jamais nulle quand $h \in \mathbb{R}$, car c'est une somme de termes positifs; en 1952 Lee et Yang ont étudié les points d'annulation de $Z(h)$ en considérant $h \in \mathbb{C}$ et ont découvert que ces zéros correspondaient nécessairement à des valeurs purement imaginaires du champ magnétique. Dans cet exercice on va démontrer ce résultat et présenter une de ses applications.

1.1 Le théorème de Lee et Yang pour un graphe fini

On considère un graphe $G = (V, E)$, i.e. un ensemble fini V de sommets et un ensemble de liens $e \in E$ reliant chacun deux sommets de V distincts, notés i_e et j_e . Chaque lien est muni d'une constante de couplage J_e réelle (mais pour l'instant de signe arbitraire). On place un spin d'Ising $\sigma_i \in \{-1, +1\}$ sur chaque sommet, leur configuration collective est notée $\underline{\sigma} = \{\sigma_i, i \in V\} \in \{-1, +1\}^{|V|}$. Ils subissent l'effet de champ magnétiques h_i a priori complexes et différents pour chaque site, et les interactions selon les liens du graphe. L'énergie d'une configuration est donc

$$H(\underline{\sigma}) = - \sum_{e \in E} J_e \sigma_{i_e} \sigma_{j_e} - \sum_{i \in V} h_i \sigma_i . \quad (1)$$

Chaque fois que cela sera possible sans ambiguïté on numérotera les sommets par des entiers, i.e. on supposera $V = \{1, \dots, |V|\}$.

1. Ecrire la fonction de partition $\widehat{Z}_G(h_1, \dots, h_{|V|})$ du modèle en contact avec un thermostat de température inverse β . On notera $Z_G(h) = \widehat{Z}_G(h, \dots, h)$ sa valeur quand les champs magnétiques sont tous égaux à h .
2. Mettre la fonction de partition sous la forme

$$\widehat{Z}_G(h_1, \dots, h_{|V|}) = e^{-\sum_{i \in V} \beta h_i + \sum_{e \in E} \beta J_e} \widehat{P}_G(z_1, \dots, z_{|V|}) , \quad (2)$$

où $z_i = e^{2\beta h_i}$. Ici et dans toute la suite les z et z_i désignent des variables complexes. Comme \widehat{P}_G est un polynôme de degré 1 dans chacune de ses variables on peut l'écrire

$$\widehat{P}_G(z_1, \dots, z_{|V|}) = \sum_{U \subset V} c_{G,U} \prod_{i \in U} z_i , \quad (3)$$

où la somme porte sur les $2^{|V|}$ parties de V .

Exprimer les coefficients $c_{G,U}$ en termes des $\tau_e = e^{-2\beta J_e}$, et interpréter.

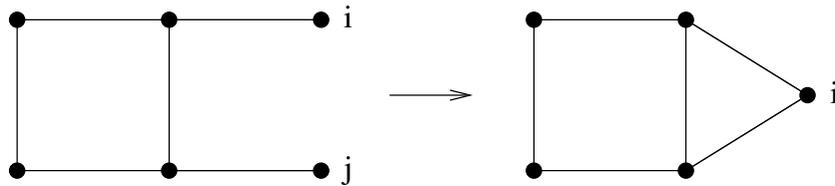
Comme ci-dessus on notera $P_G(z) = \widehat{P}_G(z, \dots, z)$ le polynôme obtenu quand tous les champs magnétiques sont égaux.

