Aspects rigoureux de la mécanique statistique à l'équilibre

Jérémie Bouttier et Guilhem Semerjian

Corrigé de l'examen du 5 juin 2014

1 Seuil de la percolation par arêtes sur le réseau triangulaire

1.1 Préliminaires

1. Soit x un sommet de $\mathbb{T}$, alors $\theta_{\mathbb{T}}(p)$ est la probabilité que x soit dans une composante infinie de la percolation de paramètre p sur $\mathbb{T}$. Cette quantité est clairement indépendante de x par invariance par translation du réseau, et est de plus une fonction croissante de p (comme on peut le démontrer rigoureusement par couplage croissant). La définition de $\theta_{\mathbb{H}}(p)$ est identique mutatis mutandis (il faut toutefois utiliser une rotation et non une translation pour montrer que deux sommets adjacents ont même probabilité d'être dans une composante connexe infinie).
2. On a
$$p_c(\mathbb{T}) = \inf\{p \in [0,1], \theta_{\mathbb{T}}(p) > 0\} = \sup\{p \in [0,1], \theta_{\mathbb{T}}(p) = 0\}$$
où l'équivalence des deux définitions vient de la croissance de $p \mapsto \theta_{\mathbb{T}}(p)$.
3. On s'attend à avoir
$$p_c(\mathbb{T}) + p_c(\mathbb{H}) = 1$$
(cf TD B dans le cas $q = 1$).

1.2 Transformation triangle-étoile

1. Pour G_1, les probabilités voulues sont respectivement
   - $P_1(xyz) = p_1^3 + 3p_1^2(1-p_1)$ (au moins deux parmi les trois arêtes doivent être ouvertes),
   - $P_1(x|y|z) = (1-p_1)^3$ (les trois arêtes doivent être fermées),
   - $P_1(xy|z) = p_1(1-p_1)^2$ (l'arête xy doit être ouverte et les deux autres fermées).

   Dans le cas de G_2, elles valent
   - $P_2(xyz) = p_2^3$ (les trois arêtes doivent être ouvertes),
   - $P_2(x|y|z) = (1-p_2)^3 + 3p_2(1-p_2)^2$ (au plus une arête peut être ouverte),
   - $P_2(xy|z) = p_2^2(1-p_2)$ (les arêtes xw et yw doivent être ouvertes et zw fermée).
2. On observe que la condition $P_1(xy|z) = P_2(xy|z)$ est satisfaite pour $p_2 = 1 - p_1$, et qu'alors les autres conditions sont équivalentes. Après simplification on trouve que p_1 doit être solution de l'équation
$$p_1^3 - 3p_1 + 1 = 0.$$
Par une analyse élémentaire, on voit que cette équation admet une unique solution dans $]0,1[$.
3. Il suffit d'écrire $2\sin(\pi/18) = e^{i\pi/18} - e^{-i\pi/18}$ et développer.
4. On peut par exemple procéder de la manière suivante :
   - avec probabilité p_1^3, on prend toutes les arêtes de G_1 et de G_2 ouvertes,
   - avec probabilité $3p_1^2(1-p_1)$, on prend toutes les arêtes de G_2 ouvertes, et deux arêtes de G_1 ouvertes et la troisième fermée (choisie uniformément),
   - avec probabilité p_1^3, on prend toutes les arêtes de G_1 et de G_2 fermées,

– avec probabilité $3p_1^2(1-p_1)$, on prend toutes les arêtes de G_1 fermées, et deux arêtes de G_2 fermées et la troisième ouverte (choisie uniformément),
– avec probabilité $3p_1(1-p_1)^2$, on tire uniformément au hasard un sommet parmi x, y, z, puis on prend toutes les arêtes incidentes à ce sommet dans G_1 et G_2 fermées, et les autres ouvertes.

