

ASPECTS RIGoureux DE LA MÉCANIQUE STATISTIQUE À L'ÉQUILIBRE LIMITE THERMODYNAMIQUE ET MESURES DE GIBBS

Guilhem Semerjian

Février-Juin 2014

Notes, préliminaires, non corrigées et non destinées à une diffusion publique, du cours du cursus mixte Maths-Physique donné par Jérémie Bouttier et Guilhem Semerjian en 2012-2013 et 2013-2014. Ce fichier comprend la partie du cours donnée par GS.

Signalons la principale différence entre ces notes et la version présentée en classe : pendant les cours n'ont été discutées que les interactions à portée finie, ici on considère un cadre un peu plus général (voir les définitions de \mathcal{I}_p et \mathcal{I}_g dans la partie 2.1).

Les deux ouvrages principalement utilisés dans la préparation de ce cours sont :

- Barry Simon, *Statistical mechanics of lattice gases*
- Errico Presutti, *Scaling limits in statistical mechanics and microstructures in continuum mechanics*

1 Rappels de mécanique statistique - motivations du cours

1.1 Configurations et énergie

but de la mécanique statistique : expliquer les propriétés macroscopiques d'un système à partir d'une modélisation microscopique

point de départ de la mécanique statistique : définir un espace de configurations et une fonction énergie (Hamiltonien) sur cet espace

- systèmes de N particules
configurations = positions $\vec{r}_i \in \mathcal{V} \subset \mathbb{R}^N$ et impulsions $\vec{p}_i \in \mathbb{R}^N$ de chaque particule
Hamiltonien somme des énergies cinétique et potentielle
on n'en parlera plus
- modèles discrets sur réseau
N variables $\underline{\sigma} = (\sigma_1, \dots, \sigma_N) \in \chi^N$
pour Ising $\chi = \{-1, +1\}$, pour Potts $\chi = \{1, \dots, q\}$.
Modèle d'Ising ferromagnétique, sur un graphe, $H(\underline{\sigma}) = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i$, somme sur les liens du graphe, interprétation couplage $J > 0$, champ magnétique h .
En particulier sur des portions de \mathbb{Z}^d , interactions entre proches voisins. Pour des cubes de longueur L , $N = L^d$.
Mentionner l'équivalence d'un système de spins d'Ising avec un système de particules, $\sigma_i = \pm 1 \leftrightarrow$ particule présente/absente sur le site i
- on n'abordera pas non plus les aspects quantiques de la mécanique statistique, ni les problèmes de dynamique

1.2 Ensembles statistiques

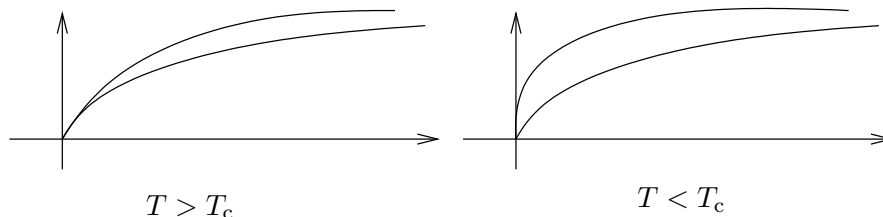
i.e. lois de probabilité sur l'espace des configurations. Cette approche se justifie car la description microscopique est (i) ingérable car N est trop grand, on ne peut pas connaître la configuration microscopique du système (ii) inutile car on ne veut/sait mesurer que des observables macroscopiques.

- microcanonique, correspond physiquement à un système isolé
équiprobabilité des configurations avec $H(\underline{\sigma}) = E$ (à ΔE près)
potentiel thermodynamique est (moins) l'entropie
 $S(E) = k_B \ln(\text{nbre configurations autorisées})$, avec souvent $k_B = 1$
- canonique, correspond à un système en contact avec un thermostat de température T
notation $\beta = \frac{1}{k_B T}$
probabilité de Gibbs-Boltzmann $\mu(\underline{\sigma}) = \frac{1}{Z(\beta)} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$
normalisation est la fonction de partition $Z(\beta) = \sum_{\underline{\sigma}} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$
potentiel thermodynamique est l'énergie libre, $F(\beta) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta)$
notation $\langle \cdot \rangle$ pour les moyennes d'une fonction de l'espace des configurations par rapport à la mesure de Gibbs-Boltzmann

il y a équivalence des ensembles (dans la "limite thermodynamique"), structure de transformée de Legendre entre $F(T)$ et $S(E)$, énergie fixée strictement dans l'ensemble microcanonique, seulement en moyenne dans l'ensemble canonique, mais petites fluctuations relatives d'où l'équivalence

1.3 Transitions de phase

- prendre l'exemple d'un modèle d'Ising, par exemple à 2d, tracer l'allure de $m(h)$, où $m = \langle \sigma_0 \rangle$ l'aimantation du spin au centre, justifier impaire (symétrie) et croissante (intuitif + inégalités de Griffiths) pour différentes températures, différentes tailles du système



pende en 0 (susceptibilité) finie ou d'ordre N dans la limite $N \rightarrow \infty$

- définir l'aimantation spontanée, $\lim_{h \rightarrow 0^+} \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \sigma_0 \rangle$, en intervertissant les limites c'est toujours 0, allure en fonction de la température, exposant critique β , à ne pas confondre avec $1/T$
- transitions de phase (singularités des fonctions thermodynamiques) n'apparaissent que pour $N \rightarrow \infty$, une partie du cours s'attachera à discuter l'existence et les propriétés de cette limite, sur les grandeurs thermodynamiques (densité d'énergie libre $f(\beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} F(\beta)$, entropie) et sur les mesures de probabilités elles-mêmes (non-trivial, mesures de probabilité sur un espace infini)
- définir et mentionner transitions du premier vs second ordre. Exemple du diagramme de phase Ising en (T, h) .
- mentionner les autres exposants critiques pour les transitions du second ordre, en particulier pour la singularité de $f(\beta)$ en $|T - T_c|^{2-\alpha}$
- mentionner d'autres transitions de phase, corps pur, cristaux liquides, supraconductivité... et idée d'universalité

1.4 Différentes approches aux transitions de phase

- résolutions exactes en petite dimension : facile à 1d mais pas de transition (cf TD1), très riche en 2d, cf partie du cours faite par Jérémie
- preuves rigoureuses d'existence de transitions de phase pour $d \geq 2$, même si pas de résolution explicite pour $d > 2$. On le verra en partie pour le modèle d'Ising au chapitre 3.5.

- champ moyen (cf TD1), très approché, mais donne qualitativement la phénoménologie des transitions. Correspond à la limite de grande dimension, ou d'interactions à longue portée (on reparlera de ces limites). Pour la supraconductivité, théorie BCS champ moyen quantitativement pertinente.
- groupe de renormalisation, très puissant, permet de calculer les exposants critiques de manière approchée mais systématique, on n'en parlera pas

2 Limite thermodynamique

objectif de cette partie : montrer l'existence de la limite thermodynamique pour l'énergie libre, i.e.

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{-1}{\beta |\Lambda|} \ln Z_\Lambda \quad (1)$$

pour une large classe de modèles définis sur \mathbb{Z}^d , il faudra préciser le sens de la limite, et la régularisation de Z dans un volume Λ fini

on ne peut pas travailler directement sur le système infini, si on essaie d'écrire l'Hamiltonien d'Ising

$$H(\underline{\sigma}) = -J \sum_{\langle xy \rangle} \sigma_x \sigma_y - h \sum_x \sigma_x \quad (2)$$

sommes infinies pas contrôlées

Dans l'essentiel du cours on travaille dans l'ensemble canonique, plus facile techniquement, on rediscutera le microcanonique à la fin dans la partie 5.

2.1 Définitions

Notations élémentaires :

- $x \in \mathbb{Z}^d$ les points du réseau, où vivent les spins :
- $\sigma_x \in \chi$, avec χ fini, exemple d'Ising $\chi = \{-1, +1\}$
- $\underline{\sigma} = \{\sigma_x, x \in \mathbb{Z}^d\}$ configuration globale, $\Sigma = \chi^{\mathbb{Z}^d}$ l'ensemble des configurations
- pour $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $\underline{\sigma}_\Lambda = \{\sigma_x, x \in \Lambda\}$, configuration des spins à l'intérieur de Λ
- $\Lambda^c = \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$ le complément de Λ
- on note $X \subset_f \mathbb{Z}^d$ les parties finies X de \mathbb{Z}^d
- on note $|X|$ le cardinal de X , "volume" pour une partie finie
- $\text{dist}(x, y) = \sum_{\alpha \in [1, d]} |x_\alpha - y_\alpha|$ la distance (issue de la norme 1) entre deux points de \mathbb{Z}^d
- $\text{diam}(\Lambda) = \sup\{\text{dist}(x, y), (x, y) \in \Lambda^2\}$ le diamètre d'une partie de \mathbb{Z}^d
- pour $X \subset \mathbb{Z}^d$, \mathcal{C}_X est l'ensemble des fonctions ϕ de Σ vers \mathbb{R} qui ne dépendent que des spins dans X , i.e. $\phi(\underline{\sigma}) = \phi(\underline{\sigma}_X)$ (on utilisera les deux notations par commodité)
- pour $\phi \in \mathcal{C}_X$, $\|\phi\|_\infty = \sup_{\underline{\sigma}_X \in \chi^X} \phi(\underline{\sigma}_X)$, c'est bien une norme
- $\mathcal{C}_f = \bigcup_{\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d} \mathcal{C}_\Lambda$ les fonctions qui dépendent d'un nombre fini (arbitraire) de variables.
- T_a opérateur de translation de $a \in \mathbb{Z}^d$, i.e. $(T_a \underline{\sigma})_x = \sigma_{x-a}$ et pour $X \subset \mathbb{Z}^d$, $T_a X = \{x, x-a \in X\}$

Définition 1. Ensemble \mathcal{I} des interactions : $\Phi \in \mathcal{I}$ est une collection de ϕ_X (interaction élémentaire), où X parcourt les parties finies de \mathbb{Z}^d , avec ϕ_X une fonction réelle de $\underline{\sigma}$, qui ne dépend que de $\underline{\sigma}_X$, énergie due à l'interaction entre les variables dans X , formellement $\Phi = \{\phi_X\}_{X \subset_f \mathbb{Z}^d}$, avec $\phi_X \in \mathcal{C}_X \forall X$.

exemple Ising,

$$\phi_X(\underline{\sigma}) = \begin{cases} -h\sigma_x & \text{si } X = \{x\} \\ -J\sigma_x\sigma_y & \text{si } X = \{x, y\} \text{ avec } \text{dist}(x, y) = 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3)$$

Restriction dans toute la suite : on ne considèrera que des interactions invariantes par translation, $\phi_{T_a X}(\underline{\sigma}) = \phi_X(T_{-a} \underline{\sigma})$

\mathcal{I} a naturellement une structure d'espace vectoriel, $(\alpha \Phi)_X = \alpha \phi_X$, $(\Phi + \Psi)_X = \phi_X + \psi_X$.

Définition 2. Hamiltonien pour une interaction Φ dans un domaine fini $\Lambda \subset_{\text{f}} \mathbb{Z}^d$ avec conditions aux bords libres :

$$H_{\Lambda}^{\Phi}(\underline{\sigma}) = \sum_{X \subset \Lambda} \phi_X(\underline{\sigma}) \quad (4)$$

On notera que $H_{\Lambda}^{\Phi}(\underline{\sigma}) \in \mathcal{C}_{\Lambda}$, ne dépend en fait que de $\underline{\sigma}_{\Lambda}$.

On enlève complètement l'extérieur, exemple sur Ising.

Définitions des quantités thermodynamiques associées :

$$Z_{\Lambda}(\beta, \Phi) = \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} e^{-\beta H_{\Lambda}^{\Phi}(\underline{\sigma})}, \quad F_{\Lambda}(\beta, \Phi) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_{\Lambda}(\beta, \Phi), \quad f_{\Lambda}(\beta, \Phi) = -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln Z_{\Lambda}(\beta, \Phi) \quad (5)$$

Classes d'interactions :

H_{Λ}^{Φ} toujours fini pour Λ fini, mais pour prendre la limite $\Lambda \rightarrow \mathbb{Z}^d$ il faut imposer des restrictions à l'interaction.

Trois familles d'interaction :

- $\Phi \in \mathcal{I}^{(r)} \subset \mathcal{I}$, à portée r , ssi $\text{diam}(X) > r \Rightarrow \phi_X = 0$. Portée finie arbitraire $\mathcal{I}_f = \bigcup_{r \geq 0} \mathcal{I}^{(r)}$.
- $\|\Phi\|_p = \sum_{X \ni 0} \|\phi_X\|_{\infty}$, notons $\mathcal{I}_p = \{\Phi \in \mathcal{I}, \|\Phi\|_p < \infty\}$. Par invariance par translation le 0 dans la définition de la norme est arbitraire.
- $\|\Phi\|_g = \sum_{X \ni 0} \frac{\|\phi_X\|_{\infty}}{|X|}$, notons $\mathcal{I}_g = \{\Phi \in \mathcal{I}, \|\Phi\|_g < \infty\}$. Même remarque.

$\|\cdot\|_p$ et $\|\cdot\|_g$ sont des normes ($\|\Phi\| = 0 \Leftrightarrow \Phi = 0$, $\|\lambda\Phi\| = |\lambda|\|\Phi\|$, $\|\Phi + \Psi\| \leq \|\Phi\| + \|\Psi\|$), \mathcal{I}_p et \mathcal{I}_g sont des espaces de Banach (e.v.n. complet pour les normes associés, i.e. toute suite de Cauchy converge).

$\mathcal{I}_f \subset \mathcal{I}_p \subset \mathcal{I}_g$: si $\Phi \in \mathcal{I}_f$ les sommes dans la définition de $\|\Phi\|_p$ et $\|\Phi\|_g$ sont finies, et par ailleurs $\|\Phi\|_g \leq \|\Phi\|_p$, donc si $\|\Phi\|_p$ est finie alors $\|\Phi\|_g$ l'est aussi.

est pertinent de prendre des interactions à portée arbitraire pour des raisons à la fois techniques et physiques (exemple des interactions électrostatiques, gravité, mais Coulomb n'est pas dans \mathcal{I}_g : $|X| = 2$, $\|\phi_{0,x}\|_{\infty} = O(1/|x|)$, $\|\Phi\|_g \propto \int dr r^{d-1} \frac{1}{r}$ diverge pour $d \geq 2$). Non seulement la portée est arbitraire, mais le nombre de variables impliquées dans une interaction élémentaire ϕ_X est arbitraire.

2.2 Lemmes préparatoires

Lemme 1. Si $\Phi \in \mathcal{I}_g$ et $\Lambda \subset_{\text{f}} \mathbb{Z}^d$, alors $\|H_{\Lambda}^{\Phi}\|_{\infty} \leq |\Lambda| \|\Phi\|_g$.

Démonstration. Permet d'expliquer pourquoi $\|\cdot\|_g$ et \mathcal{I}_g sont "naturels", condition minimale pour avoir un Hamiltonien "extensif".

$$H_{\Lambda}^{\Phi}(\underline{\sigma}) = \sum_{X \subset \Lambda} \phi_X(\underline{\sigma}) \quad \Rightarrow \quad \|H_{\Lambda}^{\Phi}\|_{\infty} \leq \sum_{X \subset \Lambda} \|\phi_X\|_{\infty} \quad (6)$$

(inégalité triangulaire sur la valeur absolue, puis max de la somme \leq somme des max). Or $\sum_{x \in X} \frac{1}{|X|} = 1$, on peut donc écrire

$$\sum_{X \subset \Lambda} \|\phi_X\|_{\infty} = \sum_{X \subset \Lambda} \sum_{x \in X} \frac{\|\phi_X\|_{\infty}}{|X|} \leq \sum_{x \in \Lambda} \sum_{X \ni x} \frac{\|\phi_X\|_{\infty}}{|X|} = |\Lambda| \|\Phi\|_g \quad (7)$$

où l'inégalité vient des termes de bord, on ne comptait que les X entièrement inclus dans Λ , ensuite on compte ceux qui ont une intersection non-nulle avec Λ . Invariance par translation pour retrouver $\|\cdot\|_g$. \square

Lemme 2. Pour $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$, α, g_1, g_2 des fonctions de $\underline{\sigma}_\Lambda$ avec $\alpha \geq 0$,

$$\left| \ln \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{g_1(\underline{\sigma}_\Lambda)} - \ln \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{g_2(\underline{\sigma}_\Lambda)} \right| \leq \|g_1 - g_2\|_\infty . \quad (8)$$

Démonstration. Notons que $\|e^{g_1 - g_2}\|_\infty \leq e^{\|g_1 - g_2\|_\infty}$.

$$\ln \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{g_1(\underline{\sigma}_\Lambda)} - \ln \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{g_2(\underline{\sigma}_\Lambda)} = \ln \left(\frac{\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{g_1(\underline{\sigma}_\Lambda) - g_2(\underline{\sigma}_\Lambda)} e^{g_2(\underline{\sigma}_\Lambda)}}{\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{g_2(\underline{\sigma}_\Lambda)}} \right) \quad (9)$$

$$\leq \ln \left(\frac{\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{\|g_1 - g_2\|_\infty} e^{g_2(\underline{\sigma}_\Lambda)}}{\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \alpha(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{g_2(\underline{\sigma}_\Lambda)}} \right) \quad (10)$$

Puis recommencer en intervertissant g_1 et g_2 . □

Lemme 3. Pour $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ et Φ, Ψ deux interactions de \mathcal{I}_g ,

$$|f_\Lambda(\beta, \Phi) - f_\Lambda(\beta, \Psi)| \leq \|\Phi - \Psi\|_g . \quad (11)$$

Démonstration. En appliquant le lemme 2 avec $\alpha = 1$, $g_1 = -\beta H_\Lambda^\Phi$ et $g_2 = -\beta H_\Lambda^\Psi$,

$$|\ln Z_\Lambda(\beta, \Phi) - \ln Z_\Lambda(\beta, \Psi)| \leq \beta \|H_\Lambda^\Phi - H_\Lambda^\Psi\|_\infty = \beta \|H_\Lambda^{\Phi - \Psi}\|_\infty \leq \beta |\Lambda| \|\Phi - \Psi\|_g , \quad (12)$$

où la dernière égalité vient du lemme 1. Il suffit de diviser par $\beta |\Lambda|$ pour conclure. □

Lemme 4. En l'absence d'interaction l'énergie libre est seulement l'entropie divisé par $-\beta$, i.e. $f_\Lambda(\beta, 0) = -\frac{\ln(|\chi|)}{\beta}$.

Démonstration.

$$Z_\Lambda(\beta, 0) = \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} 1 = |\chi|^{|\Lambda|} , \quad (13)$$

puis prendre le logarithme et diviser par $-\beta |\Lambda|$. □

Lemme suivant sera utilisé seulement plus tard, mais la structure de la preuve va revenir très bientôt. Utilisé aussi par Jérémie pour les SAW.

Lemme 5 (Lemme de Fekete). Soit u_n une suite sous-additive, i.e. $u_{n+m} \leq u_n + u_m$. Alors $\frac{u_n}{n}$ admet une limite quand $n \rightarrow \infty$ (éventuellement égale à $-\infty$), et

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{u_n}{n} = \inf_{n \geq 1} \frac{u_n}{n} . \quad (14)$$

Résultat similaire pour suite sur-additive.

Démonstration. Notons d'abord qu'en itérant l'inégalité avec $m = 1$, on obtient $u_n \leq nu_1$, soit $\frac{u_n}{n} \leq u_1$, donc $\frac{u_n}{n}$ ne peut partir en $+\infty$. Plus généralement, $\frac{u_{np}}{np} \leq \frac{u_p}{p}$, donc le long de certaines sous-suites la suite $\frac{u_n}{n}$ est en dessous de toutes ses cordes.

Début de la preuve proprement dite. Fixons $p \geq 1$, et faisons la division euclidienne $n = ap + b$ avec $a = \lfloor \frac{n}{p} \rfloor$ et $b \in [0, p - 1]$. Par sous-additivité, $u_n \leq a u_p + u_b$, soit

$$\frac{u_n}{n} \leq \frac{1}{n} \left\lfloor \frac{n}{p} \right\rfloor u_p + \frac{u_b}{n} . \quad (15)$$

En prenant $n \rightarrow \infty$,

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{u_n}{n} \leq \frac{u_p}{p}, \quad (16)$$

car $\frac{1}{n} \lfloor \frac{n}{p} \rfloor \rightarrow \frac{1}{p}$, et $|u_b| \leq \max_{i \in [0, p-1]} |u_i| < \infty$. Comme c'est vrai quelque soit p ,

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{u_n}{n} \leq \inf_{n \geq 1} \frac{u_n}{n}, \quad (17)$$

or en général

$$\inf_{n \geq 1} a_n \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} a_n \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} a_n \leq \sup_{n \geq 1} a_n, \quad (18)$$

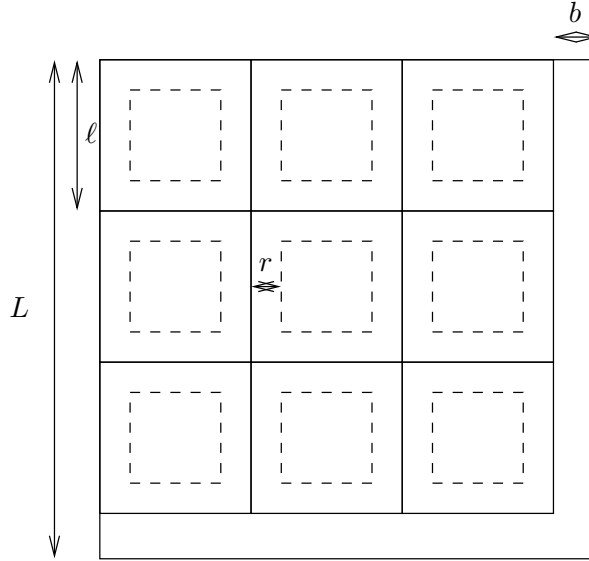
donc lim sup et lim inf coincide, i.e. la suite converge. \square

2.3 Energie libre pour les interactions à portée finie

Théorème 1. *Considérons une interaction à portée finie $\Phi \in \mathcal{I}_f$, et notons C_L un cube de côté L de \mathbb{Z}^d , e.g. $C_L = [0, L-1]^d$. Alors $f_{C_L}(\beta, \Phi)$ admet une limite quand $L \rightarrow \infty$, notée $f(\beta, \Phi)$, qui est finie.*

Démonstration. On va utiliser le fait que F_Λ est “presque-additive” par rapport à Λ . Dans la preuve de l'existence de la limite de Fekete l'inégalité n'est pas le point crucial.

Notons r la portée des interactions de Φ , choisissons $\ell > 2r$, et posons $L = a\ell + b$, où $a = \lfloor \frac{L}{\ell} \rfloor$, $b \in [0, \ell - 1]$. On décompose C_L en a^d cubes de côté ℓ , notés $\{C^{(\alpha)}, \alpha \in [1, a^d]\}$, et un reste $C^{(0)}$.



