Aspects rigoureux de la mécanique statistique à l'équilibre
Corrigé du TD A : équivalences entre modèles

Jérémie Bouttier et Guilhem Semerjian

20 février 2014

Le but de ce TD est de montrer les relations entre différents modèles de physique statistique à l'équilibre, en revenant notamment sur l'équivalence entre modèle de Potts et FK-percolation, vue en cours. Cette équivalence repose non pas sur une bijection entre configurations des deux modèles, mais sur un développement « diagrammatique » qu'on peut réinterpréter en termes probabilistes comme un *couplage*. Une idée très similaire est derrière la reformulation du modèle $O(n)$ en termes de gaz de boucles, vue en seconde partie.

1 Couplage entre modèle de Potts et FK-percolation

1. Observons tout d'abord qu'une expression de la forme

$$\sum_{\omega \in \{0,1\}^E} \prod_{e \in E} f(e)$$

se factorise immédiatement en

$$\prod_{e \in E} \sum_{\omega_e \in \{0,1\}} f(e).$$

On prend ici $f(e) = (v\delta_{\eta_i,\eta_j})^{\omega_e}$ où i, j sont les extrémités de e, et on déduit

$$\Psi_1(\eta) = \prod_{i \sim j} (1 + v\delta_{\eta_i,\eta_j}).$$

On remarque alors (comme vu en cours) que, si on pose $\beta = \ln(1 + v)$, alors

$$1 + v\delta_{\eta_i,\eta_j} = e^{\beta \delta_{\eta_i,\eta_j}}$$

puisque le symbole de Kronecker ne prend que les valeurs 0 ou 1. On identifie alors $\Psi_1(\eta)$ comme étant le poids de Boltzmann de la configuration η associé au hamiltonien

$$H(\eta) = -\sum_{i \sim j} \delta_{\eta_i,\eta_j}$$

(modèle de Potts ferromagnétique à q états en champ externe nul, le couplage pouvant être absorbé dans la température).
La fonction de partition est ainsi donnée par

$$Z = \sum_{\eta} \Psi_1(\eta) = \sum_{\eta} \sum_{\omega} \Psi(\eta, \omega)$$

et $\Psi_1(\eta)/Z$ est, par définition, la probabilité de Gibbs-Boltzmann de la configuration η dans le modèle de Potts.

2. Notons $|\omega| = \sum_{e\in E}\omega_e$ le nombre d'arêtes de ω (qu'on identifie par un léger abus à un sous-graphe couvrant de G). On peut alors écrire

$$\Psi(\eta,\omega) = v^{|\omega|}\prod_{i\sim j}(\delta_{\eta_i,\eta_j})^{\omega_{ij}}$$

et on observe que le produit dans le membre de droite vaut 1 si η est constante dans chaque composante connexe de ω, et 0 sinon. Le nombre total de configurations de spins η ayant une contribution non-nulle est clairement $q^{C(\omega)}$ (q choix pour la valeur du spin dans chaque composante connexe), et on déduit

$$\Psi_2(\omega) = q^{C(\omega)}v^{|\omega|}$$

qu'on peut réécrire

$$\Psi_2(\omega) = q^{C(\omega)}\prod_{e\in E}(v\delta_{\omega_e,1}+\delta_{\omega_e,0}) = (v+1)^{|E|}q^{C(\omega)}\prod_{e\in E}(p\delta_{\omega_e,1}+(1-p)\delta_{\omega_e,0})$$

avec $p = v/(1+v)$.

3. Notons P_{ij} la probabilité d'avoir $\eta_i = \eta_j$ dans le modèle de Potts (P_{ij} dépendant bien sûr implicitement de la température inverse β et du nombre d'états q). À température nulle, on se trouve avec probabilité 1 dans un état de plus basse énergie, c'est-à-dire où le spin est constant (G étant supposé connexe), et ainsi P_{ij} vaut 1. À température infinie, tous les états sont au contraire équiprobables et, comme chaque spin peut prendre q valeurs, P_{ij} vaut $1/q$.

   On se place à présent à température quelconque et on cherche à comprendre comment la FK-percolation permet d'interpoler entre ces deux valeurs extrêmes. On va suivre deux approches (qui ne diffèrent au fond que par le langage) :