Ces probabilités se somment bien à un en vertu de l'équation pour p_1. De plus, on vérifie aisément que l'état des arêtes de G_1 seul a même loi que la percolation de paramètre p_1 (notamment, les arêtes sont indépendantes), et de même pour G_2. Enfin, on observe que les deux premiers cas ci-dessus réalisent les évènements $C_1(xyz)$ et $C_2(xyz)$, les deux suivants les évènements $C_1(x|y|z)$ et $C_2(x|y|z)$, et le dernier $C_1(xy|z)$ et $C_2(xy|z)$ ou bien $C_1(yz|x)$ et $C_2(yz|x)$ ou bien $C_1(zx|y)$ et $C_2(zy|x)$.

5. Il suffit d'appliquer la transformation triangle-étoile à chaque triangle de $\mathbb{T}$ « pointant vers le haut », ce qui transforme $\mathbb{T}$ en un réseau hexagonal qui est un translaté de $\mathbb{H}$ (les sommets de $\mathbb{T}$ sont aussi des sommets de ce réseau hexagonal translaté, qu'on notera $\mathbb{H}'$ pour être précis).
6. Autour de chaque triangle pointant vers le haut dans $\mathbb{T}$, et son étoile correspondante dans $\mathbb{H}'$, on tire l'état des arêtes selon le couplage de la question 4, ce qui définit globablement un couplage entre la percolation de paramètre p_1 sur $\mathbb{T}$ et celle de paramètre p_2 sur $\mathbb{H}'$. Ce couplage préservant les connectivités entre les sommets de $\mathbb{T}$, les sommets de Γ_1 sont précisément ceux qui sont à la fois dans Γ_2 et dans $\mathbb{T}$. Clairement, Γ_1 est infini si et seulement si Γ_2 l'est (c'est évident dans un sens, pour l'autre on peut par exemple observer que si Γ_2 est infini alors il contient un chemin auto-évitant infini dont un sommet sur deux est dans $\mathbb{T}$ donc dans Γ_1). Ainsi, la probabilité que Γ_1 soit infini, qui n'est autre que $\theta_{\mathbb{T}}(p_1)$, est égale à la probabilité que Γ_2 soit infini, qui n'est autre que $\theta_{\mathbb{H}}(p_2)$.
7. Si $\theta_{\mathbb{T}}(p_1) = \theta_{\mathbb{H}}(p_2) = 0$, alors $p_1 \leq p_c(\mathbb{T})$ et $p_2 \leq p_c(\mathbb{H})$, mais comme $p_1+p_2 = 1$ et $p_c(\mathbb{T})+p_c(\mathbb{H}) = 1$ il y a en fait égalité. Même chose si $\theta_{\mathbb{T}}(p_1) = \theta_{\mathbb{H}}(p_2) > 0$.

1.3 Dualité

1. Étant donné une configuration de percolation d'arête sur $\mathbb{T}$, on définit une configuration duale sur $\mathbb{H}$ par la condition qu'une arête est ouverte si et seulement si sa duale est fermée.
2. Supposons par l'absurde que $p_c(\mathbb{T}) + p_c(\mathbb{H}) < 1$, alors il existe $p \in [0, 1]$ tel que $p > p_c(\mathbb{T})$ et $1-p > p_c(\mathbb{H})$. On considère la percolation de paramètre p sur $\mathbb{T}$, et Λ_n l'hexagone de côté n centré en l'origine. Numérotons les 6 côtés de Λ_n de 1 à 6 et introduisons les évènements A_i, $i = 1, \ldots, 6$: « il existe un chemin ouvert infini partant du côté i et restant hors de Λ_n ». Ces 6 évènements sont croissants, ont même probabilité, et leur union est l'évènement que Λ_n rencontre une composante connexe infinie, dont la probabilité tend vers 1 lorsque $n \to \infty$ (puisque $p > p_c(\mathbb{T})$) : par le « square-root trick », la probabilité de chacun des A_i tend alors aussi vers 1. Introduisons de même les évènements $\tilde{A}_i$, $i = 1, \ldots, 6$: « il existe un chemin dual ouvert infini partant du côté i et restant hors de Λ_n ». Ces 6 évènements sont décroissants, ont même probabilité, et leur union est l'évènement que Λ_n rencontre une composante connexe duale infinie, dont la probabilité tend vers 1 lorsque $n \to \infty$ (puisque $1 - p > p_c(\mathbb{H})$) : de même la probabilité de chacun des $\tilde{A}_i$ tend alors aussi vers 1. On en déduit que, par exemple, $A_1, \tilde{A}_2, A_3, \tilde{A}_4$ sont réalisés simultanément avec probabilité non-nulle pour n assez grand, et ces évènements sont de plus indépendants de l'état des arêtes à l'intérieur de Λ_n, qui sont toutes ouvertes avec probabilité positive : on en déduit qu'il y a alors avec probabilité positive au moins deux composantes connexes infinies, une contradiction.
3. Supposons par l'absurde que $p_c(\mathbb{T}) + p_c(\mathbb{H}) > 1$, alors il existe $p \in [0, 1]$ tel que $p < p_c(\mathbb{T})$ et $1 - p < p_c(\mathbb{H})$. Considérons une portion rectangulaire de $\mathbb{T}$ de taille (proche de) $n \times n$: la probabilité qu'un sommet du bord gauche soit relié par un chemin ouvert à un sommet du bord droit est au plus $\exp(-\psi(p)n)$, donc la probabilité qu'il y ait un chemin ouvert reliant le bord gauche au bord droit est au plus $n^2 \exp(-\psi(p)n) \to 0$ pour $n \to \infty$. De même, la probabilité qu'il y ait un chemin dual ouvert reliant le bord du haut au bord du bas est au plus $n^2 \exp(-\tilde{\psi}(1-p)n) \to 0$. Ainsi, pour n assez grand, avec probabilité positive il n'y a ni chemin ouvert de gauche à droite ni chemin dual ouvert de haut en bas, une contradiction.