On peut écrire $H_{C_L}^\Phi = \sum_{\alpha=1}^{a^d} H_{C^{(\alpha)}}^\Phi + R$. Le reste R comprend les interactions incluses dans $C^{(0)}$, et celles à cheval entre deux $C^{(\alpha)}$ (y compris $\alpha = 0$). On veut se débarrasser de ce terme-là, on peut donc borner grossièrement avec

$$\|R\|_\infty \leq [a^d(\ell^d - (\ell - 2r)^d) + (L^d - (a\ell)^d)] \|\Phi\|_g. \quad (19)$$

En effet R est de la forme $\sum_{X \in \mathcal{R}} \phi_X$, et la preuve du lemme 1 montre que l'on a

$$\left\| \sum_{X \in \mathcal{R}} \phi_X \right\|_\infty \leq |\mathcal{R}_s| \|\Phi\|_g, \quad (20)$$

où \mathcal{R}_s désigne les sites qui apparaissent au moins une fois dans l'ensemble \mathcal{R} de parties de \mathbb{Z}^d . Ici les interactions de R ne peuvent faire intervenir que des sites dans $C^{(0)}$ (avec $|C^{(0)}| = (L^d - (a\ell)^d)$) et des sites à distance plus petite que r du bord des petits cubes, il y en a au plus $a^d(\ell^d - (\ell - 2r)^d)$.

En utilisant le lemme 2,

$$\left| \ln \sum_{\underline{\sigma}_{C_L}} e^{-\beta H_{C_L}^{\Phi}(\underline{\sigma}_{C_L})} - \ln \sum_{\underline{\sigma}_{C_L}} e^{-\beta \sum_{\alpha=1}^{a^d} H_{C^{(\alpha)}}^{\Phi}(\underline{\sigma}_{C_L})} \right| \leq \beta \|R\|_{\infty} \leq [a^d(\ell^d - (\ell - 2r)^d) + (L^d - (a\ell)^d)] \beta \|\Phi\|_{\mathfrak{g}}. \quad (21)$$

Les différents cubes de longueur ℓ n'interagissent pas entre eux, et contribuent tous de la même façon à cause de l'invariance par translation, i.e.

$$\sum_{\underline{\sigma}_{C_L}} e^{-\beta \sum_{\alpha=1}^{a^d} H_{C^{(\alpha)}}^{\Phi}(\underline{\sigma}_{C_L})} = \prod_{\alpha=1}^{a^d} \left(\sum_{\underline{\sigma}_{C^{(\alpha)}}} e^{-\beta H_{C^{(\alpha)}}^{\Phi}(\underline{\sigma}_{C^{(\alpha)}})} \right) \sum_{\underline{\sigma}_{C^{(0)}}} 1 = (Z_{C_{\ell}}(\beta, \Phi))^{a^d} |\chi|^{|C^{(0)}|}, \quad (22)$$

où on a la contribution purement entropique des spins de $C^{(0)}$. Le membre de gauche de (21) est donc

$$\left| (-\beta) F_{C_L}(\beta, \Phi) - a^d (-\beta) F_{C_{\ell}}(\beta, \Phi) - (L^d - (a\ell)^d) \ln(|\chi|) \right|. \quad (23)$$

On peut réécrire cette expression :

$$\beta \left| L^d f_{C_L}(\beta, \Phi) - a^d \ell^d f_{C_{\ell}}(\beta, \Phi) + (L^d - (a\ell)^d) \frac{\ln(|\chi|)}{\beta} \right|. \quad (24)$$

En divisant par βL^d , et en n'utilisant qu'une partie de l'inégalité sur la valeur absolue,

$$f_{C_L}(\beta, \Phi) \leq \left(\frac{a\ell}{L} \right)^d f_{C_{\ell}}(\beta, \Phi) + \left[\left(\frac{a\ell}{L} \right)^d \left(1 - \left(1 - \frac{2r}{\ell} \right)^d \right) + \left(1 - \left(\frac{a\ell}{L} \right)^d \right) \right] \|\Phi\|_{\mathfrak{g}} \quad (25)$$

$$- \left(1 - \left(\frac{a\ell}{L} \right)^d \right) \frac{\ln(|\chi|)}{\beta}. \quad (26)$$

En prenant $L \rightarrow \infty$, comme $a\ell/L \rightarrow 1$,

$$\limsup_{L \rightarrow \infty} f_{C_L}(\beta, \Phi) \leq f_{C_{\ell}}(\beta, \Phi) + \left(1 - \left(1 - \frac{2r}{\ell} \right)^d \right) \|\Phi\|_{\mathfrak{g}}. \quad (27)$$

On s'est débarrassé de la partie du reste qui venait de $C^{(0)}$ en prenant $L \rightarrow \infty$, en effet son volume est négligeable devant celui des cubes dans cette limite. Maintenant on se débarrasse des effets de bord sur chaque cube en prenant $\ell \rightarrow \infty$, comme la portée est finie ce sont des effets de surface négligeable devant le volume,

$$\limsup_{L \rightarrow \infty} f_{C_L}(\beta, \Phi) \leq \liminf_{\ell \rightarrow \infty} f_{C_{\ell}}(\beta, \Phi), \quad (28)$$

donc lim sup et lim inf coïncident et la limite existe.

Montrons que la limite est finie. D'après les lemmes 3 et 4 :

$$|f_{\Lambda}(\beta, \Phi) - f_{\Lambda}(\beta, 0)| \leq \|\Phi\|_{\mathfrak{g}} \Rightarrow |f_{\Lambda}(\beta, \Phi)| \leq \|\Phi\|_{\mathfrak{g}} + \frac{\ln(|\chi|)}{\beta}, \quad (29)$$

est vrai pour tout Λ fini, donc aussi pour la limite.

Pour montrer que la limite est finie on peut aussi noter que (27) implique que le limsup est $< +\infty$, en bornant de manière similaire le lim inf $> -\infty$ on aurait aussi la preuve de la finitude de la limite. \square

2.4 Généralisations

Robustesse du résultat obtenue précédemment :

- pour la famille $\mathcal{I}_{\mathfrak{g}}$ plus générale d'interactions
- avec des conditions aux bords arbitraire, et un sens de $\Lambda \rightarrow \infty$ plus général que juste en prenant des cubes.

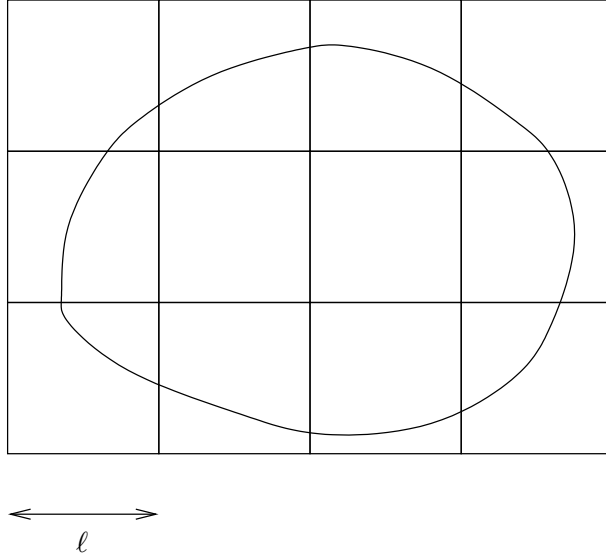
2.4.1 Limite au sens de van Hove

Pour l'instant $\Lambda \rightarrow \infty$ a été pris le long d'une suite particulière, les cubes de taille L avec $L \rightarrow \infty$. Les résultats de convergence restent vraies pour des suites plus générales. Mais il faut quand même imposer des conditions, pour que les effets de surface soient négligeables devant les effets de volume.

Définition 3. Une suite de parties finies Λ_n de \mathbb{Z}^d va à l'infini au sens de Van Hove si pour tout entier $\ell > 0$ et pour tout n on peut trouver un pavage de \mathbb{Z}^d par des cubes de côté ℓ avec $N_\ell^+(\Lambda_n)$ cubes qui ont une intersection non vide avec Λ_n , $N_\ell^-(\Lambda_n)$ cubes inclus dans Λ_n , et telle que

$$\forall \ell, \quad N_\ell^-(\Lambda_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} +\infty, \quad \frac{N_\ell^+(\Lambda_n)}{N_\ell^-(\Lambda_n)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 1. \quad (30)$$

Exemple :



$$N_\ell^-(\Lambda) = 2, \quad N_\ell^+(\Lambda) = 12$$

Si Λ_n est un rectangle de côtés L_n^1, \dots, L_n^d , la condition pour que la suite soit de van Hove est que tous les L_n^i tendent vers l'infini quand n va à l'infini, mais ils peuvent le faire avec des scalings différents. En effet $N_\ell^-(\Lambda_n) = \prod_{i=1}^d \lfloor \frac{L_n^i}{\ell} \rfloor$ et $N_\ell^+(\Lambda_n) = \prod_{i=1}^d \lceil \frac{L_n^i}{\ell} \rceil$.

Théorème 2. Considérons une interaction à portée finie $\Phi \in \mathcal{I}_f$, et une suite Λ_n qui va à l'infini au sens de Van Hove. Alors $f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) \rightarrow f(\beta, \Phi)$, la même limite que définie par les cubes.

Démonstration. On suit la même stratégie que pour $\Lambda = C_L$: on fixe $\ell > 2r$, on écrit $H_{\Lambda_n}^\Phi = \sum_{\alpha=1}^{N_\ell^-(\Lambda_n)} H_{C^{(\alpha)}}^\Phi + R$, où la première somme est sur les cubes de taille ℓ inclus dans Λ_n . On peut écrire $\Lambda_n = C^{(0)} \cup \cup_{\alpha=1}^{N_\ell^-(\Lambda_n)} C^{(\alpha)}$, où $C^{(0)}$ est la partie de Λ_n hors des cubes complètement inclus dans Λ_n .

$$\|R\|_\infty \leq [N_\ell^-(\Lambda_n)(\ell^d - (\ell - 2r)^d) + |C^{(0)}|] \|\Phi\|_g. \quad (31)$$

Avec le lemme et les mêmes remarques,

$$|\ln Z_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) - N_\ell^-(\Lambda_n) \ln Z_{C_\ell}(\beta, \Phi) - |C^{(0)}| \ln(|\chi|)| \leq \beta \|R\|_\infty \leq \beta [N_\ell^-(\Lambda_n)(\ell^d - (\ell - 2r)^d) + |C^{(0)}|] \|\Phi\|_g. \quad (32)$$

En factorisant $-\beta$ à l'intérieur,

$$\left| F_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) - N_\ell^-(\Lambda_n) F_{C_\ell}(\beta, \Phi) + |C^{(0)}| \frac{\ln(|\chi|)}{\beta} \right| \leq [N_\ell^-(\Lambda_n)(\ell^d - (\ell - 2r)^d) + |C^{(0)}|] \|\Phi\|_g. \quad (33)$$

En divisant par $|\Lambda_n|$,

$$f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) \leq \frac{N_\ell^-(\Lambda_n)\ell^d}{|\Lambda_n|} f_{C_\ell}(\beta, \Phi) + \left[\frac{N_\ell^-(\Lambda_n)\ell^d}{|\Lambda_n|} \left(1 - \left(1 - \frac{2r}{\ell} \right)^d \right) + \frac{|C^{(0)}|}{|\Lambda_n|} \right] \|\Phi\|_g \quad (34)$$

$$- \frac{|C^{(0)}| \ln(|\chi|)}{|\Lambda_n| \beta}. \quad (35)$$

Comme $|C^{(0)}| \leq \ell^d(N_\ell^+(\Lambda_n) - N_\ell^-(\Lambda_n))$ et $|\Lambda_n| \geq \ell^d N_\ell^-(\Lambda_n)$, on a

$$\frac{|C^{(0)}|}{|\Lambda_n|} \leq \frac{N_\ell^+(\Lambda_n)}{N_\ell^-(\Lambda_n)} - 1 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0 \quad (36)$$

par définition de la limite de Van Hove les deux dernier termes disparaissent. De plus,

$$N_\ell^-(\Lambda_n)\ell^d \leq |\Lambda_n| \leq N_\ell^+(\Lambda_n)\ell^d, \quad 1 \leq \frac{|\Lambda_n|}{N_\ell^-(\Lambda_n)\ell^d} \leq \frac{N_\ell^+(\Lambda_n)}{N_\ell^-(\Lambda_n)}, \quad (37)$$

le dernier terme tend vers 1 par définition de la limite de Van Hove, donc $\frac{N_\ell^-(\Lambda_n)\ell^d}{|\Lambda_n|} \rightarrow 1$ on a donc

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) \leq f_{C_\ell}(\beta, \Phi) + \left(1 - \left(1 - \frac{2r}{\ell} \right)^d \right) \|\Phi\|_p. \quad (38)$$

C'est vrai pour tout ℓ , on peut prendre la limite $\ell \rightarrow \infty$, on a déjà montré qu'elle valait $f(\beta, \Phi)$. On peut borner inférieurement le lim inf de la même façon, donc la limite au sens de Van Hove existe et est égale à celle obtenue par les cubes. \square

2.4.2 Existence et propriétés de la limite pour des interactions plus générales

pour les autres interactions, en utilisant la densité des interactions à portée finie à l'intérieur de \mathcal{I}_g

Théorème 3. *Considérons une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_g$, et notons Λ_n une suite qui va à l'infini au sens de Van Hove. Alors $f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi)$ admet une limite, notée $f(\beta, \Phi)$, quand $n \rightarrow \infty$. Cette limite est finie, et $f(\beta, \Phi)$ vérifie par ailleurs*

- (a) $|f(\beta, \Phi) - f(\beta, \Psi)| \leq \|\Phi - \Psi\|_g$ (Lipschitz)
- (b) concavité dans les interactions, i.e. $f(\beta, \alpha\Phi + (1 - \alpha)\Psi) \geq \alpha f(\beta, \Phi) + (1 - \alpha)f(\beta, \Psi)$ pour tout $\alpha \in [0, 1]$.

Démonstration. On va s'appuyer sur le résultat obtenu pour les interactions à portée finie, qui sont en fait denses dans \mathcal{I}_g .

De $\Phi \in \mathcal{I}_g$ on définit une version régularisée, en coupant les interactions à trop longue portée, $\Phi^{(r)} \in \mathcal{I}^{(r)}$, avec

$$\phi_X^{(r)} = \begin{cases} \phi_X & \text{si } \text{diam}(X) \leq r \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (39)$$

On a $\|\Phi - \Phi^{(r)}\|_g \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$: écrivons $u_n = \sum_{\substack{X \ni 0 \\ \text{diam}(X)=n}} \frac{\|\phi_X\|_\infty}{|X|}$, les u_n sont positifs,

$$\|\Phi\|_g = \sum_{n=1}^{\infty} u_n < +\infty \text{ puisque } \Phi \in \mathcal{I}_g, \|\Phi - \Phi^{(r)}\|_g = \sum_{n=r+1}^{\infty} u_n = \|\Phi\|_g - \sum_{n=1}^r u_n, \quad (40)$$

donc la dernière quantité va à 0 quand $r \rightarrow \infty$ par la définition des séries pour des suites positives.

Comme $\|\Phi - \Phi^{(r_0)}\|_g \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$, pour tout $\epsilon > 0$ on peut trouver r_0 tel que $\|\Phi - \Phi^{(r_0)}\|_g \leq \frac{\epsilon}{2}$. Alors en utilisant le lemme 3,

$$f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) \leq f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi^{(r_0)}) + \frac{\epsilon}{2} \Rightarrow \limsup_{n \rightarrow \infty} f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) \leq f(\beta, \Phi^{(r_0)}) + \frac{\epsilon}{2} \quad (41)$$

en prenant $n \rightarrow \infty$ et en utilisant la convergence précédemment démontrée de $f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi^{(r_0)})$. De la même façon on obtient

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) \geq f(\beta, \Phi^{(r_0)}) - \frac{\epsilon}{2}, \quad (42)$$

soit en combinant les deux

$$|\liminf_{n \rightarrow \infty} f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi) - \limsup_{n \rightarrow \infty} f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi)| \leq \epsilon. \quad (43)$$

Comme c'est vrai pour tout $\epsilon > 0$ les lim sup et lim inf sont égaux, et donc la limite existe.

La preuve que la limite est finie est exactement la même que dans le cas des interactions à portée finie.

La propriété (a) découle du lemme 3, puisque la limite existe l'inégalité valable pour tout Λ fini l'est aussi à la limite.

Pour prouver la concavité, il suffit de montrer l'inégalité à volume fini

$$f_{\Lambda}(\beta, \alpha\Phi + (1 - \alpha)\Psi) \geq \alpha f_{\Lambda}(\beta, \Phi) + (1 - \alpha)f_{\Lambda}(\beta, \Psi) \quad \forall \alpha \in [0, 1], \quad (44)$$

la limite (simple) quand $\Lambda \rightarrow \infty$ vérifiera encore l'inégalité.

En volume fini la fonction $t \rightarrow f_{\Lambda}(\beta, \Phi + t\Psi)$ est analytique en t car somme d'un nombre fini d'exponentielles,

$$f_{\Lambda}(\beta, \Phi + t\Psi) = -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} e^{-\beta H_{\Lambda}^{\Phi+t\Psi}(\underline{\sigma})} \right) = -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} e^{-\beta H_{\Lambda}^{\Phi}(\underline{\sigma}) - \beta t H_{\Lambda}^{\Psi}(\underline{\sigma})} \right), \quad (45)$$

on peut notamment calculer explicitement sa dérivée seconde

$$\frac{d^2}{dt^2} f_{\Lambda}(\beta, \Phi + t\Psi) = -\frac{\beta}{|\Lambda|} \langle (H_{\Lambda}^{\Psi} - \langle H_{\Lambda}^{\Psi} \rangle)^2 \rangle \leq 0, \quad \text{où } \langle \cdot \rangle = \frac{\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} \cdot e^{-\beta H_{\Lambda}^{\Phi+t\Psi}(\underline{\sigma})}}{\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} e^{-\beta H_{\Lambda}^{\Phi+t\Psi}(\underline{\sigma})}}. \quad (46)$$

Cela implique la concavité par des arguments standards :

$$\frac{d^2}{d\alpha^2} f_{\Lambda}(\beta, \alpha\Phi + (1 - \alpha)\Psi) = \frac{d^2}{d\alpha^2} f_{\Lambda}(\beta, \Psi + \alpha(\Phi - \Psi)) \leq 0, \quad (47)$$

or si $h(\alpha)$ est \mathcal{C}^2 sur $[0, 1]$ avec $h''(\alpha) \leq 0$ alors $h(\alpha) \geq \alpha h(1) + (1 - \alpha)h(0)$. En effet par le théorème de Rolle $h(1) - h(0) = h'(\alpha_0)$ pour un $\alpha_0 \in [0, 1]$. Pour $\alpha \in (0, \alpha_0]$ on peut écrire $\frac{h(\alpha) - h(0)}{\alpha} = h'(\alpha'_0)$ avec $\alpha'_0 \in [0, \alpha_0]$. Comme $h'' < 0$ $h'(\alpha'_0) \geq h'(\alpha_0)$, ce qui donne l'inégalité recherchée. Pour $\alpha \in [\alpha_0, 1]$ on choisit $\alpha'_0 \in [\alpha_0, 1]$ tel que $\frac{h(1) - h(\alpha)}{1 - \alpha} = h'(\alpha_0)$.

Remarque : on peut aussi obtenir la concavité en utilisant l'inégalité de Hölder, qu'on peut écrire

$$\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} e^{g_1(\underline{\sigma}) + g_2(\underline{\sigma})} \leq \left(\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} e^{p g_1(\underline{\sigma})} \right)^{\frac{1}{p}} \left(\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} e^{q g_2(\underline{\sigma})} \right)^{\frac{1}{q}}, \quad (48)$$

avec $g_1, g_2 \in \mathcal{C}_{\Lambda}$ et $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$. En utilisant $g_1 = -\alpha\beta H_{\Lambda}^{\Phi}$, $g_2 = -(1 - \alpha)\beta H_{\Lambda}^{\Psi}$, $p = \frac{1}{\alpha}$ et $q = \frac{1}{1 - \alpha}$, l'inégalité devient

$$Z_{\Lambda}(\beta, \alpha\Phi + (1 - \alpha)\Psi) \leq (Z_{\Lambda}(\beta, \Phi))^{\alpha} (Z_{\Lambda}(\beta, \Psi))^{1 - \alpha}, \quad (49)$$

d'où l'inégalité recherchée en prenant le logarithme et en divisant par $-\beta|\Lambda|$. \square

2.4.3 Conditions aux bords

Dans la définition du Hamiltonien avec conditions aux bords libres H_Λ^Φ on a complètement éliminé l'extérieur Λ^c . On peut aussi considérer que le système de volume fini Λ baigne dans un environnement fixé avec lequel il interagit, et définir un Hamiltonien avec conditions aux bords fixées.

On définit la concaténation de deux configurations, $(\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})$, par

$$(\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})_x = \begin{cases} \sigma_x & \text{si } x \in \Lambda \\ \tau_x & \text{si } x \in \Lambda^c \end{cases}, \quad (50)$$

i.e. on prend la configuration $\underline{\sigma}$ à l'intérieur de Λ et $\underline{\tau}$ à l'extérieur.

Définition 4. *Hamiltonien pour une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_p$ dans un domaine fini $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ avec conditions aux bords $\underline{\tau}$:*

$$H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma}) = \sum_{X, X \cap \Lambda \neq \emptyset} \phi_X((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})) \quad (51)$$

vu comme fonction de $\underline{\sigma}$ c'est dans \mathcal{C}_Λ , ne dépend que de $\underline{\sigma}_\Lambda$, vu comme fonction de $\underline{\tau}$ c'est dans \mathcal{C}_{Λ^c} .

Exemple pour Ising,

$$H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma}) = H_\Lambda^\Phi(\underline{\sigma}) - J \sum_{\langle x, y \rangle, x \in \Lambda, y \notin \Lambda} \sigma_x \tau_y, \quad (52)$$

on rajoute donc un champ magnétique $J\tau_y$ sur les sites x à la frontière intérieure de Λ , voisins d'un site y à l'extérieur de Λ .

On s'est limitée aux interactions dans \mathcal{I}_p , le petit espace des interactions, car même quand Λ est fini la somme dans (51) est infinie; $\Phi \in \mathcal{I}_p$ est une condition suffisante pour la faire converger, uniformément, avec

$$\|H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}\|_\infty \leq \sum_{X, X \cap \Lambda \neq \emptyset} \|\phi_X\|_\infty \leq \sum_{x \in \Lambda} \sum_{X \ni x} \|\phi_X\|_\infty = |\Lambda| \|\Phi\|_p. \quad (53)$$

Définitions des quantités thermodynamiques associées :

$$Z_\Lambda^\tau(\beta, \Phi) = \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma})}, \quad F_\Lambda^\tau(\beta, \Phi) = -\frac{1}{\beta} \ln Z_\Lambda^\tau(\beta, \Phi), \quad f_\Lambda^\tau(\beta, \Phi) = -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln Z_\Lambda^\tau(\beta, \Phi) \quad (54)$$

Comme c'est un effet de surface on s'attend à ce que ça continue à converger, et vers la même limite que dans le cas des conditions aux limites libre. En effet on a le théorème suivant :

Théorème 4. *Considérons une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_p$, Λ_n une suite qui va à l'infini au sens de Van Hove, et $\underline{\tau}_n$ une suite arbitraire de conditions aux bords. Alors $f_{\Lambda_n}^{\tau_n}(\beta, \Phi)$ admet $f(\beta, \Phi)$ comme limite quand $n \rightarrow \infty$.*

Démonstration. Considérons pour commencer le cas où $\Phi \in \mathcal{I}^{(r)}$, interaction à portée maximale r , et où Λ_n est une suite de cubes de côté L_n . On a, pour $L_n > 2r$

$$\|H_{\Lambda_n}^{\Phi, \underline{\tau}_n} - H_{\Lambda_n}^\Phi\|_\infty \leq [L_n^d - (L_n - 2r)^d] \|\Phi\|_p, \quad (55)$$

car les interactions de bord non comptées dans $H_{\Lambda_n}^\Phi$ font intervenir les sites de Λ_n à distance au plus r du bord. Donc

$$|f_{\Lambda_n}^{\tau_n}(\beta, \Phi) - f_{\Lambda_n}(\beta, \Phi)| \leq \left[1 - \left(1 - \frac{L_n}{r}\right)^d\right] \|\Phi\|_p. \quad (56)$$

Comme le membre de droite va à 0 et que dans le membre de gauche une des deux suites converge vers $f(\beta, \Phi)$, l'autre aussi.