3. Que vaut $\widehat{P}_G(z_1, \dots, z_{|V|})$ lorsque $E = \emptyset$, i.e. pour un système de spins indépendants? Quelles sont alors les racines de $P_G(z)$? Pour quelle valeur du champ magnétique h la fonction de partition $Z(h)$ s'annule-t-elle?
4. Considérons maintenant $V = \{1, 2\}$ et un graphe G fait d'un seul lien entre les deux sommets, avec un couplage J . Exprimer alors $\widehat{P}_G(z_1, z_2)$ et $P_G(z)$ (on notera $\tau = e^{-2\beta J}$). Quelles sont les racines de $P_G(z)$, et les valeurs du champ magnétique associé? On distinguera les cas $J \geq 0$ et $J < 0$. Montrer que si $J \geq 0$,

$$|z_1| < 1 \text{ et } |z_2| < 1 \Rightarrow \widehat{P}_G(z_1, z_2) \neq 0. \quad (4)$$

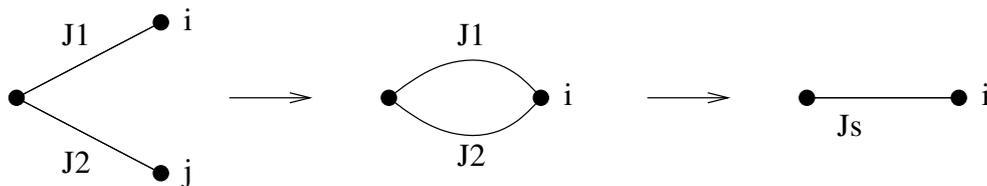
Indication : on pourra étudier les propriétés de l'homographie $z \rightarrow -\frac{1+\tau z}{\tau+z}$, en particulier l'image du cercle unité par cette application.

5. Supposons qu'un graphe $G = (V, E)$ puisse se décomposer en deux graphes disjoints $G_1 = (V_1, E_1)$ et $G_2 = (V_2, E_2)$, i.e. V est l'union disjointe de V_1 et V_2 , les liens de E_1 (resp. E_2) ne sont adjacents qu'à des sommets de V_1 (resp. V_2), et $E = E_1 \cup E_2$. Exprimer \widehat{P}_G à l'aide de \widehat{P}_{G_1} et \widehat{P}_{G_2} .
6. On définit maintenant une opération de contraction sur les graphes, schématisé ainsi sur un exemple :



La définition formelle de la contraction est la suivante : pour un graphe $G = (V, E)$ arbitraire sur $|V|$ sommets et $i \neq j$ deux sommets distincts non liés dans E on note $G^{(i,j)}$ le graphe sur les $|V| - 1$ sommets $V \setminus j$ obtenu en identifiant le sommet j au sommet i (i.e. j est remplacé par i dans toutes les arêtes de E).

Il peut arriver dans certains cas particuliers que cette opération de contraction conduise à des arêtes multiples dans le graphe contracté, par exemple :



Par convention on remplace alors les arêtes multiples par une unique arête portant la somme des couplages.

Isolons la dépendance en z_i, z_j du polynôme \widehat{P}_G d'un graphe G arbitraire :

$$\widehat{P}_G(z_i, z_j, \underline{z}') = A(\underline{z}') + B(\underline{z}')z_i + C(\underline{z}')z_j + D(\underline{z}')z_i z_j, \quad (5)$$

où A, B, C et D sont des polynômes de degré 1 dans les $\underline{z}' = \{z_k, k \in V \setminus \{i, j\}\}$.

Que vaut le polynôme $\widehat{P}_{G^{(i,j)}}(z_i, \underline{z}')$ obtenu après contraction?

7. Supposons que a, b, c, d soient quatre nombres complexes tels que

$$|z_1| < 1 \text{ et } |z_2| < 1 \Rightarrow a + bz_1 + cz_2 + dz_1 z_2 \neq 0. \quad (6)$$

Montrer qu'alors

$$|z| < 1 \Rightarrow a + dz \neq 0. \quad (7)$$

8. On dit qu'un graphe $G = (V, E)$ vérifie la propriété de Lee-Yang si son polynôme associé est tel que

$$|z_1| < 1 \text{ et } |z_2| < 1 \text{ et } \dots \text{ et } |z_{|V|}| < 1 \Rightarrow \widehat{P}_G(z_1, \dots, z_{|V|}) \neq 0. \quad (8)$$

Montrer que si un graphe vérifie la propriété de Lee-Yang alors le graphe obtenue par contraction de deux sommets la vérifie aussi.