2 Inégalités de corrélation pour le modèle d'Ising

2.1 Systèmes de taille finie

1. $J_{x,y}$ représente l'intensité de l'interaction entre les spins σ_x et σ_y, h_x celle du champ magnétique extérieur que subit le spin σ_x. La condition $J_{x,y} \geq 0$ signifie que les interactions sont ferromagnétiques, les spins ont tendance à s'aligner dans la même direction pour minimiser l'énergie.
2. La fonction de partition étant évidemment positive, il suffit de montrer que

$$\sum_{\underline{\sigma}} \sigma_X \prod_{\substack{x,y\in\Lambda \\ x\neq y}} e^{\frac{1}{2}\beta J_{x,y}\sigma_x\sigma_y} \prod_{x\in\Lambda} e^{\beta h_x \sigma_x} \geq 0 \ . \tag{1}$$

En développant en série les exponentielles cette expression se décompose comme une somme de termes proportionnels (à des facteurs combinatoires positifs près) à

$$\prod_{\substack{x,y\in\Lambda \\ x\neq y}} \left(\frac{1}{2}\beta J_{x,y}\right)^{n_{x,y}} \prod_{x\in\Lambda} (\beta h_x)^{n_x} \sum_{\underline{\sigma}} \prod_{x\in X} \sigma_x \prod_{\substack{x,y\in\Lambda \\ x\neq y}} (\sigma_x\sigma_y)^{n_{x,y}} \prod_{x\in\Lambda} \sigma_x^{n_x} \ , \tag{2}$$

où les n sont des entiers positifs ou nuls. Comme les $\beta J_{x,y}$ et βh_x sont positifs, le facteur devant la somme l'est aussi. Par ailleurs la sommation sur $\underline{\sigma}$ est positive : elle vaut $2^{|\Lambda|}$ si chacun des spins σ_x apparaît un nombre pair de fois, 0 sinon.
3. En suivant l'indication de l'énoncé,