Si Λ_n est une suite de Van Hove générique le même type de raisonnement s'applique, le bord à distance r de Λ_n est toujours négligeable devant Λ_n quand $n \rightarrow \infty$.

Finalement, si $\Phi \in \mathcal{I}_p$, on raisonne de nouveau par densité, en utilisant les troncations $\Phi^{(r)}$ définies en (39).

□

Conditions aux limites périodiques

Si Λ est un rectangle de côtés L_1, \dots, L_d , on peut définir à partir de $\underline{\sigma}_\Lambda$ une configuration $\underline{\tau} = \text{per}_\Lambda(\underline{\sigma})$ par

$$\tau_{x_1, \dots, x_d} = \sigma_{x_1 + n_1 L_1, \dots, x_d + n_d L_d} , \quad (57)$$

où les $(n_1, \dots, n_d) \in \mathbb{Z}^d$ sont choisis de telle façon que $(x_1 + n_1 L_1, \dots, x_d + n_d L_d) \in \Lambda$. On peut donc construire un Hamiltonien avec conditions aux limites périodiques selon

$$H_\Lambda^{\Phi, \text{per}}(\underline{\sigma}) = H_\Lambda^{\Phi, \text{per}_\Lambda(\underline{\sigma})}(\underline{\sigma}) , \quad (58)$$

et les grandeurs thermodynamiques associées. Le résultat de convergence précédent s'applique à ce cas particulier de conditions aux limites.

3 Mesures de Gibbs

Dans l'introduction on avait présenté les deux aspects de la mécanique statistique, i.e. les propriétés thermodynamiques (énergie libre) et les lois de probabilité dont on voulait décrire rigoureusement le passage à la limite thermodynamique. On attaque ici le deuxième aspect.

3.1 Mesure de Gibbs-Boltzmann en volume fini

Dans cette section on se fixe $\Delta \subset_f \mathbb{Z}^d$ une fois pour toute, et on note $\underline{\sigma}$ au lieu de $\underline{\sigma}_\Delta$ une configuration, il y en a donc un nombre fini. On peut donc définir une probabilité η de manière élémentaire en se donnant les nombres $\eta(\underline{\sigma})$, probabilité pour chacune des configurations (pour simplifier on supposera $\eta(\underline{\sigma}) > 0$ pour toutes les configurations).

La loi marginale de η pour un sous-ensemble de variables dans $\Lambda \subset \Delta$ est définie naturellement par

$$\eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda) = \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}} \eta((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c})) , \quad (59)$$

où Λ^c est ici $\Delta \setminus \Lambda$.

Introduisons aussi la loi conditionnelle

$$\eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda | \underline{\sigma}_{\Lambda^c}) = \frac{\eta((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c}))}{\eta_{\Lambda^c}(\underline{\sigma}_{\Lambda^c})} , \quad (60)$$

qui est bien normalisée par rapport à son premier argument,

$$\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda | \underline{\sigma}_{\Lambda^c}) = \frac{\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c}))}{\eta_{\Lambda^c}(\underline{\sigma}_{\Lambda^c})} = 1 , \quad (61)$$

par définition de la loi marginale η_{Λ^c} . On peut utiliser cette loi conditionnelle pour décomposer les probabilités sous la forme

$$\eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda) = \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}} \eta_{\Lambda^c}(\underline{\sigma}_{\Lambda^c}) \eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda | \underline{\sigma}_{\Lambda^c}) , \quad (62)$$

autrement dit tirer une configuration dans un sous-volume Λ est équivalent à tirer une condition aux bords $\underline{\sigma}_{\Lambda^c}$ à l'extérieur, puis tirer l'intérieur de Λ conditionné à son extérieur. On peut aussi écrire :

$$\eta(\underline{\sigma}) = \sum_{\underline{\tau}} \eta(\underline{\tau}) \sum_{\underline{\tau}'_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\tau}'_\Lambda | \underline{\tau}_{\Lambda^c}) \mathbb{I}(\underline{\sigma} = (\underline{\tau}'_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})) , \quad (63)$$

qui s'interprète de la façon suivante : pour tirer une configuration $\underline{\sigma}$ du système on peut tirer une autre configuration $\underline{\tau}$, garder une partie $\underline{\tau}_{\Lambda^c}$ de cette configuration et l'utiliser comme condition aux bords pour tirer $\underline{\tau}'_\Lambda$ à l'intérieur, et prendre pour $\underline{\sigma}$ la concaténation $(\underline{\tau}'_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})$. C'est bien sûr une tautologie ici, mais on va suivre cette intuition pour la généralisation en volume infini.

La discussion ci-dessus était valable pour n'importe quelle loi de probabilité η . Considérons le cas particulier

$$\eta(\underline{\sigma}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\underline{\sigma})} , \quad H(\underline{\sigma}) = \sum_{X \subset \Delta} \phi_X(\underline{\sigma}) , \quad (64)$$

i.e. la mesure de Gibbs-Boltzmann associée à l'Hamiltonien avec conditions aux bords libres dans Δ . En général le calcul de la fonction de partition Z est difficile (il nécessite la sommation sur un nombre de configurations exponentiellement grand dans le volume $|\Delta|$), et donc même si on connaît $H(\underline{\sigma})$ pour toutes les configurations on ne sait pas calculer facilement $\eta(\underline{\sigma})$. Le même problème se pose pour les marginales, par exemple pour calculer la marginale sur une seule variable $\eta_{\{i\}}(\sigma_i)$ il faut quand même sommer sur toutes les configurations. Par contre les lois conditionnelles sont, de ce point de vue, beaucoup plus simples. En effet,

$$\eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda | \underline{\sigma}_{\Lambda^c}) = \frac{\eta((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c}))}{\eta_{\Lambda^c}(\underline{\sigma}_{\Lambda^c})} = \frac{e^{-\beta H((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c}))}}{\sum_{\underline{\sigma}'_\Lambda} e^{-\beta H((\underline{\sigma}'_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c}))}} , \quad (65)$$

en simplifiant les Z au numérateur et au dénominateur. Dans ce dernier la sommation n'est que sur les configurations de $\underline{\sigma}'_\Lambda$, donc si Λ est petit, quelque soit la taille du système total Δ le nombre de configurations sur lesquelles on doit sommer ne croît pas. Par ailleurs, on voit que si l'on ajoute à H n'importe quelle fonction g de $\underline{\sigma}_{\Lambda^c}$, indépendante de $\underline{\sigma}_\Lambda$, la loi conditionnelle ne change pas car les facteurs $e^{-\beta g}$ se simplifient au numérateur et au dénominateur. On peut donc remplacer $H((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c}))$ par sa contribution qui dépend explicitement de $\underline{\sigma}_\Lambda$, i.e.

$$\begin{aligned} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda | \underline{\sigma}_{\Lambda^c}) &= \frac{1}{Z_\Lambda(\underline{\sigma}_{\Lambda^c})} e^{-\beta H_\Lambda^{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}}(\underline{\sigma}_\Lambda)}, \quad \text{avec} \\ H_\Lambda^{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}}(\underline{\sigma}_\Lambda) &= \sum_{\substack{X \cap \Lambda \neq \emptyset \\ X \subset \Delta}} \phi_X((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\sigma}_{\Lambda^c})), \quad Z_\Lambda(\underline{\sigma}_{\Lambda^c}) = \sum_{\underline{\sigma}'_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda^{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}}(\underline{\sigma}'_\Lambda)}. \end{aligned} \quad (66)$$

On retrouve l'Hamiltonien avec conditions aux bords fixées, à la seule différence qu'on travaillait ici dans un volume total fixé Δ . Dans la suite on va reprendre $\Delta \rightarrow \mathbb{Z}^d$, mais la définition des lois conditionnelles dans ce cas-là est plus subtile (on ne peut pas diviser par $\eta_{\Lambda^c}(\underline{\sigma}_{\Lambda^c})$ qui est en général nulle si $\Lambda^c = \mathbb{Z}^d \setminus \Lambda$ est infinie). On va d'abord donner quelques définitions plus formelles pour manipuler des lois de probabilité sur un espace de configurations infini.

3.2 Rappels de topologie et de théorie de la mesure

On veut maintenant définir des mesures de probabilité pour $\Delta \rightarrow \mathbb{Z}^d$, en fait plus satisfaisant de travailler directement avec $\Delta = \mathbb{Z}^d$, mais du coup il faut être plus précis sur la notion de loi de probabilité, et utiliser des notions de théorie de la mesure. On va mettre deux structures sur $\Sigma = \chi^{\mathbb{Z}^d}$:

Σ comme espace topologique

Rappelons qu'une topologie sur un ensemble X est une collection de parties de X (ses ouverts), contenant \emptyset et X , stable par intersection finie et union arbitraire. Un ensemble muni d'une topologie est dit espace topologique; une fonction d'un espace topologique dans un autre est dite continue si l'image réciproque d'un ouvert est un ouvert. L'intersection de topologies est une topologie, on peut donc définir la topologie la moins fine contenant une partie des parties de X comme l'intersection de toutes les topologies ayant cette propriété.

Sur χ fini il est naturel d'introduire la topologie discrète (toutes les parties de χ sont ouvertes). Toute fonction de χ dans \mathbb{R} est alors continue au sens topologique du terme, même si cette notion de "continuité" n'est pas celle intuitive puisque l'espace de départ χ est discret.

Sur Σ on utilisera la topologie produit, i.e. la topologie la moins fine telle que les projections $\underline{\sigma} \in \Sigma \rightarrow \sigma_x \in \chi$ soient continues. Les ouverts de Σ sont donc les unions (arbitraires) de parties de Σ de la forme $\{\underline{\sigma} \in \Sigma : \underline{\sigma}_\Lambda = \underline{\tau}_\Lambda\}$, avec $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ (noter que Λ est fini ici). Ceci est une base dénombrable d'ouverts pour Σ .

Les voisinages d'une configuration $\underline{\tau}$ sont les ensembles $\{\underline{\sigma} : \underline{\sigma}_\Lambda = \underline{\tau}_\Lambda\}$ avec $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$.

Dans cette topologie une suite de configurations $\underline{\sigma}^{(n)}$ converge vers $\underline{\sigma}$ ssi $\forall x \in \mathbb{Z}^d \exists N \forall n \geq N \sigma_x^{(n)} = \sigma_x$.

Une propriété importante et utile pour la suite est que Σ est compact. En effet le théorème de Tychonov assure qu'un produit (avec la topologie produit) d'espaces compacts est compact, et clairement χ est compact (tout recouvrement ouvert de χ est par lui-même fini, l'existence d'un sous-recouvrement fini est triviale).

Notons \mathcal{C} l'ensemble des fonctions continues de Σ dans \mathbb{R} . C'est un espace vectoriel, que l'on munira de la norme $\|f\|_\infty = \sup_{\underline{\sigma}} |f(\underline{\sigma})|$ (dans cette section on notera souvent f des fonctions de Σ dans \mathbb{R} , il ne devrait pas y avoir de confusion possible avec l'énergie libre $f(\beta, \Phi)$). Puisque Σ est compact toute fonction continue est bornée, $\|\cdot\|_\infty$ est bien une norme, et \mathcal{C} est un Banach pour la norme $\|\cdot\|_\infty$. On avait défini l'ensemble \mathcal{C}_Λ des fonctions qui ne dépendent que de $\underline{\sigma}_\Lambda$; clairement toutes ces fonctions sont continues quand Λ est fini. Par ailleurs $\cup_{\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d} \mathcal{C}_\Lambda$ est dense dans \mathcal{C} , pour la topologie induite par la norme $\|\cdot\|_\infty$, en d'autres termes toute fonction continue est approximable par des fonctions qui ne dépendent que d'un nombre fini de variables (c'est le théorème de Stone-Weierstrass).

De plus la topologie sur Σ est métrisable, avec la distance

$$d(\underline{\sigma}, \underline{\tau}) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} e^{-\text{dist}(0,x)} \mathbb{I}(\sigma_x \neq \tau_x) . \quad (67)$$

Vérifions que c'est en effet une distance. Le nombre de sommets de \mathbb{Z}^d à distance ℓ de l'origine croît comme ℓ^{d-1} , donc grâce au terme $e^{-\ell}$ la somme est convergente quelque soit les configurations $\underline{\sigma}$ et $\underline{\tau}$. C'est une somme convergente de termes non-négatifs, elle est donc non-négative, et nulle si et seulement si tous les termes sont nuls, ce qui implique $\sigma_x = \tau_x$ pour tout les x , i.e. $\underline{\sigma} = \underline{\tau}$. La symétrie $d(\underline{\sigma}, \underline{\tau}) = d(\underline{\tau}, \underline{\sigma})$ est évidente, et finalement $\mathbb{I}(\sigma_x \neq \sigma''_x) \leq \mathbb{I}(\sigma_x \neq \sigma'_x) + \mathbb{I}(\sigma'_x \neq \sigma''_x)$ (en vérifiant les différents cas possibles), ce qui donne l'inégalité triangulaire $d(\underline{\sigma}, \underline{\sigma}'') \leq d(\underline{\sigma}, \underline{\sigma}') + d(\underline{\sigma}', \underline{\sigma}'')$.

Vérifions maintenant que la topologie introduite ci-dessus correspond à celle induite par cette distance. Considérons un voisinage de la configuration $\underline{\tau}$, i.e. $\{\underline{\sigma} : \underline{\sigma}_\Lambda = \underline{\tau}_\Lambda\}$ pour un Λ fini. Notons $\epsilon = \min_{x \in \Lambda} e^{-x}$. Alors la boule ouverte de rayon ϵ (qui est bien > 0) autour de $\underline{\tau}$ est incluse dans ce voisinage : s'il y avait $x \in \Lambda$ avec $\underline{\sigma}_x \neq \underline{\tau}_x$, nécessairement $d(\underline{\sigma}, \underline{\tau}) \geq \epsilon$. Réciproquement toute boule ouverte autour de $\underline{\tau}$ contient un voisinage de $\underline{\tau}$: pour $\epsilon > 0$ on peut trouver Λ fini tel que $\sum_{x \notin \Lambda} e^{-x} < \epsilon$, et si $\underline{\sigma}_\Lambda = \underline{\tau}_\Lambda$ alors $d(\underline{\sigma}, \underline{\tau}) < \epsilon$.

Σ est complet car métrisable et compact.

Les fonctions continues de Σ dans \mathbb{R} sont uniformément continues, d'après le théorème de Heine, puisque Σ est compact.

Σ comme espace mesurable

Rappelons qu'une tribu (σ -algèbre) sur un ensemble X est une collection de parties de X (les parties mesurables) contenant \emptyset et X , stable par passage au complémentaire et par intersection et union dénombrable. Un ensemble muni d'une tribu est appelé espace mesurable; une fonction d'un espace mesurable dans un autre est dite mesurable si l'image réciproque d'une partie mesurable est une partie mesurable. L'intersection de tribus est une tribu, on peut donc définir la tribu engendrée par une famille de parties de X comme l'intersection de toutes les tribus contenant cette famille de parties. Si X est aussi un espace topologique la tribu Borélienne est celle engendrée par les ouverts de X .

Sur χ fini on prend naturellement la tribu contenant toutes les parties de χ , sur Σ la tribu produit dénotée \mathcal{F} , i.e. la plus petite tribu telle que les projections soient mesurables. Notons $C_{x, \tau_x} = \{\underline{\sigma} \in \Sigma : \sigma_x = \tau_x\}$ le cylindre où la variable au point $x \in \mathbb{Z}^d$ est contrainte à la valeur $\tau_x \in \chi$. \mathcal{F} est la tribu engendrée par $\{C_{x, \tau_x}\}_{x \in \mathbb{Z}^d, \tau_x \in \chi}$, on notera aussi \mathcal{F}_Λ la sous-tribu de \mathcal{F} engendrée par $\{C_{x, \tau_x}\}_{x \in \Lambda, \tau_x \in \chi}$ quand Λ est une partie (pas forcément finie) de \mathbb{Z}^d .

Les deux structures (topologie et tribu) introduites sur Σ sont compatibles, dans le sens que \mathcal{F} est la tribu borélienne pour la topologie produit (la plus petite tribu contenant tous les ouverts). Plus généralement la tribu produit de tribus boréliennes est la tribu borélienne de la topologie produit si celle-ci admet une base dénombrable d'ouverts. Les fonctions continues de Σ dans \mathbb{R} seront donc toujours mesurables.

Une mesure de probabilité sur Σ (plus précisément sur (Σ, \mathcal{F})) est une application μ de \mathcal{F} dans $[0, 1]$, avec $\mu(\emptyset) = 0$, $\mu(\Sigma) = 1$ et μ σ -additive (si les A_i sont une famille dénombrable d'éléments de \mathcal{F} , tous disjoints, $\mu(\cup A_i) = \sum \mu(A_i)$). On note \mathcal{M} l'ensemble de ces mesures de probabilité.

Pour une fonction $f(\underline{\sigma})$ mesurable positive et μ une mesure de probabilité on sait définir

$$\mu(f) = \int d\mu(\underline{\sigma}) f(\underline{\sigma}) = \int \mu(d\underline{\sigma}) f(\underline{\sigma}) , \quad (68)$$

comme le sup des fonctions étagées inférieure à la fonction f . On note $d\underline{\sigma}$ même si $\underline{\sigma}$ est discret, ce n'est évidemment pas un élément différentiel infinitésimal. Comme ici les fonctions continues sont bornées on peut définir $\mu(f)$ pour toute fonction $f \in \mathcal{C}$ pas forcément positive, comme $\mu(f^+) - \mu(f^-)$, avec $f^+(\underline{\sigma}) = \max(f(\underline{\sigma}), 0)$ et $f^-(\underline{\sigma}) = \max(-f(\underline{\sigma}), 0)$.

Sur un espace métrique deux mesures de probabilité μ, ν sont égales si et seulement si $\mu(f) = \nu(f)$ pour toutes les fonctions réelles f bornées et uniformément continues (Th 1.2 dans Billingsley,

Convergence of probability measures). Dans notre cas Σ est métrisable est compact, donc $\mu = \nu$ ssi $\mu(f) = \nu(f)$ pour toutes les fonctions continues. Comme les fonctions cylindriques dans $\cup \mathcal{C}_\Lambda$ avec Λ fini sont denses dans \mathcal{C} on a $\mu = \nu \Leftrightarrow \mu(f) = \nu(f) \forall f \in \cup_{\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d} \mathcal{C}_\Lambda$ (il suffit d'approximer $f \in \mathcal{C}$ par $g \in \cup \mathcal{C}_\Lambda$ avec $\|f - g\|_\infty \leq \epsilon$, et d'utiliser $|\mu(f) - \mu(g)| \leq \|f - g\|_\infty$, i.e. l'application $f \rightarrow \mu(f)$ est continue de \mathcal{C} avec $\|\cdot\|_\infty$ vers \mathbb{R}).

De $\mu \in \mathcal{M}$ on peut définir la loi marginale μ_Λ , où $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ n'est pas forcément fini, comme la loi sur $(\chi^\Lambda, \mathcal{F}_\Lambda)$ telle que $\mu_\Lambda(f) = \mu(f)$ pour toutes les fonctions $f \in \mathcal{C}_\Lambda$, i.e. continues qui ne dépendent que de $\underline{\sigma}_\Lambda$. On peut aussi définir les lois conditionnelles de μ mais c'est plus technique, dans la suite on va les utiliser de manière implicite.

Topologie sur \mathcal{M}

On va utiliser la topologie de la convergence faible, où $\mu_n \rightarrow \mu$ si et seulement si $\mu_n(f) \rightarrow \mu(f)$ pour tout f dans \mathcal{C} .

C'est une topologie métrisable, avec la distance de Lévy-Prokhorov

$$d(\mu, \nu) = \inf\{\epsilon > 0 : \mu(A) \leq \nu(A^\epsilon) + \epsilon, \nu(A) \leq \mu(A^\epsilon) + \epsilon \forall A \in \mathcal{F}\}, \quad (69)$$

où A^ϵ est le voisinage à distance ϵ de A . La caractérisation par les suites est donc suffisante, car dans un espace métrique les fermés sont caractérisés de manière univoque par le fait que leurs points d'adhérence leur appartiennent (et donc les ouverts sont bien définis comme complémentaires des fermés).

\mathcal{M} est compact pour cette topologie (c'est un cas particulier du théorème de Prokhorov, comme Σ est compact toute famille de mesures de probabilité est étroite. Cf Billingsley, Convergence of probability measures, page 59).

3.3 Définition des mesures de Gibbs

Lemme 6. Rappelons que pour $\Phi \in \mathcal{I}_p$ et β le Hamiltonien dans $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ avec conditions aux bords $\underline{\tau}$ et la fonction de partition associée sont définis par

$$H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma}) = \sum_{X, X \cap \Lambda \neq \emptyset} \phi_X((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})), \quad Z_\Lambda^{\underline{\tau}}(\beta, \Phi) = \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma})}. \quad (70)$$

On définit maintenant, en gardant Φ et β sous-entendus pour alléger les notations,

$$\eta_\Lambda(\underline{\sigma} | \underline{\tau}) = \frac{1}{Z_\Lambda^{\underline{\tau}}(\beta, \Phi)} e^{-\beta H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma})}, \quad (71)$$

qui dépend en fait seulement de $\underline{\sigma}_\Lambda$ et de $\underline{\tau}_{\Lambda^c}$. Alors :

- pour tout $\underline{\tau}$, $\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma} | \underline{\tau}) = 1$.
- pour tout $\underline{\sigma}$, $\underline{\tau} \rightarrow \eta_\Lambda(\underline{\sigma} | \underline{\tau})$ est une fonction continue, et donc mesurable.

Démonstration. On avait vu précédemment que la condition $\Phi \in \mathcal{I}_p$ assurait la convergence de la somme dans $H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma})$, uniformément en $\underline{\sigma}$ et $\underline{\tau}$, η_Λ est donc bien définie.

Le premier point est trivial par la définition.

Pour le deuxième, on note que $\underline{\tau} \rightarrow \phi_X((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}))$ est une fonction continue car elle ne dépend que d'un nombre fini de variables dans $X \cap \Lambda^c$, une fonction d'un nombre fini de variables est continue, et l'on utilise le fait que pour $\Phi \in \mathcal{I}_p$ la somme converge normalement en $\underline{\tau}$ pour montrer que $\underline{\tau} \rightarrow H_\Lambda^{\Phi, \underline{\tau}}(\underline{\sigma})$ est continue. Comme la somme sur $\underline{\sigma}_\Lambda$ contient un nombre fini de termes on a aussi $\underline{\tau} \rightarrow Z_\Lambda^{\underline{\tau}}(\beta, \Phi)$ continue, et donc $\underline{\tau} \rightarrow \eta_\Lambda(\underline{\sigma} | \underline{\tau})$ est continue. \square

Lemme 7. Si f est une fonction réelle continue (resp. mesurable), $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ et $\underline{\sigma}_\Lambda \in \chi^\Lambda$ fixée, alors $\underline{\tau} \rightarrow f((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}))$ est continue (resp. mesurable).