   - approche combinatoire : on a

   $$P_{ij}(\beta) = \frac{1}{Z}\sum_{\eta}\Psi_1(\eta)\delta_{\eta_i,\eta_j} = \frac{1}{Z}\sum_{\eta}\sum_{\omega}\psi(\eta,\omega)\delta_{\eta_i,\eta_j} = \frac{1}{Z}\sum_{\omega}v^{|\omega|}\sum_{\eta}\delta_{\eta_i,\eta_j}\prod_{k\sim\ell}(\delta_{\eta_k,\eta_\ell})^{\omega_{k\ell}}$$

   et on procède alors comme dans la question précédente : la somme sur η dans le membre de droite vaut $q^{C(\omega')}$ où ω' est obtenu à partir de ω en ajoutant l'arête ij si elle n'y était pas déjà. Si i et j sont dans une même composante connexe de ω, alors $C(\omega') = C(\omega)$, sinon $C(\omega') = C(\omega) - 1$. On a ainsi

   $$P_{ij} = \frac{1}{Z}\sum_{\omega}q^{C(\omega)}v^{|\omega|}\frac{1+(q-1)c_{ij}(\omega)}{q} = \frac{1}{Z}\sum_{\omega}\Psi_2(\omega)\frac{1+(q-1)c_{ij}(\omega)}{q}$$

   où $c_{ij}(\omega)$ vaut 1 si i et j sont dans une même composante connexe de ω, et 0 sinon. On en déduit immédiatement

   $$P_{ij} = \frac{1+(q-1)C_{ij}}{q}$$

   où C_{ij} est la probabilité que i et j sont dans une même composante de ω tiré selon la loi de FK-percolation de paramètres $p = 1-e^{-\beta}$ et q.

– approche probabiliste : considérons la paire (η, ω) tirée selon la mesure de probabilité $\Pi = \Psi/Z$. La probabilité d'avoir $\eta_i = \eta_j$ sachant que i et j sont dans une même composante connexe de ω vaut 1 (puisque dans une même composante, tous les spins sont identiques avec probabilité 1), tandis que la probabilité d'avoir $\eta_i = \eta_j$ sachant que i et j sont dans des composantes distinctes est $1/q$ (puisque dans chaque composante connexe le spin est tiré indépendamment et uniformément parmi q valeurs). En notation probabiliste, ceci s'écrit

$$\Pi(\eta_i = \eta_j | c_{ij}(\omega) = 1) = 1, \qquad \Pi(\eta_i = \eta_j | c_{ij}(\omega) = 0) = \frac{1}{q}.$$

Par ailleurs, les questions précédentes montrent que la loi marginale de η est la mesure de Gibbs-Boltzmann du modèle de Potts, et celle de ω la FK-percolation. On en déduit

$$P_{ij} = \Pi(\eta_i = \eta_j), \qquad C_{ij} = \Pi(c_{ij}(\omega) = 1)).$$

En substituant toutes ces expressions dans la relation

$$\Pi(\eta_i = \eta_j) = \Pi(\eta_i = \eta_j | c_{ij}(\omega) = 1)\Pi(c_{ij}(\omega) = 1) + \Pi(\eta_i = \eta_j | c_{ij}(\omega) = 0)\Pi(c_{ij}(\omega) = 0)$$

on retrouve immédiatement la relation $P_{ij} = (1 + (q-1)C_{ij})/q$.

Intuitivement, l'existence d'un ordre ferromagnétique se manifeste par le fait que P_{ij} ne tend pas vers $1/q$ lorsque i et j sont très éloignés, ce qui signifie que C_{ij} ne tend pas vers 0, autrement dit i et j conservent une probabilité positive d'être dans une même composante connexe qui est alors “géante”.

Remarque mathématique : cette question est un exemple de preuve par couplage (réaliser les variables aléatoires η et ω de manière dépendante sur un même espace de probabilité).

2 Couplage entre modèle $O(n)$ et gaz de boucles

1. L'énergie d'interaction entre deux spins voisins varie de $-\ln(1+x)$ à $\ln(1-x)$: l'amplitude de cette variation augmente avec x, ce qui tend à favoriser les configurations de spins alignées, d'où l'analogie entre x et une température (inverse). Pour $n = 1$, le produit $\sigma_i \cdot \sigma_j$ ne prend que deux valeurs ± 1, ce qui permet d'écrire $\ln(1 + x\sigma_i\sigma_j) = J\sigma_i\sigma_j + E$ pour des J, E bien choisis, ce qui permet d'écrire le hamiltonien sous la forme de celui du modèle d'Ising à une constante additive non pertinente près.
2. L'argument est similaire à celui de la question 1 de la première partie.
3. La première et de la troisième intégrale sont nulles puisque l'intégrande change de signe si $\vec{u} \mapsto -\vec{u}$, tandis que la mesure μ est invariante.