9. En déduire que la propriété de Lee-Yang est vérifiée pour n'importe quel graphe $G = (V, E)$ dont tous les couplages sont ferromagnétiques (i.e. $J_e \geq 0 \forall e \in E$).

Indication : on pourra construire un graphe \widetilde{G} pour lequel la propriété est facilement vérifiée et qui conduise à G par une série de contractions.

10. En utilisant la propriété de symétrie $Z_G(h) = Z_G(-h)$ et ses conséquences sur le polynôme $P_G(z)$ terminer la preuve du théorème de Lee et Yang :

Pour tout graphe G dont les couplages sont ferromagnétiques, $Z_G(h) = 0 \Rightarrow h \in i\mathbb{R}$.

1.2 Analyticité de l'énergie libre

On considère maintenant le modèle d'Ising avec interactions à plus proches voisins sur le réseau \mathbb{Z}^d , défini par l'interaction

$$\phi_X(\underline{\sigma}) = \begin{cases} -h\sigma_x & \text{si } X = \{x\} \\ -J\sigma_x\sigma_y & \text{si } X = \{x, y\} \text{ avec } \text{dist}(x, y) = 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (9)$$

avec J une constante de couplage réelle positive.

On note $f(\beta, h)$ la limite thermodynamique de l'énergie libre par spin de ce modèle, dont l'existence a été démontrée en cours pour $h \in \mathbb{R}$. On rappelle que

$$f = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} f_\Lambda, \quad f_\Lambda = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{|\Lambda|} \ln Z_\Lambda, \quad (10)$$

où Λ est une partie finie de \mathbb{Z}^d , Z_Λ la fonction de partition du modèle avec conditions aux bords libres dans Λ , et la limite $\Lambda \rightarrow \infty$ est prise au sens de Van Hove.

11. Proposer une ébauche de preuve, sans trop de détails, de l'affirmation suivante : f est une fonction analytique de h sur $\mathbb{C} \setminus i\mathbb{R}$.
12. En déduire que la fonction $h \in \mathbb{R} \rightarrow f(\beta, h)$ ne peut être singulière qu'en $h = 0$. Montrer que les dérivées à gauche et à droite en 0 de cette fonction sont toujours bien définies. Expliquer qualitativement dans quelles conditions ces deux dérivées peuvent être différents, et interpréter alors leurs valeurs.
13. Relier qualitativement cette éventuelle singularité au comportement, dans la limite thermodynamique, du lieu des zéros de Lee et Yang.
14. On rappelle le résultat du TD 1 pour ce modèle en dimension $d = 1$: la fonction de partition d'une chaîne de N spins avec des conditions aux bords périodiques s'écrit

$$Z_N(\beta, h) = \lambda_+(\beta, h)^N + \lambda_-(\beta, h)^N, \quad \text{avec } \lambda_\pm \text{ les racines de } \lambda^2 - x(y + y^{-1})\lambda + (x^2 - x^{-2}) = 0,$$

où $x = e^{\beta J}$ et $y = e^{\beta h}$.

Commenter votre réponse à la question précédente au vu de cette expression.

2 Des marches auto-évitantes et des pavages

Cette partie est constituée de deux problèmes indépendants. Faites des dessins !