Démonstration. Notons, en ayant fixé $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ et $\underline{\sigma}_\Lambda \in \chi^\Lambda$, g la fonction $\underline{\tau} \rightarrow f((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}))$.

Pour la continuité, il suffit de remarquer que si $\underline{\tau}^{(n)} \rightarrow \underline{\tau}$, alors $(\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}^{(n)}) \rightarrow (\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})$ (c'est une convergence simple), comme f est continue $g(\underline{\tau}^{(n)}) = f((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}^{(n)})) \rightarrow f((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})) = g(\underline{\tau})$. Comme Σ est métrisable c'est suffisant pour prouver la continuité.

Pour la mesurabilité, cf. th 5.1.2. dans les notes de Le Gall, \mathcal{F} pouvant être vu comme la tribu produit de \mathcal{F}_Λ et \mathcal{F}_{Λ^c} . \square

Définition 5. Une mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{M}$ sur (Σ, \mathcal{F}) est dite à l'équilibre dans $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ pour une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_p$ à la température inverse β si elle vérifie la condition dite de Dobrushin-Lanford-Ruelle (DLR) :

$$\mu(A) = \int \mu(d\underline{\tau}) \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\underline{\tau}) \mathbb{I}((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}) \in A) \quad \forall A \in \mathcal{F}. \quad (72)$$

On note alors $\mu \in \mathcal{G}_\Lambda(\beta, \Phi)$.

Cette condition traduit l'idée qu'à l'intérieur de Λ le système est à l'équilibre, avec des conditions aux bords elles-mêmes tirées selon la mesure d'équilibre. C'est une façon d'écrire que les probabilités conditionnelles de μ sont données par les lois de Gibbs-Boltzmann.

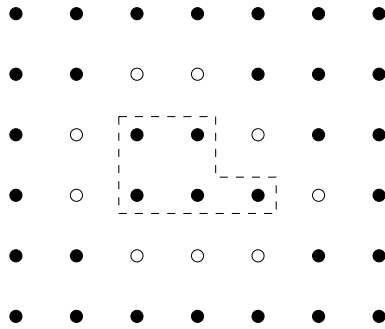
Le membre de droite est bien défini car c'est l'intégrale d'une fonction de $\underline{\tau}$ qui est positive et mesurable. C'est une somme finie, sur $\underline{\sigma}_\Lambda$, de fonctions, il suffit de vérifier que chacune de ces fonctions de $\underline{\tau}_{\Lambda^c}$ est mesurable, ce qui est assuré par les deux lemmes précédents (A étant un évènement mesurable, sa fonction indicatrice est mesurable).

On peut aussi vérifier que $\mu(\Sigma) = 1$ est bien respectée par l'équation, car alors la fonction indicatrice vaut 1, $\sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\underline{\tau}) = 1$, et l'intégrale de 1 vaut 1.

Définition 6. Une mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{M}$ sur (Σ, \mathcal{F}) est dite mesure de Gibbs pour une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_p$ à la température inverse β si elle est à l'équilibre dans tout volume fini, on note alors $\mu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$. Autrement dit $\mathcal{G}(\beta, \Phi) = \bigcap_{\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d} \mathcal{G}_\Lambda(\beta, \Phi)$.

On va voir que c'est le "bon niveau de contraintes" : il existe des mesures de Gibbs, mais elles ne sont pas forcément uniques, au contraire les transitions de phase vont se traduire par l'existence de plusieurs mesures de Gibbs associées à la même interaction Φ et à la même température inverse β .

Pour donner un exemple concret considérons le cas du modèle d'Ising. Comme les interactions sont à portée 1, $\eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\underline{\tau})$ ne dépend de $\underline{\tau}$ que par l'intermédiaire de $\underline{\tau}_{\partial_e \Lambda}$, où $\partial_e \Lambda$ est l'ensemble des sites hors de Λ à distance 1 de Λ . Sur la figure :



Λ correspond aux sites entourées, les sites de $\partial_e \Lambda$ sont en blanc.

On a donc, si μ est une mesure de Gibbs pour l'interaction d'Ising, avec un léger abus de notation,

$$\mu(\underline{\sigma}_{\Lambda \cup \partial_e \Lambda}) = \mu(\underline{\sigma}_{\partial_e \Lambda}) \eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda | \underline{\sigma}_{\partial_e \Lambda}), \quad (73)$$

en utilisant le fait que μ est à l'équilibre dans Λ . On a noté $\mu(\underline{\sigma}_{\Lambda \cup \partial_e \Lambda})$ ce qui formellement serait $\mu(\{\underline{\tau} \in \Sigma : \underline{\tau}_{\Lambda \cup \partial_e \Lambda} = \underline{\sigma}_{\Lambda \cup \partial_e \Lambda}\})$ et de même pour $\mu(\underline{\sigma}_{\partial_e \Lambda})$. Dans le cas particulier où $\Lambda = \{x\}$, la loi

conditionnelle pour un seul site s'écrit

$$\eta_{\{x\}}(\sigma_x | \underline{\tau}) = \frac{e^{\beta(h + J \sum_{y \in \partial x} \tau_y) \sigma_x}}{2 \cosh(\beta(h + J \sum_{y \in \partial x} \tau_y))} = \frac{1 + \sigma_x \tanh(\beta(h + J \sum_{y \in \partial x} \tau_y))}{2}, \quad (74)$$

les voisins de x (que l'on note ici et dans la suite ∂x) créent un champ magnétique effectif sur σ_x .

Insistons sur l'interprétation des conditions DLR : on a renoncé à écrire $\mu(\underline{\sigma}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\underline{\sigma})}$ qui n'a pas de sens en volume infini, on impose la forme de Gibbs-Boltzmann seulement sur les probabilités conditionnelles. Ce sont des équations d'auto-cohérence, dans le sens que μ est présent dans les deux membres de l'équation DLR. On les impose dans tout Λ fini, ce qui laisse donc la possibilité que deux mesures de Gibbs "diffèrent à l'infini" (on donnera un sens précis à cette affirmation un peu plus tard.)

3.4 Existence des mesures de Gibbs

Lemme 8. Pour $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$, f une fonction de Σ dans \mathbb{R} , on note

$$f_\Lambda(\underline{\tau}) = \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma} | \underline{\tau}) f((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})) . \quad (75)$$

Si f est continue alors f_Λ l'est aussi (et donc mesurable), et f_Λ ne dépend que de $\underline{\tau}_{\Lambda^c}$, i.e. elle est \mathcal{F}_{Λ^c} -mesurable. f_Λ est donc la moyenne conditionnée de f , en re-tirant la configuration au sein de Λ avec la loi conditionnelle étant donnée la condition aux bords $\underline{\tau}_{\Lambda^c}$.

Démonstration. La continuité est une conséquence des lemmes 6 et 7, puisqu'il n'y a qu'un nombre fini de termes dans la somme sur $\underline{\sigma}_\Lambda$, la \mathcal{F}_{Λ^c} -mesurabilité est évidente par la définition. \square

Si f est indépendante des variables dans Λ (i.e. si elle est \mathcal{F}_{Λ^c} mesurable) alors $f_\Lambda = f$.

Lemme 9. Pour Λ fini la condition DLR est équivalente à

$$\mu(f) = \mu(f_\Lambda) \quad \forall f \in \mathcal{C}, \quad (76)$$

i.e. on teste la condition sur toutes les fonctions continues plutôt que sur tous les événements mesurables.

Démonstration. On a vu dans les rappels que $\mu = \nu$ ssi $\mu(f) = \nu(f)$ pour toutes les fonctions f continues. Le membre de droite de (72) définit une mesure $\nu(A)$, et l'on peut vérifier que

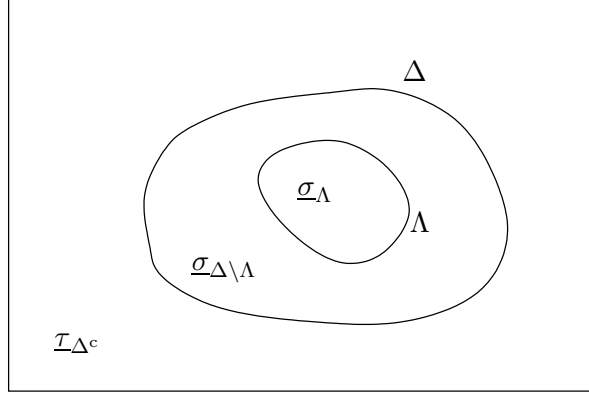
$$\nu(f) = \int \nu(d\underline{\tau}) f(\underline{\tau}) = \int \mu(d\underline{\tau}) \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma} | \underline{\tau}) f((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c})) = \mu(f_\Lambda) . \quad (77)$$

\square

Lemme 10. Les ensembles $\mathcal{G}_\Lambda(\beta, \Phi)$ des mesures à l'équilibre dans un volume fini Λ vérifient les deux propriétés suivantes :

- Si $\Lambda \subset \Delta$ alors $\mathcal{G}_\Delta(\beta, \Phi) \subset \mathcal{G}_\Lambda(\beta, \Phi)$, i.e. si la condition DLR est vérifiée dans un volume fini elle l'est automatiquement dans tout volume à l'intérieur.
- $\mathcal{G}_\Lambda(\beta, \Phi)$ est une partie fermée (et donc compacte) de \mathcal{M} .

Démonstration. Pour le premier point, notons que pour $\Lambda \subset \Delta$, comme représenté sur ce schéma,



$$\eta_{\Delta}(\underline{\sigma}_{\Delta} | \tau_{\Delta^c}) = \eta_{\Lambda}(\underline{\sigma}_{\Lambda} | \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c}) \sum_{\underline{\sigma}'_{\Lambda}} \eta_{\Delta}(\underline{\sigma}'_{\Lambda}, \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda} | \tau_{\Delta^c}) . \quad (78)$$

En effet, en gardant implicite l'interaction Φ pour alléger les notations mais en écrivant explicitement de quelles variables les fonctions dépendent, on a

$$\begin{aligned} H_{\Delta}^{\tau_{\Delta^c}}(\underline{\sigma}_{\Delta}) &= \sum_{X, X \cap \Delta \neq \emptyset} \phi_X((\underline{\sigma}_{\Delta}, \tau_{\Delta^c})) = \sum_{X, X \cap \Lambda \neq \emptyset} \phi_X((\underline{\sigma}_{\Delta}, \tau_{\Delta^c})) + \sum_{\substack{X, X \cap \Delta \neq \emptyset \\ X \cap \Lambda = \emptyset}} \phi_X((\underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c})) \\ &= H_{\Lambda}^{(\underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c})}(\underline{\sigma}_{\Lambda}) + \sum_{\substack{X, X \cap \Delta \neq \emptyset \\ X \cap \Lambda = \emptyset}} \phi_X((\underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c})) , \end{aligned} \quad (79)$$

où par construction les termes de la dernière somme sont indépendants de $\underline{\sigma}_{\Lambda}$. Il vient donc

$$\eta_{\Delta}(\underline{\sigma}_{\Delta} | \tau_{\Delta^c}) = \eta_{\Lambda}(\underline{\sigma}_{\Lambda} | \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c}) g(\underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c}) , \quad (80)$$

où g ne dépend pas de $\underline{\sigma}_{\Lambda}$. Il suffit de sommer sur $\underline{\sigma}_{\Lambda}$ dans cette dernière équation et d'utiliser la condition de normalisation de η_{Λ} par rapport à son premier argument pour obtenir l'expression de g , et donc (78). De cette équation on peut obtenir :

$$\forall f \in \mathcal{C} , \quad f_{\Delta} = (f_{\Lambda})_{\Delta} . \quad (81)$$

En effet

$$\begin{aligned} f_{\Delta}(\underline{\tau}) &= \sum_{\underline{\sigma}_{\Delta}} f((\underline{\sigma}_{\Delta}, \tau_{\Delta^c})) \eta_{\Delta}(\underline{\sigma} | \underline{\tau}) = \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}, \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \underline{\sigma}'_{\Lambda}} \eta_{\Lambda}(\underline{\sigma}_{\Lambda} | \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c}) f((\underline{\sigma}_{\Lambda}, \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c})) \eta_{\Delta}(\underline{\sigma}'_{\Lambda}, \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda} | \tau_{\Delta^c}) \\ &= \sum_{\underline{\sigma}'_{\Lambda}, \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}} f_{\Lambda}((\underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda}, \tau_{\Delta^c})) \eta_{\Delta}(\underline{\sigma}'_{\Lambda}, \underline{\sigma}_{\Delta \setminus \Lambda} | \tau_{\Delta^c}) = (f_{\Lambda})_{\Delta}(\underline{\tau}) . \end{aligned} \quad (82)$$

Considérons maintenant $\mu \in \mathcal{G}_{\Delta}(\beta, \Phi)$ et $f \in \mathcal{C}$. Par la caractérisation (76) de \mathcal{G}_{Δ} appliquée à f on a $\mu(f) = \mu(f_{\Delta})$, et en l'appliquant à f_{Λ} il vient $\mu(f_{\Lambda}) = \mu((f_{\Lambda})_{\Delta})$. En combinant ces deux égalités et l'équation (81), il vient $\mu(f) = \mu(f_{\Lambda})$. Comme c'est vrai pour toute fonction f continue, on a montré $\mu \in \mathcal{G}_{\Lambda}(\beta, \Phi)$, et donc l'inclusion $\mathcal{G}_{\Delta}(\beta, \Phi) \subset \mathcal{G}_{\Lambda}(\beta, \Phi)$.

Pour le deuxième point, comme \mathcal{M} est métrisable, \mathcal{G}_{Λ} est fermée si et seulement si toute suite d'éléments de \mathcal{G}_{Λ} qui converge dans \mathcal{M} a pour limite un élément de \mathcal{G}_{Λ} . Considérons donc une suite μ_n d'éléments de \mathcal{G}_{Λ} , qui converge dans \mathcal{M} vers μ . Par définition de la topologie de \mathcal{M} , pour toute fonction continue f on a $\mu_n(f) \rightarrow \mu(f)$. Or pour tout n on a $\mu_n(f_{\Lambda}) = \mu_n(f)$ puisque $\mu_n \in \mathcal{G}_{\Lambda}$, et donc en passant à la limite $\mu(f_{\Lambda}) = \mu(f)$, ce qui démontre $\mu \in \mathcal{G}_{\Lambda}$.

Une partie fermée d'un compact étant compacte, comme \mathcal{M} est compact et \mathcal{G}_{Λ} fermée dans \mathcal{M} on a bien \mathcal{G}_{Λ} compacte. □

Théorème 5. $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ est une partie compacte non-vide de \mathcal{M} .

Démonstration. Notons $\mu_{\Lambda}^{\underline{\tau}}$ la mesure avec la condition aux bord strictement fixée à $\underline{\tau}$ à l'extérieur de Λ , i.e.

$$\mu_{\Lambda}^{\underline{\tau}}(A) = \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} \eta_{\Lambda}(\underline{\sigma}|\underline{\tau}) \mathbb{I}((\underline{\sigma}_{\Lambda}, \underline{\tau}_{\Lambda^c}) \in A) . \quad (83)$$

On a $\mu_{\Lambda}^{\underline{\tau}}(f) = f_{\Lambda}(\underline{\tau}) = \mu_{\Lambda}^{\underline{\tau}}(f_{\Lambda})$ pour toute fonction $f \in \mathcal{C}$, et donc $\mu_{\Lambda}^{\underline{\tau}} \in \mathcal{G}_{\Lambda}(\beta, \Phi)$ (quelque soit $\underline{\tau}$). On a donc montré que les $\mathcal{G}_{\Lambda}(\beta, \Phi)$ sont des compacts non-vides.

Ici et dans toute la suite on notera $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ si Λ_n est une suite de parties finies de \mathbb{Z}^d , croissante pour l'inclusion, qui envahit \mathbb{Z}^d (i.e. $\forall x \in \mathbb{Z}^d \exists N \forall n \geq N$ on a $x \in \Lambda_n$), par exemple $\Lambda_n = \{-n, -n+1, \dots, n\}^d$. C'est une notion différente de la convergence à l'infini au sens de Van Hove.

On pourrait conclure ici en notant que \mathcal{G}_{Λ_n} est une suite décroissante de compacts non-vides, qui a donc une limite non-vide d'après un résultat général de topologie. On va cependant faire une preuve plus explicite.

Considérons donc une telle suite Λ_n , et la suite de mesures associées $\mu_{\Lambda_n}^{\underline{\tau}}$. Comme \mathcal{M} est compact il existe une sous-suite $n(p)$ telle que $\mu_{\Lambda_{n(p)}}^{\underline{\tau}}$ converge quand $p \rightarrow \infty$, vers une limite notée μ . Montrons que $\mu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$, i.e. que $\mu \in \mathcal{G}_{\Lambda}(\beta, \Phi)$ pour toute partie finie Λ de \mathbb{Z}^d . Comme $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$, pour tout Λ il existe p_0 tel que $\Lambda \subset \Lambda_{n(p)}$ pour tout $p \geq p_0$, donc $\mu_{n(p)} \in \mathcal{G}_{\Lambda}(\beta, \Phi)$ pour tout $p \geq p_0$. Les \mathcal{G}_{Λ} étant fermés d'après le lemme précédent, la limite μ appartient à \mathcal{G}_{Λ} . On a donc montré que $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ est non-vide. Comme c'est l'intersection des $\mathcal{G}_{\Lambda}(\beta, \Phi)$, qui sont des parties fermées de \mathcal{M} , elle est elle aussi fermée, et donc compacte puisque \mathcal{M} l'est. □

Invariance par translation

On s'est restreint à des interactions invariantes par translation, on peut se demander ce qui devient de cette invariance pour les mesures de Gibbs. En fait toutes les mesures de Gibbs ne sont pas nécessairement invariantes, car les conditions aux bords peuvent briser cette invariance.

On a défini $T_a \underline{\sigma}$ la translation par $a \in \mathbb{Z}^d$ d'une configuration, selon $(T_a \underline{\sigma})_x = \sigma_{x-a}$. Pour un évènement mesurable $A \in \mathcal{F}$ on définit $T_a A = \{\underline{\sigma} : T_{-a} \underline{\sigma} \in A\}$, qui est lui aussi mesurable (\mathcal{F} est engendrée par une famille de parties de Σ stable sous les translations) et la translation d'une mesure $\mu \in \mathcal{M}$ selon $(T_a \mu)(A) = \mu(T_{-a} A)$. De manière équivalente on peut définir l'action des translations sur les fonctions continues, $(T_a f)(\underline{\sigma}) = f(T_{-a} \underline{\sigma})$, et sur les mesures de probabilité par $(T_a \mu)(f) = \mu(T_{-a} f)$. On notera \mathcal{M}_{inv} les mesures de probabilité invariantes par translation, i.e. $\mathcal{M}_{\text{inv}} = \{\mu \in \mathcal{M} : T_a \mu = \mu \forall a \in \mathbb{Z}^d\}$. Notons que \mathcal{M}_{inv} est une partie fermée de \mathcal{M} , car intersection de $\{\mu \in \mathcal{M} : T_a \mu = \mu\}$ sur $a \in \mathbb{Z}^d$, et ces parties sont fermées. En effet, si μ_n est une suite convergente vers μ de mesures invariantes par translation de a ,

$$\forall f \in \mathcal{C} \quad (T_a \mu)(f) = \mu(T_{-a} f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n(T_{-a} f) = \lim_{n \rightarrow \infty} (T_a \mu_n)(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n(f) = \mu(f) . \quad (84)$$

On définira les mesures de Gibbs invariantes par translation, notées $\mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Phi)$ comme $\mathcal{G}(\beta, \Phi) \cap \mathcal{M}_{\text{inv}}$.

Théorème 6. $\mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Phi)$ est une partie compacte non-vide de \mathcal{M} .

Démonstration. Comme \mathcal{G}_{inv} est l'intersection des fermés \mathcal{G} et \mathcal{M}_{inv} elle est aussi fermée dans \mathcal{M} et donc compacte, il reste à montrer qu'elle est non-vide.

Considérons $\nu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$ une mesure de Gibbs (qui existe d'après le précédent théorème). Les translatées $T_a \nu$ sont aussi des mesures de Gibbs pour tout $a \in \mathbb{Z}^d$: soit $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$, alors $\nu \in \mathcal{G}_{T_{-a} \Lambda}(\beta, \Phi)$ puisque ν est dans l'intersection de tous les \mathcal{G}_{Λ} . Donc $T_a \nu \in \mathcal{G}_{\Lambda}$, quelque soit Λ , et donc $T_a \nu \in \mathcal{G}$: l'ensemble des mesures de Gibbs est stable par translation.

Considérons maintenant une suite $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$, et la suite de mesures

$$\mu_n = \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{b \in \Lambda_n} T_b \nu . \quad (85)$$

Par l'observation précédente les μ_n sont pour tout n dans $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ compact, on peut supposer, quitte à prendre une sous-suite convergente, que les μ_n convergent, vers une limite que l'on notera μ . Montrons que μ est invariante par translation. Soit $a \in \mathbb{Z}^d$, montrons que $T_a\mu = \mu$. On prend $f \in \mathcal{C}$,

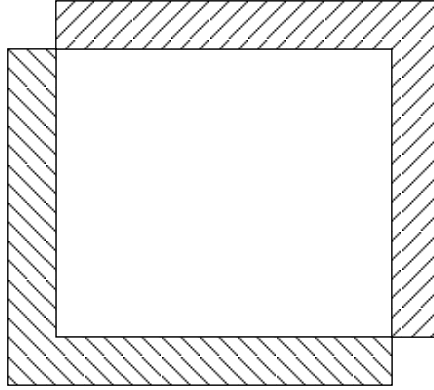
$$T_a(\mu)(f) - \mu(f) = \mu(T_{-a}f) - \mu(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n(T_{-a}f) - \mu_n(f) \quad (86)$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{b \in \Lambda_n} [(T_b\nu)(T_{-a}f) - (T_b\nu)(f)] \quad (87)$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{b \in \Lambda_n} [(T_{a+b}\nu)(f) - (T_b\nu)(f)] \quad (88)$$

$$= \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \left[\sum_{b \in T_a\Lambda_n \setminus \Lambda_n} (T_b\nu)(f) - \sum_{b \in \Lambda_n \setminus T_a\Lambda_n} (T_b\nu)(f) \right]. \quad (89)$$

Or comme $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$, $|T_a\Lambda_n \setminus \Lambda_n|/|\Lambda_n|$ et $|\Lambda_n \setminus T_a\Lambda_n|/|\Lambda_n|$ vont à 0 quand n va à l'infini, ce dont on peut se convaincre graphiquement :



Chacun des termes de la somme étant borné, on a bien $(T_a\mu)(f) = \mu(f)$ pour toute $f \in \mathcal{C}$, donc $T_a\mu = \mu$, et comme c'est vrai pour tout a , μ est invariante par translation. \square

3.5 Transitions de phase dans l'ensemble des mesures de Gibbs

3.5.1 Unicité à haute température

Quand $\beta\Phi = 0$ (i.e. à température infinie) la seule mesure de Gibbs est la mesure produit des mesures uniformes sur χ pour chacun des spins. En effet on a alors $\eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\underline{\tau}) = \frac{1}{|\chi|^{|\Lambda|}}$. Pour une fonction $f \in \mathcal{C}_\Lambda$, $f_\Lambda(\underline{\tau}) = \frac{1}{|\chi|^{|\Lambda|}} \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} f(\underline{\sigma}_\Lambda)$ est indépendante de τ , donc si μ est une mesure de Gibbs $\mu(f) = \mu(f_\Lambda) = f_\Lambda$ il vient

$$\forall \Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d, \forall f \in \mathcal{C}_\Lambda, \quad \mu(f) = \frac{1}{|\chi|^{|\Lambda|}} \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} f(\underline{\sigma}_\Lambda) = \nu(f), \quad (90)$$

où ν est la mesure produit des mesures uniformes. Alors $\mu = \nu$ d'après la caractérisation donnée dans les rappels des mesures par leur comportement sur les fonctions continues dépendant d'un nombre fini de variables (qui sont denses dans \mathcal{C}).