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_X \sigma_Y \rangle - \langle \sigma_X \rangle \langle \sigma_Y \rangle &= \frac{1}{Z^2} \sum_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'} (\sigma_X\sigma_Y - \sigma_X\sigma'_Y) \ e^{\frac{1}{2}\sum\limits_{x,y}\beta J_{x,y}(\sigma_x\sigma_y+\sigma'_x\sigma'_y)+\sum\limits_x \beta h_x(\sigma_x+\sigma'_x)} \\
&= \frac{1}{Z^2} \sum_{\underline{\sigma},\underline{\sigma}'} \sigma_X\sigma_Y(1 - \sigma_Y\sigma'_Y) \ e^{\frac{1}{2}\sum\limits_{x,y}\beta J_{x,y}\sigma_x\sigma_y(1+\sigma_x\sigma'_x\sigma_y\sigma'_y)+\sum\limits_x \beta h_x\sigma_x(1+\sigma_x\sigma'_x)} \\
&= \frac{1}{Z^2} \sum_{\underline{\sigma},\underline{\tau}} \sigma_X\sigma_Y(1 - \tau_Y) \ e^{\frac{1}{2}\sum\limits_{x,y}\beta J_{x,y}\sigma_x\sigma_y(1+\tau_x\tau_y)+\sum\limits_x \beta h_x\sigma_x(1+\tau_x)} \ .
\end{aligned} \tag{3}$$

En séparant les deux sommations on note que cette expression vaut

$$\frac{1}{Z^2} \sum_{\underline{\tau}} (1-\tau_Y) \sum_{\underline{\sigma}} \sigma_X\sigma_Y \ e^{\frac{1}{2}\sum\limits_{x,y}\beta J_{x,y}(1+\tau_x\tau_y)\sigma_x\sigma_y+\sum\limits_x \beta h_x(1+\tau_x)\sigma_x} \ . \tag{4}$$

A $\underline{\tau}$ fixé la somme sur $\underline{\sigma}$ est positive d'après la question précédente : elle est en effet proportionnelle à $\langle \sigma_{X\Delta Y} \rangle$ (ici Δ désigne la différence symétrique) pour un modèle où les couplages sont $J_{x,y}(1+\tau_x\tau_y)$ et les champs $h_x(1+\tau_x)$, bien positifs quelque soit $\underline{\tau}$. Comme $1-\tau_Y$ est aussi positif, c'est bien le cas de toute l'expression.
4. L'inégalité de Harris s'écrit $\langle fg \rangle \geq \langle f \rangle \langle g \rangle$, elle a donc la même forme que l'inégalité de Griffiths et exprime que deux variables aléatoires sont corrélées positivement. Cependant les hypothèses de validité sont différentes dans les deux cas : pour Harris on suppose les variables élémentaires (ici les spins) indépendantes, ce qui n'est pas le cas pour Griffiths dès que les couplages $J_{x,y}$ sont non-nuls. Par ailleurs l'inégalité de Harris suppose les fonctions f et g croissantes, ici on considère une famille particulière de fonctions σ_X.
5. On peut remarquer que

$$\frac{\partial}{\partial h_x} \langle \sigma_X \rangle = \beta \left(\langle \sigma_X \sigma_x \rangle - \langle \sigma_X \rangle \langle \sigma_x \rangle \right) \geq 0 \ , \tag{5}$$

l'inégalité provenant du résultat de la question 3. Autrement dit augmenter un champ magnétique fait augmenter les moyennes des produits de spin. En modifiant un champ à la fois pour passer des champs $h_x^{(1)}$ aux champs $h_x^{(2)}$ les moyennes $\langle \sigma_X \rangle$ augmentent à chaque étape, d'où l'inégalité.

6. Un champ h_x égal à $+\infty$ correspond à fixer strictement $\sigma_x = +1$ dans la loi de probabilité de Gibbs-Boltzmann, les configurations avec $\sigma_x = -1$ ayant un poids nul.
7. Comme ci-dessus
$$\frac{\partial}{\partial J_{x,y}} \langle \sigma_X \rangle = \beta \left(\langle \sigma_X \sigma_x \sigma_y \rangle - \langle \sigma_X \rangle \langle \sigma_x \sigma_y \rangle \right) \geq 0 \ , \tag{6}$$
i.e. augmenter un couplage fait augmenter les moyennes des produits de spin. Comme la dépendance en β de $\langle \sigma_X \rangle$ est entièrement par l'intermédiaire des produits $\beta J_{x,y}$ et βh_x, on conclut que $\langle \sigma_X \rangle$ est croissante en β.
8. σ_X est croissante si et seulement si $|X| = 1$. En effet σ_x est bien croissante, et pour $|X| \geq 2$ on trouve facilement des configurations qui violent l'inégalité, par exemple $\underline{\sigma} = (-1,-1,+1,\dots,+1)$ et $\underline{\sigma}' = (-1,+1,+1,\dots,+1)$.