2.1 Constante de connectivité du réseau 3-12

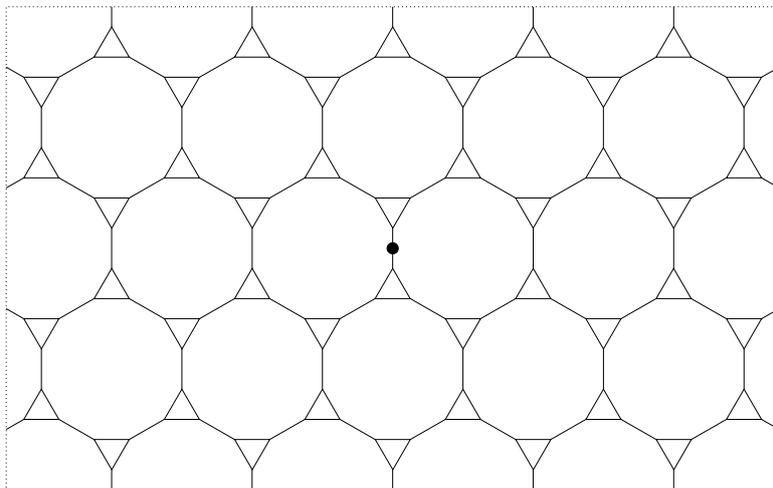


FIGURE 1 – Le réseau «3-12». Le point noir indique l'origine, d'où partent les marches auto-évitantes.

On considère le réseau «3-12», ainsi nommé car il pave le plan par des triangles et des dodécagones réguliers. Le but est de déterminer la constante de connectivité de ce réseau.

Pour simplifier, on considère des marches auto-évitantes partant et terminant au milieu des arêtes incidentes à deux dodécagones, cf figure 1. On note C_n le nombre de marches auto-évitantes de longueur n , partant de l'origine vers le haut. (La demi-arête initiale et la demi-arête finale sont chacune comptées comme ayant longueur $1/2$.)

1. Justifier qu'il existe Λ tel que $C_n^{1/n} \rightarrow \Lambda$ pour $n \rightarrow \infty$.
2. On considère une marche auto-évitante de longueur n sur le réseau 3-12. Montrer que, en contractant les triangles, on obtient une marche auto-évitante sur le réseau hexagonal dont la longueur est comprise entre $n/3$ et $n/2$.
3. Réciproquement, combien une marche sur le réseau hexagonal a-t-elle d'antécédents d'une longueur donnée ?
4. On note c_n le nombre de marches auto-évitantes de longueur n sur le réseau hexagonal, comme dans le cours. Montrer que les séries génératrices $\bar{\chi}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n z^n$ et $\chi(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$ sont reliées par

$$\bar{\chi}(z) = \chi(z^2 + z^3).$$

5. En déduire une équation algébrique déterminant Λ .

2.2 Pavages par dominos du diamant aztèque

On se place dans le plan \mathbb{R}^2 . Le *diamant aztèque* de taille n est défini comme l'union de tous les carrés de côté 1 dont les quatre coins ont des coordonnées entières (x, y) satisfaisant $|x| + |y| \leq n + 1$. À titre d'exemple la figure 2(a) montre le diamant aztèque de taille 4. Le but est de compter le nombre de pavages par dominos (rectangles 2×1 ou 1×2) du diamant aztèque de taille n .

1. Représenter la configuration de chemins non-intersectants associée au pavage de la figure 2(b). (Suivre la convention vue en cours, rappelée sur la figure 2(c).)
2. Sur quel graphe sont tracés les chemins pour un diamant aztèque de taille n générale ? Quels sont les types de pas¹ possibles ? On appelle *chemin de Schröder* un chemin constitué de tels pas.