Pour β suffisamment petit, i.e. à suffisamment haute température, et pour des interactions suffisamment régulières, il n'y a aussi qu'une seule mesure de Gibbs. Une façon de prouver ce résultat se base sur un argument de Dobrushin. On va dans la suite en donner les idées principales, et le mettre en œuvre dans le cas du modèle d'Ising.

Pour une fonction $f \in \mathcal{C}$ on définit sa variation en un point x de \mathbb{Z}^d comme

$$\delta_x(f) = \sup_{\underline{\sigma}_{\mathbb{Z}^d \setminus x}, \sigma_x, \sigma'_x} |f((\underline{\sigma}_{\mathbb{Z}^d \setminus x}, \sigma_x)) - f((\underline{\sigma}_{\mathbb{Z}^d \setminus x}, \sigma'_x))|, \quad (91)$$

et sa variation totale comme

$$\Delta(f) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \delta_x(f), \quad (92)$$

qui est une semi-norme (sur la partie de \mathcal{C} où $\Delta(f) < \infty$).

Rappelons la notation $\mathcal{C}_f = \bigcup_{\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d} \mathcal{C}_\Lambda$ pour les fonctions qui dépendent d'un nombre fini (arbitraire) de variables.

Lemme 11. *Si $f \in \mathcal{C}_f$:*

- $\Delta(f) < \infty$
- $\sup(f) - \inf(f) \leq \Delta(f)$
- $\Delta(f) = 0$ implique que f est constante

Démonstration. Supposons $f \in \mathcal{C}_\Lambda$.

- $\delta_x(f) = 0$ si $x \notin \Lambda$, la somme est donc seulement sur un nombre fini de termes.
- Notons $\underline{\sigma}_\Lambda$ et $\overline{\sigma}_\Lambda$ deux configurations qui atteignent le sup et l'inf respectivement, $\Lambda = \{x_1, \dots, x_n\}$ une énumération de Λ , et définissons la suite de configurations $\underline{\sigma}_\Lambda^{(i)}$ pour $i = 0, 1, \dots, n$ qui passent de $\underline{\sigma}_\Lambda$ à $\overline{\sigma}_\Lambda$ en changeant une variable à la fois : $\underline{\sigma}_\Lambda^{(i)} = (\tau_{x_1}, \dots, \tau_{x_i}, \sigma_{x_{i+1}}, \dots, \sigma_{x_n})$. Alors

$$\sup(f) - \inf(f) = f(\underline{\sigma}_\Lambda^{(0)}) - f(\underline{\sigma}_\Lambda^{(n)}) = \sum_{i=0}^{n-1} f(\underline{\sigma}_\Lambda^{(i)}) - f(\underline{\sigma}_\Lambda^{(i+1)}) \leq \sum_{i=1}^n \delta_{x_i}(f) = \Delta(f), \quad (93)$$

car de $\underline{\sigma}_\Lambda^{(i)}$ à $\underline{\sigma}_\Lambda^{(i+1)}$ on ne change (éventuellement) l'argument de f qu'en x_{i+1} .

- Si $\Delta(f) = 0$ alors $\sup(f) = \inf(f)$, donc f est constante. □

Lemme 12. *Supposons qu'il existe une application \mathbb{T} de \mathcal{C}_f dans \mathcal{C}_f , vérifiant :*

- \mathbb{T} est une contraction pour Δ : $\forall f \in \mathcal{C}_f, \Delta(\mathbb{T}(f)) \leq \alpha \Delta(f)$ avec $\alpha < 1$
 - si $\mu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$, $\mu(\mathbb{T}(f)) = \mu(f) \forall f \in \mathcal{C}_f$
- Alors $|\mathcal{G}(\beta, \Phi)| = 1$.

Démonstration. Considérons μ_1 et μ_2 deux mesures de Gibbs, $f \in \mathcal{C}_f$.

$$|\mu_1(f) - \mu_2(f)| = |\mu_1(\mathbb{T}(f)) - \mu_2(\mathbb{T}(f))| = \dots = |\mu_1(\mathbb{T}^n(f)) - \mu_2(\mathbb{T}^n(f))| \leq \Delta(\mathbb{T}^n(f)). \quad (94)$$

En effet $|\mu_1(f) - \mu_2(f)| \leq \Delta(f)$ si μ_1 et μ_2 sont deux mesures de probabilités et $f \in \mathcal{C}_f$: comme $\mu_1(f) \geq \inf(f)$ et $\mu_2(f) \leq \sup(f)$, on a $\mu_2(f) - \mu_1(f) \leq \sup(f) - \inf(f) \leq \Delta(f)$. On obtient l'inégalité sur la valeur absolue en recommençant avec les rôles de μ_1 et μ_2 intervertis.

En reprenant l'inégalité,

$$|\mu_1(f) - \mu_2(f)| \leq \alpha^n \Delta(f), \quad (95)$$

et en faisant tendre n vers l'infini on a $\mu_1(f) = \mu_2(f)$. Comme c'est vrai pour tout $f \in \mathcal{C}_f$, $\mu_1 = \mu_2$, il n'existe donc qu'une mesure de Gibbs. □

Théorème 7. *Pour le modèle d'Ising en dimension d , si $2d \tanh(\beta J) < 1$, il existe une unique mesure de Gibbs (quelque soit le champ magnétique h).*

Démonstration. On va construire une application \mathbb{T} qui vérifie les propriétés du lemme précédent.

Pour $f \in \mathcal{C}$ et x_1, \dots, x_n des points de \mathbb{Z}^d on notera

$$f_{x_1, x_2, \dots, x_n} = (\dots (f_{\{x_1\}})_{\{x_2\}} \dots)_{\{x_n\}} \quad (96)$$

la fonction obtenue par les transformations $f \rightarrow f_\Lambda$ définie en (75), avec successivement $\Lambda = \{x_1\}$, puis $\Lambda = \{x_2\}$, et ainsi de suite jusqu'à $\Lambda = \{x_n\}$. Notons que $(f_{\{x_1\}})_{\{x_2\}} \neq f_{\{x_1, x_2\}}$.

\mathbb{T} est définie de la manière suivante : si $f \in \mathcal{C}_\Lambda$, on énumère les points de Λ comme x_1, \dots, x_n , et on pose $\mathbb{T}(f) = f_{x_1, x_2, \dots, x_n}$. Alors :

- $\mathbb{T}(f) \in \mathcal{C}_f$. En effet, pour le modèle d'Ising, si $f \in \mathcal{C}_\Lambda$, $f_x \in \mathcal{C}_{(\Lambda \setminus x) \cup \partial x}$, donc si on part d'une fonction qui dépend d'un nombre fini de variables et qu'on applique un nombre fini de telles opérations la dépendance reste sur un nombre fini de variables.
- si $\mu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$,

$$\mu(\mathbb{T}(f)) = \mu((\dots (f_{\{x_1\}})_{\{x_2\}} \dots)_{\{x_n\}}) = \mu((\dots (f_{\{x_1\}})_{\{x_2\}} \dots)_{\{x_{n-1}\}}) = \dots = \mu(f_{\{x_1\}}) = \mu(f) , \quad (97)$$

en utilisant à chaque pas $\mu \in \mathcal{G}_{\{x_i\}}(\beta, \Phi)$.

- on va montrer avec une série de lemmes dans la suite que c'est une contraction avec $\alpha = 2d \tanh(\beta J)$. On peut juste remarquer ici que si $J = 0$, $\mathbb{T}(f)$ est constante (c'est la moyenne de f avec la mesure produit biaisée par h), et alors $\Delta(\mathbb{T}(f)) = 0$, ce qui est cohérent.

En admettant le caractère contractant on peut donc utiliser le lemme précédent pour conclure sur l'unicité de la mesure d'Ising. \square

Pour comprendre d'où vient la contraction considérons le cas le plus simple d'une fonction qui ne dépend que d'un spin, $f(\underline{\sigma}) = f(\sigma_x)$. Alors $\mathbb{T}(f) = f_x$ est une fonction de $\underline{\sigma}_{\partial x}$, que l'on peut expliciter :

$$f_x(\underline{\sigma}_{\partial x}) = f(+1)\eta_x(+1|\underline{\sigma}_{\partial x}) + f(-1)\eta_x(-1|\underline{\sigma}_{\partial x}) \quad (98)$$

$$= f(+1) \frac{1 + \tanh\left(\beta \left(h + J \sum_{y \in \partial x} \sigma_y\right)\right)}{2} + f(-1) \frac{1 - \tanh\left(\beta \left(h + J \sum_{y \in \partial x} \sigma_y\right)\right)}{2} \quad (99)$$

$$= \frac{f(+1) + f(-1)}{2} + (f(+1) - f(-1)) \frac{\tanh\left(\beta \left(h + J \sum_{y \in \partial x} \sigma_y\right)\right)}{2} \quad (100)$$

On peut calculer maintenant les variations $\delta_z(f_x)$: elles sont évidemment nulles si $z \notin \partial x$. Dans le cas contraire,

$$\delta_z(f_x) = \sup_{\underline{\sigma}_{\partial x \setminus z}} \left| (f(+1) - f(-1)) \frac{\tanh\left(\beta \left(h + J \sum_{y \in \partial x \setminus z} \sigma_y\right) + \beta J\right) - \tanh\left(\beta \left(h + J \sum_{y \in \partial x \setminus z} \sigma_y\right) - \beta J\right)}{2} \right|$$

$$= \Delta(f) \sup_{p=-2d+1, -2d+3, \dots, 2d-1} \left| \frac{\tanh(\gamma + \beta J) - \tanh(\gamma - \beta J)}{2} \right| \quad \text{où } \gamma = \beta(h + Jp) \quad (101)$$

$$\leq \Delta(f) \tanh(\beta J) \quad (102)$$

où l'on a utilisé l'identité $|\tanh(a+b) - \tanh(a-b)|/2 \leq \tanh(b)$ pour $b \geq 0$ qui se prouve en considérant la fonction $a \rightarrow \frac{\tanh(a+b) - \tanh(a-b)}{2} - \tanh(b)$, qui est nulle en 0 et dont la dérivée est négative pour $a \geq 0$ (car $\tanh'(x)$ est décroissante pour $x \geq 0$).

En sommant sur les $2d$ voisins de x il vient bien

$$\Delta(f_x) \leq 2d \tanh(\beta J) \Delta(f) , \quad (103)$$

ce qui démontre la contraction dans ce cas simple. Intuitivement, on passe de f qui ne dépend que de σ_x à f_x qui dépend de plus de variables, mais qui est « plus proche d'une fonction constante » (dans le sens mesuré par Δ).

On va maintenant prouver de manière générale que l'application \mathbb{T} définie ci-dessus est une contraction quand $\alpha = 2d \tanh(\beta J) < 1$.

Lemme 13. *Pour toute fonction $f \in \mathcal{C}$, pour tous points x, z de \mathbb{Z}^d , on a*

$$\delta_z(f_x) \leq \mathbb{I}(z \neq x) \delta_z(f) + \mathbb{I}(z \in \partial x) \tanh(\beta J) \delta_x(f) . \quad (104)$$

Démonstration. Notons en particulier que $\delta_x(f_x) = 0$, comme il se doit, et que si f ne dépend que de σ_x on retrouve le résultat de l'observation précédente (cf. Eq.(102))

Rappelons la définition de f_x , en écrivant \mathbb{Z}^d comme l'union disjointe de $x, \partial x$ et d'un domaine noté Λ :

$$f_x(\underline{\sigma}_{\partial x}, \underline{\sigma}_\Lambda) = \sum_{\sigma_x} \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial x}) f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial x}, \underline{\sigma}_\Lambda) . \quad (105)$$

Il est clair que $\delta_x(f_x) = 0$, on va donc calculer $\delta_z(f_x)$ pour $z \neq x$. La dépendance de f_x en σ_z prend des formes différentes selon que $z \in \partial x$ ou pas, on va donc distinguer ces deux cas.

– Supposons $z \in \Lambda$ (i.e. $z \neq x$ et $z \notin \partial x$). Alors notons $\Lambda' = \Lambda \setminus z$,

$$\delta_z(f_x) = \sup_{\underline{\sigma}_{\partial x}, \underline{\sigma}_{\Lambda'}} \left| \sum_{\sigma_x} \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial x}) (f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial x}, \underline{\sigma}_{\Lambda'}, +1) - f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial x}, \underline{\sigma}_{\Lambda'}, -1)) \right| \quad (106)$$

$$\leq \delta_z(f) , \quad (107)$$

car $\delta_z(f)$ majore la valeur absolue de la différence des deux f , quelque soient les arguments $\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial x}, \underline{\sigma}_{\Lambda'}$.

– Supposons $z \in \partial x$. On notera $\partial' x = \partial x \setminus z$.

$$\begin{aligned} \delta_z(f_x) &= \sup_{\underline{\sigma}_{\partial' x}, \underline{\sigma}_\Lambda} \left| \sum_{\sigma_x} [\eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1) f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1, \underline{\sigma}_\Lambda) - \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1) f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda)] \right| \\ &= \sup_{\underline{\sigma}_{\partial' x}, \underline{\sigma}_\Lambda} \left| \sum_{\sigma_x} \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1) (f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1, \underline{\sigma}_\Lambda) - f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda)) \right| \end{aligned} \quad (108)$$

$$+ \left| \sum_{\sigma_x} (\eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1) - \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1)) f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda) \right| \quad (109)$$

$$\leq \sup_{\underline{\sigma}_{\partial' x}, \underline{\sigma}_\Lambda} \left| \sum_{\sigma_x} \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1) (f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1, \underline{\sigma}_\Lambda) - f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda)) \right| \quad (110)$$

$$+ \sup_{\underline{\sigma}_{\partial' x}, \underline{\sigma}_\Lambda} \left| \sum_{\sigma_x} (\eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1) - \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1)) f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda) \right| . \quad (111)$$

On peut majorer la première ligne par $\delta_z(f)$, comme dans le cas précédent. Pour la deuxième, on remarque que l'on peut ajouter une quelconque fonction indépendante de σ_x à une somme pondérée par la différence de deux mesures de probabilité pour σ_x . On peut donc réécrire la deuxième ligne

$$\begin{aligned} &\sup_{\underline{\sigma}_{\partial' x}, \underline{\sigma}_\Lambda} \left| \sum_{\sigma_x} (\eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1) - \eta_x(\sigma_x | \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1)) (f(\sigma_x, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda) - f(-1, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda)) \right| \\ &= \sup_{\underline{\sigma}_{\partial' x}, \underline{\sigma}_\Lambda} |\eta_x(+1 | \underline{\sigma}_{\partial' x}, +1) - \eta_x(+1 | \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1)| |f(+1, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda) - f(-1, \underline{\sigma}_{\partial' x}, -1, \underline{\sigma}_\Lambda)| \\ &\leq \tanh(\beta J) \delta_x(f) , \end{aligned} \quad (112)$$

où le $\tanh(\beta J)$ provient de la borne sur la différence des deux η_x , comme expliqué à l'équation (102).

En regroupant les différents cas on obtient la formulation dans l'énoncé du lemme. \square

Lemme 14. Si $\alpha = 2d \tanh(\beta J) \leq 1$, pour toute fonction $f \in \mathcal{C}$ et pour des points x_1, \dots, x_n distincts de \mathbb{Z}^d , on a

$$\Delta(f_{x_1, \dots, x_n}) \leq \sum_{z \neq x_1, \dots, x_n} \delta_z(f) + \alpha \sum_{i=1}^n \delta_{x_i}(f) . \quad (113)$$

Démonstration. En sommant sur $z \in \mathbb{Z}^d$ le résultat du lemme précédent il vient

$$\Delta(f_x) \leq \sum_{z \neq x} \delta_z(f) + \alpha \delta_x(f) , \quad (114)$$

ce qui est bien ce que l'on veut prouver pour $n = 1$. Raisonnons maintenant par récurrence. En appliquant l'hypothèse de récurrence au rang $n - 1$ à la fonction f_{x_1} , il vient

$$\Delta(f_{x_1, \dots, x_n}) \leq \sum_{z \neq x_2, \dots, x_n} \delta_z(f_{x_1}) + \alpha \sum_{i=2}^n \delta_{x_i}(f_{x_1}) . \quad (115)$$

On applique maintenant le lemme précédent aux différents $\delta_{x_i}(f_{x_1})$:

$$\Delta(f_{x_1, \dots, x_n}) \leq \sum_{z \neq x_1, \dots, x_n} \delta_z(f) + \tanh(\beta J) \sum_{z \neq x_2, \dots, x_n} \mathbb{I}(z \in \partial x_1) \delta_{x_1}(f) \quad (116)$$

$$+ \alpha \sum_{i=2}^n [\delta_{x_i}(f) + \mathbb{I}(x_i \in \partial x_1) \tanh(\beta J) \delta_{x_1}(f)] \quad (117)$$

$$\leq \sum_{z \neq x_1, \dots, x_n} \delta_z(f) + \alpha \sum_{i=2}^n \delta_{x_i}(f) \quad (118)$$

$$+ \delta_{x_1}(f) \tanh(\beta J) \left[\sum_{z \neq x_2, \dots, x_n} \mathbb{I}(z \in \partial x_1) + \alpha \sum_{i=2}^n \mathbb{I}(x_i \in \partial x_1) \right] . \quad (119)$$

Comme $\alpha \leq 1$, l'expression entre crochets de la dernière ligne est plus petite que

$$\sum_{z \neq x_2, \dots, x_n} \mathbb{I}(z \in \partial x_1) + \sum_{i=2}^n \mathbb{I}(x_i \in \partial x_1) = \sum_z \mathbb{I}(z \in \partial x_1) = 2d , \quad (120)$$

ce qui conclut la preuve du lemme. \square

On peut maintenant finir la preuve du théorème : si $f \in \mathcal{C}_\Lambda$, avec $\Lambda = \{x_1, \dots, x_n\}$, en appliquant le dernier lemme et en notant que $\delta_z(f) = 0$ si $z \notin \Lambda$, il vient

$$\Delta(\mathbb{T}(f)) \leq \alpha \sum_{x \in \Lambda} \delta_x(f) = \alpha \Delta(f) . \quad (121)$$

Cette preuve, due à Dobrushin, se généralise bien au-delà du modèle d'Ising. Citons sans démonstration le résultat suivant :

Théorème 8. *Si l'interaction $\Phi \in \mathcal{I}_p$ et la température inverse β vérifient*

$$\sum_{X \ni 0} (|X| - 1) \beta \|\phi_X\|_\infty < 1 , \quad (122)$$

alors $|\mathcal{G}(\beta, \Phi)| = 1$, il n'existe qu'une mesure de Gibbs dans ce cas.

Appliqué au modèle d'Ising cette condition devient $2d\beta J < 1$, le résultat général est donc strictement moins fort dans ce cas que celui obtenu ci-dessus (avec la condition $2d \tanh(\beta J) < 1$ suffisante pour établir l'unicité) dans le cas particulier du modèle d'Ising.

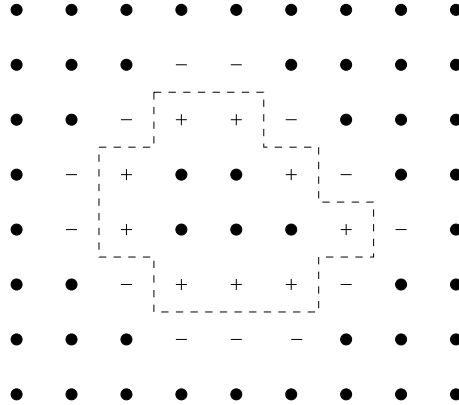
3.5.2 Argument de Peierls pour le modèle d'Ising

On va montrer que pour le modèle d'Ising, en l'absence de champ magnétique, il existe au moins deux mesures de Gibbs à basse température. Pour simplifier la discussion on se place à $d = 2$, l'argument se généralise sans trop de difficultés pour $d \geq 2$.

Dans cette section l'interaction Φ est donc définie par

$$\phi_X(\underline{\sigma}) = \begin{cases} -J\sigma_x\sigma_y & \text{si } X = \{x, y\} \text{ avec } \text{dist}(x, y) = 1 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (123)$$

A toute configuration $\underline{\sigma} \in \{-1, +1\}^{\mathbb{Z}^2}$ on associe l'ensemble $\Gamma(\underline{\sigma})$ des arêtes du réseau dual qui intersectent les arêtes $\langle xy \rangle$ du réseau initial dont les spins prennent des valeurs opposés, autrement dit les parois de domaine séparant les deux valeurs des spins. Parmi les quatre arêtes autour d'un sommet du réseau dual seulement 0, 2 ou 4 arêtes peuvent appartenir à Γ (-1) à la puissance le nombre d'arêtes présentes est le produit des $\sigma_x\sigma_y$ le long de la plaquette, toujours égal à un). Un tel ensemble $\Gamma(\underline{\sigma})$ d'arêtes du réseau dual peut se décomposer comme l'union de boucles autoévitantes (qui peuvent se toucher aux angles) de longueur finie et éventuellement de chemins autoévitants qui partent à l'infini. Réciproquement pour tout Γ vérifiant cette contrainte sur le nombre d'arêtes autour de chaque sommet du réseau dual il y a deux configurations telles que $\Gamma(\underline{\sigma}) = \Gamma$, reliées par la symétrie $\underline{\sigma} \leftrightarrow -\underline{\sigma}$. Pour γ une boucle autoévitante de longueur finie (que l'on appellera aussi contour, en pointillés sur la figure) on note $|\gamma|$ son nombre d'arêtes, $\Lambda(\gamma)$ la portion du réseau initial à l'intérieur de γ , $\partial_i\Lambda(\gamma)$ la frontière intérieure de $\Lambda(\gamma)$ (les sites notés $+$ sur la figure), et $\partial_e\Lambda(\gamma)$ sa frontière extérieure (les sites notés $-$ sur la figure).



A basse température on s'attend à ce que les configurations typiques des mesures de Gibbs soient proches de celles qui minimisent l'Hamiltonien, i.e. $\underline{\sigma} = \underline{\pm}$ et $\underline{\sigma} = \underline{-}$, autrement dit qu'il y ait peu de contours dans $\Gamma(\underline{\sigma})$.