2.2 Applications à la théorie des mesures de Gibbs

9. (a) Les spins hors de Λ sont fixées à $+1$ dans les deux membres de l'équation, on peut donc sans perte de généralité supposer $X \subset \Lambda$. On est donc exactement dans le cadre de la première partie du problème, avec $\mu^+_\Lambda(\sigma_X) = \langle \sigma_X \rangle_1$ et $\mu^+_{\Lambda'}(\sigma_X) = \langle \sigma_X \rangle_2$ et des champs $h_x^{(1)}$ égaux à J multiplié par le nombre de voisins de x dans $\mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$, alors que $h_x^{(2)} = +\infty$ si $x \in \Lambda \setminus \Lambda'$ et $h_x^{(2)} = h_x^{(1)}$ si $x \in \Lambda'$. On peut donc utiliser le résultat de la question 5 pour conclure.

   (b) Considérons $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$, une partie finie X de $\mathbb{Z}^d$, et la suite $\mu^+_{\Lambda_n}(\sigma_X)$. D'après la réponse à la question précédente cette suite est décroissante, elle admet donc une limite. Comme toute fonction f dépendant d'un nombre fini de spins d'Ising peut s'écrire comme une combinaison linéaire de produits σ_X d'un nombre fini de spins, cela implique que $\mu^+_{\Lambda_n}(f)$ converge pour toute fonction f dépendant d'un nombre fini de variables. D'après la caractérisation de la convergence des mesures rappelée dans l'énoncé ceci est suffisant pour conclure à la convergence de la suite $\mu^+_{\Lambda_n}$.

   (c) Comme $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ et $\Lambda'_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ on peut construire deux suites croissantes n_p et n'_p telles que
$$\Lambda_{n_1} \subset \Lambda'_{n'_1} \subset \Lambda_{n_2} \subset \Lambda'_{n'_2} \subset \Lambda_{n_3} \subset \dots \tag{7}$$
   Pour une partie finie X de $\mathbb{Z}^d$ notons $b_p = \mu^+_{\Lambda_{n_p}}(\sigma_X)$ et $b'_p = \mu^+_{\Lambda'_{n'_p}}(\sigma_X)$. D'après (7) et la réponse à la question 9a on a
$$b_1 \geq b'_1 \geq b_2 \geq b'_2 \geq b_3 \geq \dots \ , \tag{8}$$
   les deux suites b_p et b'_p ont donc la même limite. Comme ci-dessus on étend le résultat par combinaison linéaire : pour toute fonction dépendant d'un nombre fini de variables $\lim \mu^+_{\Lambda_n}(f) = \lim \mu^+_{\Lambda'_n}(f)$, et comme c'est vrai quelque soit f on a bien $\lim \mu^+_{\Lambda_n} = \lim \mu^+_{\Lambda'_n}$.

10. (a) $\mu^+_\Lambda(\sigma_0)$ est une fonction croissante de β d'après la question 7, en prenant $X = \{0\}$. La monotonicité est préservée dans la limite $\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d$.

    (b) Par symétrie $\mu^-(\sigma_0) = -m_{\rm sp}(\beta)$.

    (c) D'après Dobrushin il existe une température inverse β_1 telle que pour $\beta < \beta_1$ il n'existe qu'une mesure de Gibbs. Dans ce cas $\mu^+ = \mu^-$, on a donc $m_{\rm sp}(\beta) = 0$ pour $\beta < \beta_1$. A l'inverse le résultat de Peierls a montré l'existence (en dimension $d \geq 2$) d'une température inverse β_2 telle que $m_{\rm sp}(\beta) > 0$ pour $\beta > \beta_2$. Avec en plus la monotonicité qui vient de Griffiths, il ne peut y avoir qu'une seule température critique qui sépare deux régimes avec ou sans aimantation spontanée.

11. (a) C'est une application du résultat de l'énoncé, les champs imposés sur les spins dans Λ par la condition aux bords $\underline{\tau}'$ étant supérieurs à ceux de la condition aux bords $\underline{\tau}$.