1. Par *pas* on entend la différence de coordonnées entre deux sommets visités consécutivement.

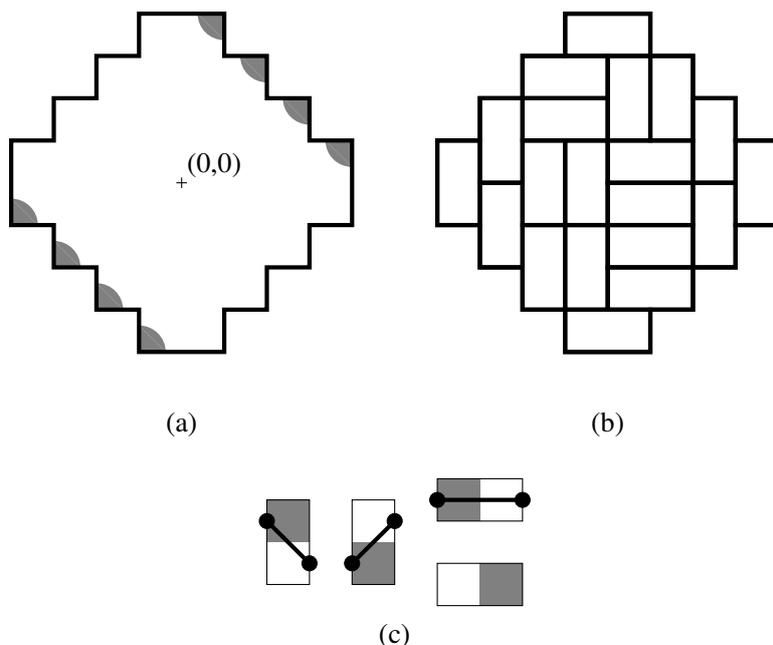


FIGURE 2 – (a) Le diamant aztèque de taille 4. Par convention sont coloriés en noir tous les carrés des bords inférieur gauche et supérieur droit. (b) Un pavage du diamant aztèque de taille 4. (c) Rappel de la convention du cours.

Donner les coordonnées des points de départ et d'arrivée des chemins pour un diamant aztèque de taille n générale. (On orientera les chemins de la gauche vers la droite.)

3. Montrer que les pavages du diamant aztèque de taille n sont en bijection avec les configurations de n chemins de Schröder non-intersectants partant des points $(-2i + 1, 0)$, $1 \leq i \leq n$, menant aux points $(2j - 1, 0)$, $1 \leq j \leq n$, et qui sont *positifs*, c'est-à-dire qui ne passent par aucun sommet d'ordonnée strictement négative. (Indication : comme au TD 5, trouver un prolongement judicieux des chemins.)
4. On note r_n le nombre de chemins de Schröder positifs partant de $(0, 0)$ et menant à $(2n, 0)$. Montrer que le nombre de pavages du diamant aztèque de taille n est égal à

$$A_n = \det_{1 \leq i, j \leq n} r_{i+j-1}.$$

5. Montrer que r_n satisfait la relation de récurrence

$$r_n = \begin{cases} 1 & \text{si } n = 0, \\ r_{n-1} + \sum_{k=0}^{n-1} r_k r_{n-1-k} & \text{si } n \geq 1. \end{cases}$$

(Indication : considérer une décomposition des chemins au premier passage par un sommet de la forme $(\ell, 0)$ avec $\ell > 0$.)

6. Dédurre que la série génératrice $r(z) = \sum_{n=0}^{\infty} r_n z^n$ satisfait

$$r(z) = 1 + z r(z)(r(z) + 1).$$

(On suppose $|z|$ inférieur au convergence de $r(z)$. Pourquoi celui-ci est-il non-nul ?)

7. On note s_n le nombre de chemins de Schröder positifs partant de $(0, 0)$, menant à $(2n, 0)$ et ne visitant jamais consécutivement deux sommets d'ordonnée nulle (c'est-à-dire ne faisant jamais de pas horizontal en partant d'un sommet d'ordonnée nulle). Montrer que s_n satisfait la relation de récurrence

$$s_n = \begin{cases} 1 & \text{si } n = 0, \\ \sum_{k=0}^{n-1} r_k s_{n-1-k} & \text{si } n \geq 1. \end{cases}$$

8. Exprimer la série génératrice $s(z) = \sum_{n=0}^{\infty} s_n z^n$ en fonction de $r(z)$, et en déduire que

$$s_n = \frac{r_n}{2} \quad \text{pour } n \geq 1.$$

9. Montrer que

$$\det_{1 \leq i, j \leq n} s_{i+j-1} = \det_{1 \leq i, j \leq n-1} r_{i+j-1}$$

en exhibant une bijection entre les configurations de chemins non-intersectants comptées respectivement par chacun de ces déterminants.

10. Déduire des questions précédentes une relation de récurrence pour A_n et la résoudre.

11. Comparer le résultat obtenu au nombre de pavages d'un rectangle $M \times N$, vu en cours : que remarque-t-on ?