Lemme 15. Si γ est un contour et $\mu \in \mathcal{G}_{\Lambda(\gamma)}(\beta, \Phi)$

$$\mu(\{\gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma})\}) \leq 2 e^{-2\beta J|\gamma|} . \quad (124)$$

Démonstration. Notons tout d'abord que l'évènement est bien mesurable, il ne dépend que des spins dans le volume fini $\Lambda(\gamma) \cup \partial_e\Lambda(\gamma)$. Plus précisément,

$$\begin{aligned} \mu(\{\gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma})\}) &= \mu(\{\underline{\sigma} \in \Sigma : \underline{\sigma}_{\partial_e\Lambda(\gamma)} = \underline{\pm}_{\partial_e\Lambda(\gamma)}, \underline{\sigma}_{\partial_i\Lambda(\gamma)} = \underline{-}_{\partial_i\Lambda(\gamma)}\}) \\ &+ \mu(\{\underline{\sigma} \in \Sigma : \underline{\sigma}_{\partial_e\Lambda(\gamma)} = \underline{-}_{\partial_e\Lambda(\gamma)}, \underline{\sigma}_{\partial_i\Lambda(\gamma)} = \underline{\pm}_{\partial_i\Lambda(\gamma)}\}) . \end{aligned} \quad (125)$$

En utilisant la condition DLR dans $\Lambda(\gamma)$, comme on l'avait fait à l'équation (73), la première ligne vaut

$$\begin{aligned} &\mu(\{\underline{\sigma} \in \Sigma : \underline{\sigma}_{\partial_e\Lambda(\gamma)} = \underline{\pm}_{\partial_e\Lambda(\gamma)}\}) \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda(\gamma) \setminus \partial_i\Lambda(\gamma)}} \eta_{\Lambda(\gamma)}((\underline{\sigma}_{\Lambda(\gamma) \setminus \partial_i\Lambda(\gamma)}, \underline{-}_{\partial_i\Lambda(\gamma)} | \underline{\pm}) \\ &= \mu(\{\underline{\sigma} \in \Sigma : \underline{\sigma}_{\partial_e\Lambda(\gamma)} = \underline{\pm}_{\partial_e\Lambda(\gamma)}\}) \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda'}} \eta_{\Lambda}((\underline{\sigma}_{\Lambda'}, \underline{-}_{\partial_i\Lambda} | \underline{\pm}) , \end{aligned} \quad (126)$$

où pour alléger les notations on a noté Λ au lieu de $\Lambda(\gamma)$ et $\Lambda' = \Lambda \setminus \partial_i \Lambda$. Explicitons $\eta_\Lambda(\cdot|\pm)$:

$$\eta_\Lambda((\underline{\sigma}'_{\Lambda'}, \underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda})|\pm) = \frac{e^{-\beta H((\underline{\sigma}'_{\Lambda'}, \underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda})) + \beta J \sum_{x \in \partial_i \Lambda} \sigma_x}}{Z}, \quad (127)$$

où H contient les interactions incluses dans Λ , et Z est défini par normalisation.

La probabilité que tous les spins de la frontière intérieure de Λ soit égaux à -1 , sachant que la condition aux bords sur la frontière extérieure est \pm , vaut donc

$$\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda'}} \eta_\Lambda((\underline{\sigma}_{\Lambda'}, \underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda})|\pm) = \frac{\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda'}} e^{-\beta H((\underline{\sigma}'_{\Lambda'}, \underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda})) - \beta J |\gamma|}}{\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda'}, \underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda}} e^{-\beta H((\underline{\sigma}'_{\Lambda'}, \underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda})) + \beta J \sum_{x \in \partial_i \Lambda} \sigma_x}} \quad (128)$$

$$\leq \frac{\sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda'}} e^{-\beta J \gamma \sum_{x \in \partial_i \Lambda} \sigma_x}}{e^{+\beta J |\gamma|} \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda'}} e^{-\beta H((\underline{\sigma}'_{\Lambda'}, \pm_{\partial_i \Lambda}))}} = e^{-2\beta J |\gamma|}, \quad (129)$$

en notant que $|\partial_i \Lambda(\gamma)| = |\gamma|$, puis en minorant la somme au dénominateur par sa valeur pour $\underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda} = \pm_{\partial_i \Lambda}$, et en remarquant finalement que par invariance de l'interaction sous la symétrie $\underline{\sigma} \leftrightarrow -\underline{\sigma}$ les deux fonctions de partition à l'intérieur de Λ avec $\underline{\sigma}_{\partial_i \Lambda} = \pm$ ou \mp sont égales. On conclut en utilisant le fait que la probabilité dans (126) d'avoir la condition aux bords égales à \pm est évidemment plus petite que 1, et en notant que par symétrie les deux lignes de (125) contribuent de la même façon. \square

Lemme 16. *Il existe β_* tel que $\forall \beta \geq \beta_*$, $\forall \Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$, $\forall \mu \in \mathcal{G}_\Lambda(\beta, \Phi)$,*

$$\mu(\{\exists \gamma : 0 \in \Lambda(\gamma), \gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma}), \Lambda(\gamma) \subset \Lambda\}) \leq \frac{1}{4}. \quad (130)$$

Démonstration. C'est un évènement mesurable car union dénombrable d'évènements mesurables. En utilisant l'union bound (inégalité de Boole), et le fait que μ est à l'équilibre dans Λ ,

$$\mu(\{\exists \gamma : 0 \in \Lambda(\gamma), \gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma}), \Lambda(\gamma) \subset \Lambda\}) \leq \sum_{\gamma, 0 \in \Lambda(\gamma), \Lambda(\gamma) \subset \Lambda} \mu(\{\gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma})\}) \leq \sum_{\gamma, 0 \in \Lambda(\gamma), \Lambda(\gamma) \subset \Lambda} 2 e^{-2\beta J |\gamma|}. \quad (131)$$

Or le nombre de boucles auto-évitantes incluses dans Λ , de longueur L et entourant l'origine est certainement plus petit que $4 \times 3^{L-1} \times (2L)^2$, car il y en a moins que le nombre de marches auto-évitantes de longueur L (elle-mêmes sont moins nombreuses que $4 \times 3^{L-1}$), avec un point de départ se situant nécessairement dans un carré de côté $2L$ centré sur l'origine. En oubliant la contrainte $\Lambda(\gamma) \subset \Lambda$ on ne fait qu'augmenter le majorant, on peut donc écrire

$$\mu(\{\exists \gamma : 0 \in \Lambda(\gamma), \gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma}), \Lambda(\gamma) \subset \Lambda\}) \leq \text{cste} \sum_{L=4}^{\infty} L^2 e^{L(\ln 3 - 2\beta J)} \quad (132)$$

En prenant β suffisamment grand on peut rendre la somme arbitrairement petite : $L^2 = e^{2 \ln L} \leq e^{2L}$, la somme est donc majorée par une constante fois

$$\sum_{L=4}^{\infty} e^{aL} = \frac{e^{4a}}{1 - e^a}, \quad (133)$$

qui tend vers 0 quand $a \rightarrow -\infty$, i.e. quand $\beta \rightarrow +\infty$. Le lemme reste vrai quand $1/4$ est remplacée par n'importe quelle constante positive. Notons aussi que le choix de β_* se fait indépendamment de Λ . \square

Théorème 9. $\forall \beta \geq \beta_*$ il n'y a pas unicité des mesures de Gibbs, i.e. $|\mathcal{G}(\beta, \Phi)| > 1$.

Démonstration. Supposons donc $\beta \geq \beta_*$, et considérons une suite $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^2$ telle que pour tout n $0 \in \Lambda_n$ et telle que $\mu_{\Lambda_n}^\pm$ converge (par compacité et en extrayant une sous-suite on peut toujours trouver une telle suite). On notera μ^+ la limite (faible) des $\mu_{\Lambda_n}^\pm$, qui appartient à $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ comme on l'a vu précédemment.

$\mu_{\Lambda_n}^\pm$ est à l'équilibre dans Λ_n , d'après le lemme précédent on a donc

$$\mu_{\Lambda_n}^\pm(\{\exists \gamma : 0 \in \Lambda(\gamma), \gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma}), \Lambda(\gamma) \subset \Lambda_n\}) \leq \frac{1}{4} \quad (134)$$

On a par ailleurs

$$\mu_{\Lambda_n}^\pm(\{\underline{\sigma} \in \Sigma : \sigma_0 = -1\}) \leq \mu_{\Lambda_n}^\pm(\{\exists \gamma : 0 \in \Lambda(\gamma), \gamma \subset \Gamma(\underline{\sigma}), \Lambda(\gamma) \subset \Lambda_n\}) : \quad (135)$$

sous cette mesure la condition aux bords est fixée à $+1$, un spin égal à -1 est nécessairement entouré par un contour. Ce n'est qu'une inégalité car si par exemple il y a exactement deux contours concentriques autour de l'origine alors $\sigma_0 = +1$. On en déduit

$$\mu_{\Lambda_n}^\pm(\sigma_0) = \mu_{\Lambda_n}^\pm(\{\sigma_0 = +1\}) - \mu_{\Lambda_n}^\pm(\{\sigma_0 = -1\}) = 1 - 2\mu_{\Lambda_n}^\pm(\{\sigma_0 = -1\}) \geq \frac{1}{2} \quad (136)$$

Comme $\underline{\sigma} \rightarrow \sigma_0$ est continue, par définition de la convergence faible,

$$\mu^+(\sigma_0) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_{\Lambda_n}^\pm(\sigma_0) \geq \frac{1}{2}. \quad (137)$$

De nouveau on aurait pu obtenir une borne inférieure sur l'aimantation arbitrairement proche de 1 en changeant la définition de β_* .

Pour conclure sur la coexistence de plus d'une mesure de Gibbs, il suffit de noter que si l'on construit de même μ^- comme une limite de $\mu_{\Lambda_n}^-$, avec aussi $\mu^- \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$, on obtiendrait de la même façon $\mu^-(\sigma_0) \leq -\frac{1}{2}$. Donc nécessairement $\mu^+ \neq \mu^-$ ($\underline{\sigma} \rightarrow \sigma_0$ est continue donc les aimantations moyennes à l'origine coïnciderait si $\mu^+ = \mu^-$). \square

Cette méthode des contours pour la preuve de la non-unicité des mesures de Gibbs à basse température se généralise pour des modèles différents de celui d'Ising. La généralisation porte le nom de théorie de Pirogov-Sinai.

3.6 Extrémalité et trivialité à l'infini

Lemme 17. $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ est un ensemble convexe.

Démonstration. C'est trivial, en effet si μ_1 et μ_2 sont deux mesures de probabilité $\alpha\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2$ en est une autre, et si les conditions DLR sont vérifiées par μ_1 et μ_2 elles le sont aussi par $\alpha\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2$. \square

Rappelons que les éléments extrémaux d'un ensemble convexe sont ceux qui n'admettent pas de décomposition non-triviale de la forme $\alpha\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2$ (avec $\mu_1 \neq \mu_2$ et $\alpha \in]0, 1[$). Par exemple un segment admet deux éléments extrémaux, ses extrémités. On va voir que les éléments extrémaux de $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ jouent un rôle très important dans la théorie des mesures de Gibbs.

La tribu asymptotique (à l'infini) est $\mathcal{F}_\infty = \bigcap_{\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d} \mathcal{F}_{\Lambda^c}$, c'est bien une sous-tribu de \mathcal{F} . Les fonctions mesurables par rapport à \mathcal{F}_∞ sont celles qui ne sont pas modifiées si on change la valeur des spins sur un nombre fini de sites. Considérons par exemple dans le cas du modèle d'Ising la fonction :

$$m(\underline{\sigma}) = \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{x \in \Lambda_n} \sigma_x, \quad \text{où } \Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d, \quad (138)$$

qui correspond à la densité d'aimantation. Comme pour tout Λ fini on peut écrire

$$m(\underline{\sigma}) = \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{x \in \Lambda_n \setminus \Lambda} \sigma_x, \quad \text{puisque } \frac{|\Lambda|}{|\Lambda_n|} \rightarrow 0, \quad (139)$$

m est bien \mathcal{F}_∞ -mesurable. Plus généralement les fonctions mesurables par rapport à \mathcal{F}_∞ correspondent aux observables macroscopiques d'un système physique, qui ne doivent pas changer si on modifie un nombre fini (arbitrairement grand) de variables d'un système infini.

On dit qu'une mesure $\mu \in \mathcal{M}$ est triviale (ou grossière) à l'infini ssi pour tout évènement $A \in \mathcal{F}_\infty$ on a $\mu(A) = 0$ ou $\mu(A) = 1$. Contrairement à ce qui se passe pour des variables indépendantes (loi du 0-1 de Kolmogorov), les mesures de Gibbs ne sont pas forcément triviales à l'infini. On va démontrer dans la suite que ce sont les éléments extrémaux de $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ qui sont triviaux à l'infini.

Lemme 18. *Si $\mu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$, $B \in \mathcal{F}_\infty$ avec $\mu(B) \neq 0$, alors la mesure de probabilité $\mu(\cdot|B)$ définie par*

$$\mu(A|B) = \frac{\mu(A \cap B)}{\mu(B)} \quad (140)$$

est elle aussi une mesure de Gibbs, i.e. $\mu(\cdot|B) \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$.

Démonstration. Intuitivement, B est indépendant de ce qui se passe dans tout volume fini, alors que les conditions DLR expriment la notion d'équilibre dans les volumes finis.

Plus formellement, on peut d'abord voir facilement que $\mu(\cdot|B)$ est bien une mesure de probabilité. Soit $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$, montrons que $\mu(\cdot|B) \in \mathcal{G}_\Lambda(\beta, \Phi)$. Comme $B \in \mathcal{F}_\infty \subset \mathcal{F}_{\Lambda^c}$, la fonction caractéristique de B est indépendante de $\underline{\sigma}_\Lambda$, d'où $\forall A \in \mathcal{F}$, en utilisant la condition DLR sur μ ,

$$\mu(A|B) = \frac{\mu(A \cap B)}{\mu(B)} = \frac{1}{\mu(B)} \int \mu(d\underline{\tau}) \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\underline{\tau}) \mathbb{I}((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}) \in A) \mathbb{I}((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}) \in B) \quad (141)$$

$$= \int \mu(d\underline{\tau}|B) \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\underline{\tau}) \mathbb{I}((\underline{\sigma}_\Lambda, \underline{\tau}_{\Lambda^c}) \in A), \quad (142)$$

ce qui est bien la condition DLR pour $\mu(\cdot|B)$ dans Λ . Comme c'est vrai pour toutes les parties finies Λ , on a bien $\mu(\cdot|B) \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$. \square

Lemme 19. *Deux mesures de Gibbs sont égales si et seulement si elles coïncident sur \mathcal{F}_∞ .*

Démonstration. L'implication directe est triviale. Supposons que μ_1, μ_2 sont deux éléments de $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ avec $\mu_1(A) = \mu_2(A)$ pour tout $A \in \mathcal{F}_\infty$, montrons que $\mu_1 = \mu_2$, en montrant que pour tout $f \in \mathcal{C}$ on a $\mu_1(f) = \mu_2(f)$. Comme μ_1 et μ_2 sont deux mesures de Gibbs, $\mu_1(f_\Lambda) = \mu_1(f)$ et $\mu_2(f_\Lambda) = \mu_2(f)$ pour tout Λ fini. Considérons maintenant une suite $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$. On a évidemment $\mu_1(f) = \mu_1(f_{\Lambda_n})$ pour tout n , et donc $\mu_1(f) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_1(f_{\Lambda_n})$. Il suffit donc pour conclure de montrer que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_1(f_{\Lambda_n}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_2(f_{\Lambda_n}). \quad (143)$$

C'est naturel intuitivement, car f_{Λ_n} est $\mathcal{F}_{\Lambda_n^c}$ -mesurable, comme $\Lambda_n \nearrow \mathbb{Z}^d$ à la limite les f_{Λ_n} sont \mathcal{F}_∞ -mesurables, tribu sur laquelle par hypothèse μ_1 et μ_2 coïncide.

Pour justifier rigoureusement cette égalité on peut utiliser le fait que f_{Λ_n} est une martingale rétrograde bornée pour μ_1 et μ_2 , qui donc converge dans L^1 vers f_∞ , une fonction \mathcal{F}_∞ -mesurable. Comme μ_1 et μ_2 sont égales sur \mathcal{F}_∞ ,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_1(f_{\Lambda_n}) = \mu_1(f_\infty) = \mu_2(f_\infty) = \lim_{n \rightarrow \infty} \mu_2(f_{\Lambda_n}). \quad (144)$$

Pour justifier le caractère de martingale rétrograde, notons que comme $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \dots$ on a, $\mathcal{F}_{\Lambda_1^c} \supset \mathcal{F}_{\Lambda_2^c} \supset \dots$, et $\mathcal{F}_\infty = \bigcap_n \mathcal{F}_{\Lambda_n^c}$ puisque Λ_n envahit \mathbb{Z}^d . De plus f_{Λ_n} est adapté à cette filtration rétrograde, et si $n \geq m$ on a $f_{\Lambda_n} = \mu(f_{\Lambda_m} | \mathcal{F}_{\Lambda_n^c})$ dès que μ est une mesure de Gibbs. Autrement dit, si $\Lambda \subset \Delta$, $\mu(f_\Lambda | \mathcal{F}_{\Delta^c}) = f_\Delta$. Mais comme μ est une mesure de Gibbs, $\mu(g | \mathcal{F}_{\Delta^c}) = g_\Delta$ pour toute fonction g , ce qui revient à $(f_\Lambda)_\Delta = f_\Delta$ quand $\Lambda \subset \Delta$, ce qu'on a prouvé au moment de montrer $\mathcal{G}_\Delta \subset \mathcal{G}_\Lambda$. \square

Théorème 10. (a) *Une mesure de Gibbs $\mu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$ est extrémale (dans $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$) si et seulement si elle est triviale à l'infini.*

(b) *Deux mesures de Gibbs μ_1, μ_2 extrémales distinctes sont mutuellement singulières (i.e. $\exists A \in \mathcal{F}$ avec $\mu_1(A) = 1, \mu_2(A) = 0$).*

Démonstration. (a) Supposons que μ soit une mesure de Gibbs non triviale à l'infini, il existe donc $B \in \mathcal{F}_\infty$ avec $\mu(B) = \alpha \in]0, 1[$. On peut décomposer tout évènement $A \in \mathcal{F}$ comme $(A \cap B) \cup (A \cap B^c)$, et donc $\mu = \alpha\mu(\cdot|B) + (1-\alpha)\mu(\cdot|B^c)$ en utilisant les notations du lemme précédent. Comme $\mu(B|B) = 1 \neq \mu(B|B^c) = 0$ la décomposition de μ est une décomposition linéaire non-triviale de deux éléments de $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ (d'après le lemme précédent), donc μ n'est pas extrémale.

Supposons maintenant que μ n'est pas extrémale, i.e. $\mu = \alpha\mu_1 + (1-\alpha)\mu_2$ avec $\alpha \in]0, 1[$, $\mu_{1,2}$ deux éléments distincts de $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$. Comme elles ne peuvent coïncider sur \mathcal{F}_∞ d'après le lemme (19), il existe $B \in \mathcal{F}_\infty$ avec $\mu_1(B) \neq \mu_2(B)$, et alors $\mu(B)$ ne peut être dans $\{0, 1\}$.

(b) μ_1 et μ_2 étant extrémales elles sont triviales à l'infini, i.e. $\forall A \in \mathcal{F}_\infty$ on a $\mu_1(A) \in \{0, 1\}$ et $\mu_2(A) \in \{0, 1\}$. Mais comme elles sont distinctes elles ne peuvent coïncider sur tous les A de \mathcal{F}_∞ , il existe donc $A \in \mathcal{F}_\infty$ avec $\mu_1(A) = 1, \mu_2(A) = 0$. □

Ce théorème relie deux notions a priori très différentes : l'extrémalité de μ concerne la "position" de μ au sein de la structure d'espace convexe de \mathcal{G} , alors que la trivialité à l'infini dit quelque chose sur μ elle-même (plus précisément sur la structure de ses corrélations spatiales, comme on va le voir).

On qualifie d'"états purs" les éléments extrémaux de $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$: comme elles sont triviales à l'infini les observables macroscopiques (dans le sens défini ci-dessus) sont presque sûrement constantes. Or si l'on prend un échantillon macroscopique d'un matériau dans un état bien défini, on utilise une description probabiliste au niveau microscopique, mais toutes les grandeurs mesurables macroscopiquement sont déterministes. En cas de coexistence de phase, on peut notamment penser au cas de l'eau à 0 degré, les états purs correspondent aux états solide (glace) et liquide de l'eau, pour lesquels la densité volumique prend deux valeurs déterministes distinctes. La densité volumique est alors un "paramètre d'ordre", comme l'aimantation pour le modèle d'Ising.

Revenons maintenant sur le lien entre trivialité à l'infini et corrélations spatiales d'une mesure. L'exemple le plus simple de mesure triviale à l'infini est une mesure produit (cf loi du 0/1 de Kolmogorov), pour laquelle il n'y a en effet aucune corrélation. En fait les mesures triviales à l'infini sont celles pour lesquelles les corrélations décroissent à grande distance, dans le sens suivant :

Lemme 20. $\mu \in \mathcal{M}$ est triviale à l'infini si et seulement si

$$\forall A \in \mathcal{F}, \quad \lim_{\Lambda \nearrow \mathbb{Z}^d} \sup_{B \in \mathcal{F}_{\Lambda^c}} |\mu(A \cap B) - \mu(A)\mu(B)| = 0 \quad (145)$$

On ne prouvera pas ce lemme, on se contentera d'en donner une conséquence et l'idée de la preuve de ce cas particulier :

Lemme 21. Si μ est une mesure sur $\{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$ triviale à l'infini, $x \in \mathbb{Z}^d$, alors

$$\mu(\sigma_x \sigma_y) - \mu(\sigma_x)\mu(\sigma_y) \xrightarrow{y \rightarrow \infty} 0, \quad (146)$$

i.e. les spins décorréllent à grande distance.

Démonstration. Notons $f(\underline{\sigma}) = \sigma_x - \mu(\sigma_x)$, de telle manière que $\mu(f) = 0$. $\mu(f|\mathcal{F}_\infty)$ est presque sûrement constante puisque μ est triviale à l'infini, donc presque sûrement nulle. Pour tout $\epsilon > 0$, en utilisant le théorème de convergence pour les martingales rétrogrades, on peut trouver $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ telle que la norme L^1 de $\mu(f|\mathcal{F}_{\Lambda^c})$ soit $\leq \epsilon$. Alors il suffit de prendre y suffisamment éloigné de x pour que l'on ait $y \notin \Lambda$, de telle sorte que la fonction notée $g(\underline{\sigma}) = \sigma_y$ soit \mathcal{F}_{Λ^c} mesurable. Alors

$$|\mu(fg)| = |\mu(\mu(fg|\mathcal{F}_{\Lambda^c}))| = |\mu(g\mu(f|\mathcal{F}_{\Lambda^c}))| \leq \epsilon, \quad (147)$$

puisque $|g| \leq 1$ et d'après la borne sur la norme de $\mu(f|\mathcal{F}_{\Lambda^c})$. Par construction $\mu(fg)$ est égale à la fonction de corrélation dans le membre de gauche de (146). □

Un autre résultat général, que l'on ne démontrera pas ici, montre que les éléments extrémaux de $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ sont exactement les mesures de Gibbs que l'on peut obtenir à partir de limites thermodynamiques de mesures avec conditions aux bords fixées (celles que l'on a utilisé pour montrer que $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ était non-vide).