(b) Comme ν est une mesure de Gibbs, $\nu(f_\Lambda) = \nu(f)$, où comme dans le cours $f_\Lambda(\underline{\tau})$ est la fonction moyennée dans Λ avec la condition aux bords $\underline{\tau}$. Si l'on choisit Λ suffisament grand pour que $X \subset \Lambda$, on a $f_\Lambda(\underline{\tau}) = \mu_\Lambda^{\underline{\tau}}(f) \leq \mu_\Lambda^+(f)$ quelque soit $\underline{\tau}$, d'après la question précédente. Donc $\nu(f) = \nu(f_\Lambda) \leq \mu_\Lambda^+(f)$. Ceci est vrai quelque soit Λ incluant X, on peut prendre la limite $\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d$ pour conclure.

(c) D'après la question précédente on a $\mu_1(f) \leq \mu^+(f)$ et $\mu_2(f) \leq \mu^+(f)$. Pour que $\alpha\mu_1(f) + (1-\alpha)\mu_2(f)$ soit égale à $\mu^+(f)$ avec $\alpha \in]0,1[$ il faut donc que $\mu_1(f) = \mu_2(f) = \mu^+(f)$. Comme c'est vrai quelque soit X et $f \in \mathcal{C}_X^\uparrow$ cela implique $\mu_1 = \mu_2 = \mu^+$ (car toute fonction dépendant d'un nombre fini de variables peut se décomposer comme une combinaison linéaire de fonctions croissantes), il n'existe donc pas de décomposition non-triviale de μ^+.

On a vu en cours que les mesures de Gibbs extrémales sont celles qui sont triviales à l'infini. On peut comprendre intuitivement que μ^+ soit triviale à l'infini, car elle donne un poids 1 seulement aux évènements contenant les configurations qui sont « égales à $+1$ à l'infini », et 0 sinon.

12. (a) Les ρ_x sont évidemment croissantes, ainsi que leur somme, la difficulté pourrait donc provenir de la soustraction de ρ_X elle-même croissante. Mais pour que ρ_X augmente strictement il faut qu'au moins un des ρ_x ait strictement augmenté, ce qui compense le premier effet. Plus explicitement, considérons deux configurations $\underline{\sigma}, \underline{\sigma}'$ avec $\sigma_x \leq \sigma'_x$ pour tout $x \in X$, notons ρ_x, ρ_X et f pour la première configuration, et ρ'_x, ρ'_X et f' pour la deuxième. Deux cas sont à considérer : soit $\rho_X = \rho'_X$, et alors $f \leq f'$. Soit $\rho_X < \rho'_X$, et alors la seule possibilité est $\rho_X = 0$ (il existe donc un $\rho_x = 0$) et $\rho'_X = 1$ (et donc $\rho'_x = 1$ pour tous les x), on vérifie donc $f \leq f'$ aussi dans ce cas-là.

(b) Comme f est croissante on a $\mu^+(f) \geq \mu^-(f)$, soit

$$\mu^+\left(\sum_{x\in X}\rho_x\right) - \mu^-\left(\sum_{x\in X}\rho_x\right) \geq \mu^+(\rho_X) - \mu^-(\rho_X) \ . \tag{9}$$

Comme ρ_X est elle-même croissante, le membre de droite de cette inégalité est positif. Par ailleurs, en utilisant l'invariance par translation de μ^+ et μ^-, ainsi que la définition de $m_{\rm sp}$, il vient

$$|X| m_{\rm sp}(\beta) \geq \mu^+(\rho_X) - \mu^-(\rho_X) \geq 0 \ . \tag{10}$$

(c) Si $m_{\rm sp}(\beta) = 0$ on a donc $\mu^+(\rho_X) = \mu^-(\rho_X)$, et donc $\nu(\rho_X) = \mu_+(\rho_X)$ pour toute mesure de Gibbs ν. Comme toute fonction dépendant d'un nombre fini de variables peut se décomposer comme une combinaison linéaire de ρ_X, cela implique $\nu = \mu_+$, il n'existe donc qu'une mesure de Gibbs si l'aimantation spontanée s'annule.