   Pour la seconde intégrale, par linéarité il suffit de vérifier l'égalité pour des vecteurs $\vec{u_1}, \vec{u_2}$ de la base canonique de $\mathbb{R}^n$. Lorsque $\vec{u_1} = \vec{u_2}$, on calcule la moyenne du carré de l'une des composantes d'un vecteur unitaire tiré uniformément sur S^{n-1}, qui vaut $1/n$ (la somme des carrés de toutes les composantes vaut 1, et toutes les composantes sont équidistribuées par invariance par rotation). Lorsque $\vec{u_1} \neq \vec{u_2}$, l'intégrale est nulle puisque, si on considère une réflexion laissant $\vec{u_1}$ invariant et retournant $\vec{u_2}$, alors l'intégrande change de signe mais la mesure est invariante.
4. On a

   $$\Upsilon_2(\omega) = x^{|\omega|} \int \prod_{i \sim j} (\vec{\sigma_i} \cdot \vec{\sigma_j})^{\omega_{ij}} \prod_{i \in V} d\mu(\vec{\sigma_i})$$

   et, comme G est trivalent et $\omega \in \{0,1\}^E$, on observe que chaque $\vec{\sigma_i}$ apparaît au plus trois fois dans l'intégrande. Par la question précédente, $\Upsilon_2(\omega)$ s'annule si un $\vec{\sigma_i}$ apparaît exactement

1 ou 3 fois ou, autrement dit, un sommet i est incident à exactement 1 ou 3 arêtes du sous-graphe ω. Pour que $\Upsilon_2(\omega)$ soit non nul, il est donc nécessaire que chaque sommet soit incident à exactement 0 ou 2 arêtes dans ω, c'est-à-dire que ω soit l'union de cycles disjoints. Supposons donc cette condition satisfaite. Clairement, l'intégrale se factorise selon les composantes connexes de ω, et l'intégration sur les spins des sommets isolés fait apparaît un facteur 1 (puisque μ est une mesure de probabilité). Reste à considérer l'intégrale des spins le long d'un cycle : par exemple, pour un cycle de longueur 3, celle-ci prend la forme

$$\int (\vec{\sigma_1} \cdot \vec{\sigma_2})(\vec{\sigma_2} \cdot \vec{\sigma_3})(\vec{\sigma_3} \cdot \vec{\sigma_1}) d\mu(\vec{\sigma_1}) d\mu(\vec{\sigma_2}) d\mu(\vec{\sigma_3}) = \frac{1}{n} \int (\vec{\sigma_1} \cdot \vec{\sigma_2})(\vec{\sigma_2} \cdot \vec{\sigma_1}) d\mu(\vec{\sigma_1}) d\mu(\vec{\sigma_2}) = \frac{1}{n^2} \int (\vec{\sigma_1} \cdot \vec{\sigma_1}) d\mu(\vec{\sigma_1}) = \frac{1}{n^2}.$$

De manière générale l'intégrale des spins le long d'un cycle de longueur ℓ vaut $1/n^{\ell-1} = n/n^{\ell}$, et ainsi

$$\Upsilon_2(\omega) = n^{L(\omega)} (x/n)^{|\omega|}$$

où $L(\omega)$ est le nombre de cycles (égal à $C(\omega)$ moins le nombre de sommets isolés) et $|\omega|$ la somme de leurs longueurs (i.e. le nombre total d'arêtes de ω).

La fonction de partition du modèle $O(n)$, qu'on peut réécrire

$$Z = \int \left(\sum_{\omega} \Upsilon(\vec{\sigma}, \omega) \right) \prod_{i \in V} d\mu(\vec{\sigma_i}) = \sum_{\omega} \Upsilon_2(\omega),$$

est ainsi un polynôme en les deux variables n et $y = x/n$, ce qui permet ainsi d'étendre sa définition aux valeurs non entières de n.

5. En répétant le même argument pour le calcul de la valeur moyenne de $\vec{\sigma_i} \cdot \vec{\sigma_j}$ dans le modèle $O(n)$, on observe que les ω donnant une contribution non-nulle sont ceux où les deux sommets i, j ont exactement 1 ou 3 arêtes incidentes dans ω, tandis que les autres sommets ont comme avant exactement 0 ou 2 arêtes incidentes. De tels sous-graphes peuvent être vus comme l'union de cycles disjoints et d'une marche auto-évitante (chemin simple) de i à j ne touchant pas les cycles, sauf éventuellement en i et j. La contribution d'un graphe reste proportionnelle à $n^{L(\omega)}$ où $L(\omega)$ est le nombre de cycles.

   Dans la limite $n \to 0$, la contribution dominante vient des configurations ω ne contenant aucun cycle ($L(\omega) = 0$), autrement dit des marches auto-évitantes de i à j. Ainsi, le modèle des marches auto-évitantes peut être vu comme la « limite $n \to 0$ du modèle $O(n)$ ». Pierre-Gilles de Gennes a démontré que cela restait vrai sur un graphe général (non nécessairement trivalent) ainsi qu'avec une interaction à deux spins plus générale que $-\ln(1 + x\vec{\sigma_i} \cdot \vec{\sigma_j})$. L'intérêt du modèle particulier que nous considérons ici (introduit par Domany *et al*) est que l'équivalence avec un gaz de boucles reste exacte pour des valeurs générales de n.