Considérons maintenant les mesures de Gibbs pour le modèle d'Ising avec interactions à plus proches voisins, en absence de champ magnétique ($h = 0$).

- A haute température il n'y a qu'une mesure de Gibbs μ , qui est forcément extrémale, et donc triviale à l'infini. Par symétrie $\mu(\sigma_x) = 0$, on a donc $\mu(\sigma_x \sigma_y) \rightarrow 0$ quand la distance entre x et y diverge.
- A basse température on a deux mesures extrémales μ^+ et μ^- , avec l'aimantation spontanée $m_{\text{sp}} = \mu^+(\sigma_x) = -\mu^-(\sigma_x) > 0$. Ces mesures étant extrémales on a $\mu^+(\sigma_x \sigma_y) \rightarrow \mu^+(\sigma_x)\mu^+(\sigma_y) = m_{\text{sp}}^2$ et $\mu^-(\sigma_x \sigma_y) \rightarrow \mu^-(\sigma_x)\mu^-(\sigma_y) = m_{\text{sp}}^2$ à grande distance. Insistons sur le fait qu'une combinaison linéaire de μ^+ et μ^- ne vérifie plus cette décorrélation à grande distance. En effet, si $\mu = \alpha\mu^+ + (1 - \alpha)\mu^-$,

$$\begin{aligned} \mu(\sigma_x) = \mu(\sigma_y) &= \alpha m_{\text{sp}} - (1 - \alpha)m_{\text{sp}} = (2\alpha - 1)m_{\text{sp}}, & \mu(\sigma_x)\mu(\sigma_y) &= m_{\text{sp}}^2(2\alpha - 1)^2, \\ \mu(\sigma_x \sigma_y) - \mu(\sigma_x)\mu(\sigma_y) &\rightarrow \alpha m_{\text{sp}}^2 + (1 - \alpha)m_{\text{sp}}^2 - m_{\text{sp}}^2(2\alpha - 1)^2 = 4\alpha(1 - \alpha)m_{\text{sp}}^2. \end{aligned} \quad (148)$$

Cette dernière quantité ne s'annule donc que pour $\alpha = 0$ ou 1 .

Pour des interactions à courte portée on s'attend à ce que la fonction de corrélation au sein d'une mesure triviale à l'infini s'annule à grande distance de manière exponentielle, avec une longueur de corrélation finie (mais ce n'est prouvé que dans le régime d'unicité, à haute température). Il est alors assez naturel de s'attendre à ce que la longueur de corrélation diverge au point critique : on doit passer d'une situation où la mesure de Gibbs est unique à une situation où il y a au moins deux mesures extrémales distinctes. Si la longueur de corrélation était toujours finie cette bifurcation serait difficile à interpréter.

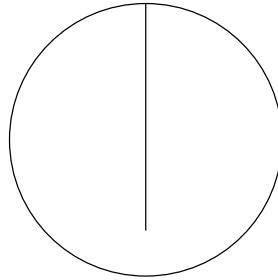
$\mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Phi)$ est lui aussi un espace convexe, on peut donc se demander comment sont caractérisés les éléments extrémaux de \mathcal{G}_{inv} . La notion de trivialité à l'infini doit être remplacé par la notion moins forte d'ergodicité.

Définition 7. Une mesure invariante par translation $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$ est dite ergodique si $\mu(A) \in \{0, 1\}$ pour tous les événements A invariants par translation.

On peut montrer que si $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$ est triviale à l'infini alors elle est ergodique (c'est ce que Jérémie a prouvé dans le cas d'une mesure produit, durant le cours sur la percolation).

Théorème 11. Une mesure de Gibbs $\mu \in \mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Phi)$ est extrémale (dans $\mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Phi)$) si et seulement si elle est ergodique.

Si μ est extrémale dans \mathcal{G} et invariante par translation alors elle est extrémale dans \mathcal{G}_{inv} : on ne peut pas l'écrire comme $\alpha\mu_1 + (1 - \alpha)\mu_2$ avec $\mu_{1,2} \in \mathcal{G}$, alors a fortiori on ne peut trouver une telle décomposition avec $\mu_{1,2} \in \mathcal{G}_{\text{inv}}$. Mais la réciproque est fautive : une mesure extrémale dans \mathcal{G}_{inv} peut admettre une décomposition non-triviale dans \mathcal{G} . Donc $\text{ext}(\mathcal{G}) \cap \mathcal{M}_{\text{inv}} \subset \text{ext}(\mathcal{G}_{\text{inv}})$ mais $\text{ext}(\mathcal{G}) \cap \mathcal{M}_{\text{inv}} \neq \text{ext}(\mathcal{G}_{\text{inv}})$ car l'inclusion réciproque est fautive.



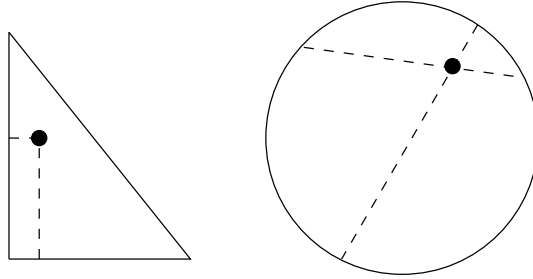
Très schématiquement, sur cet exemple le disque représente un espace convexe (penser à \mathcal{G}) qui contient le segment, lui aussi convexe (penser à \mathcal{G}_{inv}). Les éléments extrêmes du segment sont ses deux extrémités, ceux du disque sa frontière. On voit que sur les deux éléments extrémaux par rapport au segment un seul des deux est extrême par rapport au disque.

On peut donner un exemple avec un modèle antiferromagnétique (Ising avec $J < 0, h = 0$) à basse température, on construit μ_1 et μ_2 en prenant la limite thermodynamique des mesures avec des conditions aux bords fixées aux 2 configuration alternées, i.e. $\sigma_x = (-1)^{x_1 + \dots + x_d}$ et $\sigma_x = -(-1)^{x_1 + \dots + x_d}$. Alors μ_1 et μ_2 sont extrêmes dans \mathcal{G} , non-invariantes par translation. Considérons $\mu = \frac{1}{2}\mu_1 + \frac{1}{2}\mu_2$. Alors $\mu \in \mathcal{G}_{\text{inv}}$ et μ est extrême dans \mathcal{G}_{inv} , alors qu'elle ne l'est évidemment pas dans \mathcal{G} .

Pour le modèle d'Ising :

- à $d = 2$,
 - à haute température, il existe une seule mesure de Gibbs, qui est donc invariante par translation et extrémale (dans \mathcal{G} et dans $\mathcal{G}_{\text{inv}} = \mathcal{G}$), et donc triviale à l'infini.
 - à basse température, il existe exactement deux mesures de Gibbs extrémales, μ^+ et μ^- construites par les limites thermodynamiques avec les conditions aux bords $\underline{+}$ et $\underline{-}$. On a de plus $\mathcal{G}_{\text{inv}} = \mathcal{G}$.
- à $d \geq 3$,
 - à haute température, la situation est la même qu'à $d = 2$.
 - à basse température par contre la situation est plus riche. Les deux mesures μ^+ et μ^- constituent les deux seuls éléments extrémaux de \mathcal{G}_{inv} . Par contre \mathcal{G} est strictement plus grand que \mathcal{G}_{inv} , les conditions aux bords avec une paroi de domaine (par exemple $\underline{+}$ avec $\tau_x = +1$ si $x_1 > 0$, $\tau_x = -1$ si $x_1 \leq 0$) conduisent à la limite thermodynamique à des mesures de Gibbs extrémales dans \mathcal{G} , non invariantes par translation, distinctes de μ^+ et μ^- . Ces dernières sont toutefois des points extrémaux de \mathcal{G} . La classification complète des éléments extrémaux de \mathcal{G} n'est pas achevée.

$\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ est un simplexe (Choquet), i.e. décomposition en combinaison linéaire d'éléments extrémaux est unique, exemple dans le plan, triangle est un simplexe, cercle (ou même carré) ne l'est pas. Le cercle a un nombre infini d'éléments extrémaux, le carré que 4, mais avec une non-unicité de la décomposition d'un point sur les éléments extrémaux.



En fait $\mathcal{M}, \mathcal{M}_{\text{inv}}, \mathcal{G}$ et \mathcal{G}_{inv} sont des simplexes. Les points extrêmes dans \mathcal{M} sont les Dirac.

4 Principe variationnel

Dans les deux chapitres précédents on a suivi deux approches complètement différentes pour l'étude d'un système infini muni d'une interaction Φ . D'une part on s'est intéressé seulement aux quantités thermodynamiques, et en particulier à l'existence de la densité d'énergie libre $f(\beta, \Phi)$. De l'autre on a défini et discuté les propriétés de l'ensemble $\mathcal{G}(\beta, \Phi)$ des mesures de Gibbs, en se basant uniquement sur les propriétés des probabilités des configurations microscopiques. On va voir dans ce chapitre qu'en fait ces deux approches sont intimement reliées par un principe variationnel. Rappelons en effet les résultats établis au TD 2 pour des modèles avec un nombre fini de degrés de liberté. On avait introduit l'énergie libre variationnelle de Gibbs, fonction d'une loi de probabilité μ sur l'ensemble des configurations, selon

$$F[\mu] = \sum_{\underline{\sigma}} \mu(\underline{\sigma}) H(\underline{\sigma}) - \frac{1}{\beta} S[\mu] , \quad (149)$$

où $H(\underline{\sigma})$ est l'Hamiltonien du système, et $S[\mu]$ l'entropie de Shannon de la loi de probabilité μ . On avait alors montré que l'énergie libre canonique $F_c = -\frac{1}{\beta} \ln Z$ et la loi de probabilité de Gibbs-Boltzmann $\mu_c(\underline{\sigma}) = e^{-\beta H(\underline{\sigma})}/Z$ pouvait être caractérisée de la façon suivante :

$$F_c = \min_{\mu} F[\mu] , \quad (150)$$

et

$$\mu_c = \operatorname{argmin} F[\mu] , \quad \text{autrement dit } \mu = \mu_c \Leftrightarrow F[\mu] = F_c . \quad (151)$$

On va voir dans quelle mesure ces résultats se généralisent au cas des systèmes infinis discutés dans ce cours, en s'appuyant aussi sur les principes d'analyse convexe discutés au TD 3 (en admettant leurs généralisations fonctionnelles).

La première étape consiste à définir l'énergie libre de Gibbs pour une mesure $\mu \in \mathcal{M}$ sur les lois de probabilités de l'espace infini Σ .

Définition 8. On définit la densité d'entropie (de Shannon) d'une mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{M}$ dans le volume fini $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ selon

$$s_{\Lambda}(\mu) = \frac{1}{|\Lambda|} S[\mu_{\Lambda}] = -\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\underline{\sigma}_{\Lambda}} \mu_{\Lambda}(\underline{\sigma}_{\Lambda}) \ln \mu_{\Lambda}(\underline{\sigma}_{\Lambda}) , \quad (152)$$

où μ_{Λ} est la loi marginale de μ , et l'on utilise la convention $0 \ln 0 = 0$.

Le lemme de Fekete admet une généralisation multidimensionnelle :

Lemme 22. Soit u_{n_1, \dots, n_d} sous-additive dans chacune de ses variables indépendamment : pour tout $i \in [1, d]$, on a $u_{n_1, \dots, n_{i-1}, n_i+m_i, n_{i+1}, \dots, n_d} \leq u_{n_1, \dots, n_{i-1}, n_i, n_{i+1}, \dots, n_d} + u_{n_1, \dots, n_{i-1}, m_i, n_{i+1}, \dots, n_d}$. Alors

$$\lim_{n_1, \dots, n_d \rightarrow \infty} \frac{u_{n_1, \dots, n_d}}{n_1 \dots n_d} \text{ existe et vaut } \inf_{n_1, \dots, n_d \geq 1} \frac{u_{n_1, \dots, n_d}}{n_1 \dots n_d} , \quad (153)$$

les d limites $n_i \rightarrow \infty$ pouvant être prises dans n'importe quel ordre.

Démonstration. Fixons $p_1, \dots, p_d \geq 1$, notons pour $i = 1, \dots, d$, $n_i = a_i p_i + b_i$, avec $a_i = \lfloor \frac{n_i}{p_i} \rfloor$ et $b_i \in [0, p_i - 1]$. En utilisant la sous-additivité successivement pour chaque coordonnée,

$$u_{n_1, \dots, n_d} \leq a_1 u_{p_1, n_2, \dots, n_d} + u_{b_1, n_2, \dots, n_d} \quad (154)$$

$$\leq a_1 a_2 u_{p_1, p_2, n_3, \dots, n_d} + a_1 u_{p_1, b_2, n_3, \dots, n_d} + a_2 u_{b_1, p_2, n_3, \dots, n_d} + u_{b_1, b_2, n_3, \dots, n_d} \quad (155)$$

$$\leq \dots \quad (156)$$

$$\leq a_1 \dots a_d u_{p_1, \dots, p_d} + \dots , \quad (157)$$

où les termes non-écrits dans la dernière ligne contiennent au maximum un produit de $d-1$ a_i multiplié par un terme borné si p_1, \dots, p_d est fixé. Il vient donc

$$\limsup_{n_1, \dots, n_d \rightarrow \infty} \frac{u_{n_1, \dots, n_d}}{n_1 \dots n_d} \leq \frac{u_{p_1, \dots, p_d}}{p_1 \dots p_d} \quad (158)$$

quand tous les n_i vont à l'infini, à n'importe quelle vitesse l'un par rapport à l'autre. Comme c'est vrai quelque soit (p_1, \dots, p_d) le limsup est plus petit que l'inf, donc la limite existe et est égale à l'inf. \square

Lemme 23. *Pour une mesure de probabilité invariante par translation, $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$, la limite $s(\mu) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} s_\Lambda(\mu)$ existe quand $\Lambda \rightarrow \infty$ est prise le long d'une suite de rectangles. La limite vérifie les propriétés suivantes :*

- $s(\mu) \in [0, \ln |\chi|]$
- la fonction $\mu \rightarrow s(\mu)$ de \mathcal{M}_{inv} dans \mathbb{R} est affine, $s(\alpha\mu + (1-\alpha)\nu) = \alpha s(\mu) + (1-\alpha)s(\nu)$, $\forall \mu, \nu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}, \alpha \in [0, 1]$.

Démonstration. Prouvons d'abord l'existence de la limite. Pour $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$, notons $S_{L_1, \dots, L_d} = S_\Lambda[\mu]$ où Λ est un rectangle de \mathbb{Z}^d de côtés L_1, \dots, L_d ; comme μ est invariante par translation la position du rectangle est arbitraire. Montrons que S_{L_1, \dots, L_d} est sous-additive. Pour une direction $i \in \{1, \dots, d\}$ on note Δ un rectangle de côtés $L_1, \dots, L_{i-1}, L_i + L'_i, L_{i+1}, \dots, L_d$, décomposé en deux rectangles disjoints Λ de côtés $L_1, \dots, L_{i-1}, L_i, L_{i+1}, \dots, L_d$ et Λ' de côtés $L_1, \dots, L_{i-1}, L'_i, L_{i+1}, \dots, L_d$. D'après les résultats du TD3, $S_\Delta[\mu] \leq S_\Lambda[\mu] + S_{\Lambda'}[\mu]$ (il suffit de calculer la distance de Kullback-Leibler entre μ_Δ et $\mu_\Lambda \mu_{\Lambda'}$), ce qui est précisément la sous-additivité au sens du lemme de Fekete multidimensionnel, qui permet donc de conclure en l'existence de la limite.

Remarquons qu'en fait la limite existe pour toute suite $\Lambda \rightarrow \infty$ au sens de van Hove, pas seulement pour les rectangles. La preuve générale repose sur une inégalité un peu plus forte sur $S[\mu]$,

$$S_{\Lambda \cup \Lambda'}[\mu] \leq S_\Lambda[\mu] + S_{\Lambda'}[\mu] - S_{\Lambda \cap \Lambda'}[\mu] . \quad (159)$$

Pour prouver les deux propriétés :

- on a vu en TD que $S_\Lambda[\mu] \in [0, |\Lambda| \ln |\chi|]$, donc $s_\Lambda(\mu) \in [0, \ln |\chi|]$, et la limite quand $\Lambda \rightarrow \infty$ reste dans cet intervalle.
- on a aussi démontré que S_Λ était concave et "presque convexe", i.e.

$$\alpha S_\Lambda[\mu] + (1-\alpha)S_\Lambda[\nu] \leq S_\Lambda[\alpha\mu + (1-\alpha)\nu] \leq \alpha S_\Lambda[\mu] + (1-\alpha)S_\Lambda[\nu] - \alpha \ln \alpha - (1-\alpha) \ln(1-\alpha) . \quad (160)$$

En divisant par $|\Lambda|$ les termes correctifs de la borne supérieure sont plus petits que $(\ln 2)/|\Lambda|$ quelque soit α , ils disparaissent donc pour $\Lambda \rightarrow \infty$, la limite $s(\mu)$ est affine. \square

Définition 9. *A une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_g$ on associe la fonction de Σ dans \mathbb{R}*

$$u_\Phi = \sum_{X \ni 0} \frac{\phi_X}{|X|} . \quad (161)$$

Par définition de \mathcal{I}_g la somme converge normalement, u_Φ est donc continue. De plus $\Phi \rightarrow u_\Phi$ est une application linéaire de \mathcal{I}_g dans \mathcal{C} .

Lemme 24. *Pour $\Phi \in \mathcal{I}_g$ et $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$,*

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^\Phi) = \mu(u_\Phi) , \quad (162)$$

où la limite peut être prise au sens de Van Hove, et H_Λ^Φ est l'Hamiltonien aux conditions aux bords libres dans Λ pour l'interaction Φ .

On voit donc que u_Φ représente la contribution énergétique pour une variable (ici choisi à l'origine pour simplifier). Par exemple pour Ising, $u(\underline{\sigma}) = -h\sigma_0 - \frac{J}{2} \sum_{x \in \partial 0} \sigma_x \sigma_0$, le facteur 1/2 permet d'éviter le double comptage des liens autour de l'origine.

Démonstration. Supposons pour commencer que Φ soit de portée finie r , et considérons un volume fini Λ . Alors

$$H_\Lambda^\Phi = \sum_{X \subset \Lambda} \phi_X = \sum_{X \subset \Lambda} \sum_{x \in X} \frac{\phi_X}{|X|} = \sum_{x \in \Lambda \setminus \partial_r \Lambda} \sum_{X \ni x} \frac{\phi_X}{|X|} + H_{\partial_r \Lambda}^\Phi, \quad (163)$$

où $\partial_r \Lambda$ contient les sommets de Λ à distance plus petite que r de Λ^c . En utilisant l'invariance par translation on a

$$\frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^\Phi) = \mu(u_\Phi) - \frac{|\partial_r \Lambda|}{|\Lambda|} \mu(u_\Phi) + \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_{\partial_r \Lambda}^\Phi). \quad (164)$$

Comme $\Lambda \rightarrow \infty$ au sens de van Hove $|\partial_r \Lambda| = o(|\Lambda|)$, les deux derniers termes disparaissent donc à la limite (rappelons que d'après le lemme 1 $\|H_{\partial_r \Lambda}\|_\infty \leq |\partial_r \Lambda| \|\Phi\|_g$).

On peut maintenant généraliser le résultat en utilisant la densité des interactions à portée finie dans \mathcal{I}_g , comme on l'avait fait pour prouver le théorème 3. Considérons donc $\Phi \in \mathcal{I}_g$, $\epsilon > 0$ et r suffisamment grand pour que $\|\Phi - \Phi^{(r)}\|_g \leq \frac{\epsilon}{2}$, où $\Phi^{(r)}$ est la troncation de portée r de Φ définie dans la preuve du théorème 3. Alors

$$\|H_\Lambda^\Phi - H_\Lambda^{\Phi^{(r)}}\|_\infty = \|H_\Lambda^{\Phi - \Phi^{(r)}}\|_\infty \leq |\Lambda| \|\Phi - \Phi^{(r)}\|_g \leq |\Lambda| \frac{\epsilon}{2} \Rightarrow \left| \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^\Phi) - \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^{\Phi^{(r)}}) \right| \leq \frac{\epsilon}{2}, \quad (165)$$

et

$$\|u_\Phi - u_{\Phi^{(r)}}\|_\infty = \|u_{\Phi - \Phi^{(r)}}\|_\infty \leq \|\Phi - \Phi^{(r)}\|_g \leq \frac{\epsilon}{2} \Rightarrow |\mu(u_\Phi) - \mu(u_{\Phi^{(r)}})| \leq \frac{\epsilon}{2}. \quad (166)$$

Donc

$$\begin{aligned} \left| \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^\Phi) - \mu(u_\Phi) \right| &\leq \left| \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^\Phi) - \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^{\Phi^{(r)}}) \right| + \left| \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^{\Phi^{(r)}}) - \mu(u_{\Phi^{(r)}}) \right| + |\mu(u_\Phi) - \mu(u_{\Phi^{(r)}})| \\ &\leq \epsilon + \left| \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^{\Phi^{(r)}}) - \mu(u_{\Phi^{(r)}}) \right|. \end{aligned} \quad (167)$$

En passant à la limite quand $\Lambda \rightarrow \infty$ le dernier terme du membre de droite disparaît, comme ϵ est arbitraire on peut conclure la preuve. \square

On est désormais en mesure de prouver la généralisation de (150) au cas des systèmes infinis :

Théorème 12. *Pour tout $\Phi \in \mathcal{I}_g$ et pour tout β , la densité d'énergie libre peut s'exprimer comme*

$$f(\beta, \Phi) = \inf_{\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}} \left[\mu(u_\Phi) - \frac{1}{\beta} s(\mu) \right]. \quad (168)$$

Démonstration. Prouvons d'abord que si $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$, alors

$$f(\beta, \Phi) \leq \mu(u_\Phi) - \frac{1}{\beta} s(\mu). \quad (169)$$

C'est une simple généralisation du résultat obtenu en TD pour un volume fini. Reproduisons ici une des preuves possibles :

$$Z_\Lambda(\beta, \Phi) = \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} e^{-\beta H_\Lambda^\Phi(\underline{\sigma}_\Lambda)} = \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \mu_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda) e^{-\beta H_\Lambda^\Phi(\underline{\sigma}_\Lambda) - \ln \mu_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda)} \quad (170)$$

$$\geq \exp \left[-\beta \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \mu(\underline{\sigma}_\Lambda) H_\Lambda^\Phi(\underline{\sigma}_\Lambda) - \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \mu_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda) \ln \mu_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda) \right], \quad (171)$$

en utilisant l'inégalité de Jensen sur l'exponentielle convexe. En prenant le logarithme et en divisant par $-\beta|\Lambda|$, il vient

$$f_\Lambda(\beta, \Phi) \leq \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^\Phi) - \frac{1}{\beta} s_\Lambda(\mu). \quad (172)$$

En passant à la limite $\Lambda \rightarrow \infty$ le long de rectangles et en utilisant les lemmes précédents on obtient bien (169).

Il reste maintenant à montrer que l'on peut construire des μ qui approchent la borne inférieure arbitrairement près. Pour cela fixons Δ le cube de côté a avec un coin à l'origine, i.e. $\Delta = \{0, \dots, a-1\}^d$, et notons $\eta_\Delta(\underline{\sigma}_\Delta) = \frac{e^{-\beta H_\Delta^\Phi(\underline{\sigma}_\Delta)}}{Z_\Delta(\beta, \Phi)}$ la mesure aux conditions libres, définie sur \mathcal{F}_Δ . Pour la transformer en une mesure sur tout \mathcal{F} on considère la mesure produit des translatées de η_Δ , que l'on note

$$\nu_a = \times_{x \in a\mathbb{Z}^d} T_x \eta_\Delta . \quad (173)$$

Cette mesure est a -périodique dans toutes les directions mais pas invariante, on introduit donc finalement

$$\mu_a = \frac{1}{|\Delta|} \sum_{x \in \Delta} T_x \nu_a , \quad (174)$$

qui est bien invariante par translation. Pour conclure il reste à montrer que quand a tend vers l'infini la mesure μ_a sature la borne, autrement dit que

$$f(\beta, \Phi) = \lim_{a \rightarrow \infty} \left[\mu_a(u_\Phi) - \frac{1}{\beta} s(\mu_a) \right] . \quad (175)$$

Montrons cela en admettant temporairement :

$$(i) \quad s(\mu_a) = \frac{1}{|\Delta|} S[\eta_\Delta] , \quad (176)$$

$$(ii) \quad \lim_{a \rightarrow \infty} \left[\mu_a(u_\Phi) - \frac{1}{|\Delta|} \eta_\Delta(H_\Delta^\Phi) \right] = 0 . \quad (177)$$

En remarquant que

$$S[\eta_\Delta] = - \sum_{\underline{\sigma}_\Delta} \eta_\Delta(\underline{\sigma}_\Delta) \ln \left(\frac{e^{-\beta H_\Delta^\Phi(\underline{\sigma}_\Delta)}}{Z_\Delta(\beta, \Phi)} \right) = \ln Z_\Delta(\beta, \Phi) + \beta \eta_\Delta(H_\Delta^\Phi) , \quad (178)$$

on a alors en utilisant (i)

$$\mu_a(u_\Phi) - \frac{1}{\beta} s(\mu_a) = \mu_a(u_\Phi) - \frac{1}{|\Delta|} \eta_\Delta(H_\Delta^\Phi) + f_\Delta(\beta, \Phi) . \quad (179)$$

Quand $a \rightarrow \infty$ on sait grâce au théorème 3 que $f_\Delta \rightarrow f$, et en utilisant (ii) les deux premiers termes se compensent.

Prouvons maintenant (i). Notons Λ un rectangle fini, on a

$$S_\Lambda[\mu_a] = S_\Lambda \left[\frac{1}{|\Delta|} \sum_{x \in \Delta} T_x \nu_a \right] , \quad (180)$$

en utilisant la concavité et la ‘‘presque convexité’’ de S_Λ on obtient

$$\frac{1}{|\Delta|} \sum_{x \in \Delta} S_\Lambda[T_x \nu_a] \leq S_\Lambda[\mu_a] \leq \frac{1}{|\Delta|} \sum_{x \in \Delta} S_\Lambda[T_x \nu_a] + \ln |\Delta| . \quad (181)$$

Comme $s(\mu_a) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} S_\Lambda[\mu_a]$, le résultat sera démontré si l'on obtient que pour tout $x \in \Delta$, $\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} S_\Lambda[T_x \nu_a] = \frac{1}{|\Delta|} S[\eta_\Delta]$. Considérons pour Λ un cube de côté L avec un coin à l'origine. Λ contient $\left(\lfloor \frac{L}{a} \rfloor\right)^d$ translatées complètes de $T_x \Delta$, et un reste que l'on notera Λ' . $T_x \nu_a$ est une mesure produit des translatées de η_Δ , d'où

$$\frac{1}{|\Lambda|} S_\Lambda[T_x \nu_a] = \frac{1}{|\Lambda|} \left(\lfloor \frac{L}{a} \rfloor \right)^d S[\eta_\Delta] + \frac{1}{|\Lambda|} S_{\Lambda'}[T_x \nu_a] \rightarrow \frac{1}{|\Delta|} S[\eta_\Delta] . \quad (182)$$

En effet l'entropie du reste est d'ordre $|\Lambda'|$, et $|\Lambda'|/|\Lambda| \rightarrow 0$ quand $L \rightarrow \infty$ avec a fixé.

Prouvons finalement (ii). D'une part,

$$\mu_a(u_\Phi) = \frac{1}{|\Delta|} \sum_{x \in \Delta} T_x \nu_a \left(\sum_{X \ni 0} \frac{\phi_X}{|X|} \right) = \frac{1}{|\Delta|} \sum_{x \in \Delta} \sum_{X \ni x} \frac{1}{|X|} \nu_a(\phi_X). \quad (183)$$

D'autre part,

$$\frac{1}{|\Delta|} \eta_\Delta(H_\Delta^\Phi) = \frac{1}{|\Delta|} \sum_{X \subset \Delta} \eta_\Delta(\phi_X) = \frac{1}{|\Delta|} \sum_{X \subset \Delta} \sum_{x \in X} \frac{1}{|X|} \nu_a(\phi_X). \quad (184)$$

La différence entre ces deux expressions est donc un terme de surface, dû aux interactions à cheval entre Δ et son extérieur. En prenant une interaction à portée finie et en prenant $a \rightarrow \infty$ on montre le résultat (ii), on conclut ensuite en utilisant la densité des interactions à portée finie dans \mathcal{I}_g . \square

A β fixé, on a donc une structure de transformée de Legendre entre $f(\Phi)$ et $s(\mu)$, les signes (et le sup qui devient un inf) sont changés par rapport à la définition usuelle car f est concave plutôt que convexe. Il y a aussi une subtilité car c'est u_Φ qui apparaît plutôt que Φ , et ce n'est pas tout le dual de \mathcal{I}_g qui est concerné mais seulement les formes linéaires qui peuvent s'écrire v_μ pour un $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$. A ces restrictions près il existe une transformation de Legendre inverse qui exprime $s(\mu)$ avec une extrémisation de $f(\Phi)$.

L'objectif annoncé en début de chapitre de montrer le lien entre l'approche thermodynamique et celle avec les mesures de Gibbs n'est pas encore atteint, dans le théorème précédent l'extrémisation était sur tout \mathcal{M}_{inv} . Le théorème suivant va nous faire faire un pas supplémentaire vers cet objectif.

Définition 10. Pour $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$, on note v_μ la forme linéaire sur \mathcal{I}_g définie par $v_\mu(\Phi) = \mu(u_\Phi)$. C'est bien une forme linéaire à cause de la linéarité de $\Phi \rightarrow u_\Phi$ et de la linéarité de la moyenne.

On peut caractériser les mesures de Gibbs invariantes par translation de la façon suivante :

Théorème 13. Si $\Phi \in \mathcal{I}_p$ et $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$,

$$\mu \in \mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Phi) \Leftrightarrow f(\beta, \Psi) \leq f(\beta, \Phi) + v_\mu(\Psi - \Phi) \quad \forall \Psi \in \mathcal{I}_g, \quad (185)$$

i.e. ssi v_μ est tangente à f en Φ .

Démonstration. Montrons d'abord que si $\mu \in \mathcal{G}_{\text{inv}}$ on a bien cette inégalité. Rappelons que comme $\Phi \in \mathcal{I}_p$, le théorème 4 montre que $f(\beta, \Phi)$ est la limite quand $\Lambda \rightarrow \infty$ de $f_\Lambda^\tau(\beta, \Phi)$, l'énergie libre avec des conditions aux bords arbitraires. Dans un volume Λ fini on a

$$\begin{aligned} f_\Lambda(\beta, \Psi) - f_\Lambda^\tau(\beta, \Phi) &= -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(\frac{\sum_{\underline{\sigma}} e^{-\beta H_\Lambda^\Psi(\underline{\sigma})}}{Z_\Lambda^\tau(\beta, \Phi)} \right) = -\frac{1}{\beta|\Lambda|} \ln \left(\sum_{\underline{\sigma}} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\tau) e^{-\beta(H_\Lambda^\Psi(\underline{\sigma}) - H_\Lambda^{\Phi, \tau}(\underline{\sigma}))} \right) \\ &\leq \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\underline{\sigma}} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}|\tau) (H_\Lambda^\Psi(\underline{\sigma}) - H_\Lambda^{\Phi, \tau}(\underline{\sigma})), \end{aligned} \quad (186)$$

où l'on a utilisé l'inégalité de Jensen, η_Λ étant la probabilité conditionnelle pour l'interaction Φ et la température inverse β que l'on a introduit dans l'étude des mesures de Gibbs. Comme μ est une mesure de Gibbs, à l'équilibre dans Λ ,

$$f_\Lambda(\beta, \Psi) - \mu(f_\Lambda^b(\beta, \Phi)) \leq \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^\Psi) - \frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^{\Phi, b}), \quad (187)$$

où $f_\Lambda^b(\beta, \Phi)$ est la fonction de Σ dans \mathbb{R} qui associe $\underline{\sigma}$ à $f_\Lambda^\sigma(\beta, \Phi)$ et $H_\Lambda^{\Phi, b}$ associe $\underline{\sigma}$ à $H_\Lambda^{\Phi, \sigma}(\underline{\sigma})$. Ces deux fonctions sont continues, donc mesurables, leur moyennes sont bien définies. En passant à la limite $\Lambda \rightarrow \infty$, on obtient

$$f(\beta, \Psi) - f(\beta, \Phi) \leq \mu(u_\Psi) - \mu(u_\Phi) = v_\mu(\Psi - \Phi). \quad (188)$$

En effet, d'une part $\mu(f_\Lambda^b(\beta, \Phi)) \rightarrow f(\beta, \Phi)$ puisque $f_\Lambda^g(\beta, \Phi) \rightarrow f(\beta, \Phi)$ pour toutes les conditions aux bords \underline{g} , l'interversion de la limite et de la moyenne se justifiant par le théorème de convergence bornée. D'autre part, on peut montrer que

$$\frac{1}{|\Lambda|} \mu(H_\Lambda^{\Phi, b}) \rightarrow \mu(u_\Phi) , \quad (189)$$

de la même façon qu'on l'avait fait pour des conditions aux bords libres (en commençant par des interactions à portée finie puis par densité de \mathcal{I}_f dans \mathcal{I}_p). La preuve de la réciproque va s'appuyer sur des définitions et un lemme supplémentaire. \square

Définition 11. Pour $g \in \mathcal{C}$, $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ et $\Phi \in \mathcal{I}_p$ on note $g_{\Lambda, \Phi}$ la fonction retirée dans Λ avec la probabilité conditionnelle correspondante à l'interaction Φ et la température inverse β , i.e. on explicite maintenant la dépendance en Φ . On note aussi $\tilde{g}_{\Lambda, \Phi} = g - g_{\Lambda, \Phi}$ la différence entre les deux.

Définition 12. Pour une fonction h dépendant des variables dans un volume fini Δ , $h \in \mathcal{C}_\Delta$, on définit l'interaction $\Psi(h)$ par

$$\psi(h)_X = \begin{cases} T_a h & \text{si } X = T_a \Delta \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} , \quad (190)$$

i.e. en recopiant la fonction h sur toutes les translatées de Δ . $\Psi(h)$ est bien invariante par translation. Notons que pour $\nu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$, on a $\nu(u_{\Psi(h)}) = \nu(h)$, le nombre de translatées de Δ contenant l'origine étant précisément $|\Delta|$.

Lemme 25. Pour $\Psi_0 \in \mathcal{I}_p$ et $h \in \mathcal{C}_f$ telle qu'il existe $g \in \mathcal{C}$ et $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ avec $\|h - \tilde{g}_{\Lambda, \Psi_0}\|_\infty \leq \epsilon$, alors

$$f(\beta, \Psi_0 + x\Psi(h)) \leq f(\beta, \Psi_0) + |x|\epsilon \quad \forall x . \quad (191)$$

Démonstration. Considérons une mesure ν qui soit de Gibbs pour l'interaction Ψ_0 et invariante par translation, $\nu \in \mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Psi_0)$. On a donc $\nu(\tilde{g}_{\Lambda, \Psi_0}) = \nu(g) - \nu(g_{\Lambda, \Psi_0}) = 0$ par définition des mesures de Gibbs.

En utilisant la partie du théorème déjà prouvée,

$$f(\beta, \Psi_0 + x\Psi(h)) \leq f(\beta, \Psi_0) + v_\nu(x\Psi(h)) . \quad (192)$$

Or,

$$v_\nu(\Psi(h)) = \nu(u_{\Psi(h)}) = \nu(h) = \nu(h - \tilde{g}_{\Lambda, \Psi_0}) , \quad (193)$$

donc $|v_\nu(\Psi(h))| \leq \epsilon$. Finalement, $v_\nu(x\Psi(h)) \leq |v_\nu(x\Psi(h))| = |x| |v_\nu(\Psi(h))| \leq |x|\epsilon$. \square

Démonstration de la réciproque du théorème 13. On considère donc $\mu \in \mathcal{M}_{\text{inv}}$ et une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_p$ telle que $f(\beta, \Phi + \Psi) \leq f(\beta, \Phi) + v_\mu(\Psi) \quad \forall \Psi \in \mathcal{I}_g$, et l'on veut montrer que $\mu \in \mathcal{G}(\beta, \Phi)$. On considère donc une fonction $g \in \mathcal{C}$ et un volume fini Λ , il faut montrer $\mu(\tilde{g}_{\Lambda, \Phi}) = 0$. Soit $\epsilon > 0$. Comme $\tilde{g}_{\Lambda, \Phi}$ est une fonction continue, et que \mathcal{C}_f est dense dans \mathcal{C} , on peut trouver Δ une partie finie de \mathbb{Z}^d et $h \in \mathcal{C}_\Delta$ telle que $\|h - \tilde{g}_{\Lambda, \Phi}\|_\infty \leq \epsilon$. De plus, par continuité de $x \rightarrow \|h - \tilde{g}_{\Lambda, \Phi + x\Psi(h)}\|_\infty$ (que l'on peut vérifier facilement) on peut trouver $\delta > 0$ tel que $\|h - \tilde{g}_{\Lambda, \Phi + x\Psi(h)}\|_\infty \leq 2\epsilon$ si $|x| \leq \delta$. On applique alors le lemme avec $\Psi_0 = \Phi - x\Psi(h)$

$$f(\beta, \Phi) \leq f(\beta, \Phi - x\Psi(h)) + 2\epsilon|x| \quad \forall x \text{ avec } |x| \leq \delta , \quad (194)$$

En prenant $x = -\delta$ et $x = +\delta$ dans cette inégalité il vient

$$f(\beta, \Phi) \leq f(\beta, \Phi + \delta\Psi(h)) + 2\delta\epsilon , \quad f(\beta, \Phi) \leq f(\beta, \Phi - \delta\Psi(h)) + 2\delta\epsilon . \quad (195)$$

L'hypothèse du théorème conduit à

$$\delta v_\mu(\Psi(h)) \geq f(\beta, \Phi + \delta\Psi(h)) - f(\beta, \Phi) \geq -2\delta\epsilon , \quad (196)$$

en utilisant la première inégalité de (195), ce qui conduit à $v_\mu(\Psi(h)) \geq -2\epsilon$.

De même l'hypothèse du théorème conduit à

$$-\delta v_\mu(\Psi(h)) \geq f(\beta, \Phi - \delta\Psi(h)) - f(\beta, \Phi) , \quad \delta v_\mu(\Psi(h)) \leq f(\beta, \Phi) - f(\beta, \Phi - \delta\Psi(h)) \leq 2\delta\epsilon \quad (197)$$

en utilisant la deuxième inégalité de (195), ce qui conduit à $v_\mu(\Psi(h)) \leq 2\epsilon$.

On a donc $|v_\mu(\Psi(h))| \leq 2\epsilon$.

Comme

$$v_\mu(\Psi(h)) = \mu(h) , \quad |\mu(\tilde{g}_{\Lambda, \Phi})| = |\mu(h) + \mu(\tilde{g}_{\Lambda, \Phi} - h)| \leq |\mu(h)| + |\mu(\tilde{g}_{\Lambda, \Phi} - h)| \leq 3\epsilon . \quad (198)$$

Comme ϵ était arbitraire on a montré $\mu(\tilde{g}_{\Lambda, \Phi}) = 0$, donc μ est une mesure de Gibbs pour l'interaction Φ . \square

Enonçons finalement le théorème qui relie explicitement les notions de mesure de Gibbs et celles thermodynamiques, généralisation (151) :

Théorème 14. *Si $\Phi \in \mathcal{I}_p$ les mesures de Gibbs invariantes par translation sont précisément celles qui sont optimales dans le théorème 12, i.e.*

$$\mu \in \mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta, \Phi) \Leftrightarrow f(\beta, \Phi) = \mu(u_\Phi) - \frac{1}{\beta} s(\mu) . \quad (199)$$

On ne prouvera pas ce théorème qui repose sur des théorèmes généraux d'analyse convexe. L'idée est toutefois intuitive et repose sur la combinaison du théorème 13 qui caractérise les mesures de Gibbs en termes des fonctionnelles tangentes de f , du théorème 12 qui dévoile la structure de transformée de Legendre de f , et finalement de la généralisation fonctionnelle du résultat énoncé au TD 3 pour des fonctions sur \mathbb{R} : \hat{x} est tangente à f en x si et seulement si $f(x) + \hat{f}(\hat{x}) = \langle \hat{x}, x \rangle$. Cette dernière condition est précisément, dans le contexte présent, $f(\beta, \Phi) + \frac{1}{\beta} s(\mu) = \mu(u_\Phi)$.

On peut aussi justifier intuitivement, au vu des derniers résultats, le lien entre deux définitions a priori différentes d'une "transition de phase", à savoir la non-analyticité de l'énergie libre f comme fonction de β d'une part, et d'autre part l'apparition de mesures de Gibbs distinctes. En extrapolant à partir du cas des fonctions de \mathbb{R} , si f est dérivable elle admettra une seule fonctionnelle tangente, et donc une seule mesure de Gibbs.

On peut critiquer le résultat de cette approche qui ne conduit qu'à une caractérisation des mesures de Gibbs invariantes par translation, et pas toutes les mesures de Gibbs. Mais d'une part les interactions dont on est parti sont invariantes par translation, donc les mesures dans \mathcal{G}_{inv} sont plus "naturelles" que celles de \mathcal{G} . D'autre part, dans le cas d'Ising les mesures de Gibbs non-invariantes par translation dont on a parlé précédemment sont celles qui contiennent une paroi de domaine entre des régions à aimantation positive et des régions à aimantation négative. Mais les deux phases homogènes ont la même densité d'énergie libre par spin, la paroi de domaine sur laquelle l'aimantation change est donc négligeable pour l'énergie libre, ce n'est qu'un effet de surface (et en effet on peut parler de tension de surface, comme pour les interfaces entre la phase vapeur et la phase liquide d'un fluide). Il est donc naturel que l'approche thermodynamique (qui ne manipule que des quantités extensives, indépendantes des effets de bord aux surfaces) ne soit pas capable de détecter cette subtilité des mesures de Gibbs non-invariantes par translation.

5 Equivalence des ensembles

On avait discuté dans l'introduction les deux "ensembles", canonique et microcanonique, qui peuvent être utilisés en physique statistique pour décrire deux situations physiques différentes. Dans l'ensemble microcanonique on suppose que le système étudié est isolé du reste de l'univers, son énergie E est donc une grandeur conservée constante; en l'absence d'autres informations sur le système on suppose que toutes les configurations avec cette énergie (à une petite constante additive près) sont équiprobables. La grandeur thermodynamique pertinente est l'entropie microcanonique $S(E)$, égale au logarithme du nombre de configurations avec l'énergie E (la constante de Boltzmann étant prise égale à 1). L'ensemble canonique modélise quant à lui un système à l'équilibre avec un thermostat de température $T = 1/\beta$, les échanges d'énergie sont permis entre le système et le thermostat, les probabilités des configurations sont $\exp[-\beta E(\underline{\sigma})]/Z$ (qui est en fait la loi maximisant l'entropie de Shannon avec une contrainte sur la valeur moyenne de l'énergie), la grandeur thermodynamique est l'énergie libre $F(T)$.

Ces deux ensembles sont équivalents dans la limite thermodynamique, car les fluctuations de l'énergie autour de sa valeur moyenne $\bar{E}(T)$ dans l'ensemble canonique sont négligeables, on peut donc remplacer cet ensemble par l'ensemble microcanonique avec une valeur de l'énergie fixée à la valeur moyenne de l'ensemble canonique. Il y a de plus une structure de transformée de Legendre entre $F(T)$ et $S(E)$, comme on peut le voir avec ce calcul approché :

$$Z(\beta) = \sum_{\underline{\sigma}} e^{-\beta E(\underline{\sigma})} = \sum_E e^{S(E) - \beta E}, \quad F(T) = -\frac{1}{\beta} \ln Z(\beta) \approx \inf_E [E - TS(E)]. \quad (200)$$

On va énoncer et prouver partiellement un résultat rigoureux de ce type-là, dans le cadre des modèles étudiés dans ce cours.

La première chose à faire est de déterminer les valeurs possibles, pour une interaction donnée, de la densité d'énergie. Rappelons que nous avons démontré que $\Phi \rightarrow f(\beta, \Phi)$ est une fonction concave des interactions, à β fixé. Si l'on considère Φ fixée, la fonction $\beta \rightarrow g(\beta, \Phi) = \beta f(\beta, \Phi) = f(1, \beta\Phi)$ est donc une fonction concave de β . Comme on l'a vu en TD, g admet donc des dérivées à gauche et à droite pour tout β , qui décroissent avec β , et g est dérivable en β partout sauf sur un ensemble au plus dénombrable de points.

Définition 13. *Pour une interaction $\Phi \in \mathcal{I}_g$, on note $e_{\max}(\Phi) = (D_+g)(0)$, $e_{\min}(\Phi) = \lim_{\beta \rightarrow +\infty} (D_-g)(\beta)$, et $\mathcal{E}_{\text{permis}}(\Phi) =]e_{\min}(\Phi), e_{\max}(\Phi)[$. Pour $e \in \mathcal{E}_{\text{permis}}(\Phi)$ on note $\beta(e, \Phi)$ une température inverse β telle que $e \in [(D_+g)(\beta), (D_-g)(\beta)]$, qui existe toujours d'après les propriétés des fonctions concaves. La fonction $\beta(e)$ est décroissante.*

On peut justifier ces définitions en rappelant qu'en volume fini,

$$\frac{d}{d\beta}(\beta f_\Lambda(\beta, \Phi)) = \frac{1}{\Lambda} \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \eta_\Lambda(\underline{\sigma}_\Lambda) H_\Lambda^\Phi(\underline{\sigma}_\Lambda), \quad (201)$$

qui est donc la densité d'énergie moyenne pour des conditions aux bords libres.

Définition 14. *Pour $\Phi \in \mathcal{I}_g$, $e \in \mathcal{E}_{\text{permis}}(\Phi)$, $\delta > 0$, on note*

$$s_{m,\Lambda,\delta}(e, \Phi) = \frac{1}{|\Lambda|} \ln N_{\Lambda,\delta}(e, \Phi), \quad N_{\Lambda,\delta}(e, \Phi) = |\{\underline{\sigma}_\Lambda : H_\Lambda^\Phi(\underline{\sigma}_\Lambda) \in [|\Lambda|(e - \delta), |\Lambda|(e + \delta)]\}| \quad (202)$$

la densité d'entropie microcanonique.

Théorème 15. *Pour $\Phi \in \mathcal{I}_p$, $e \in \mathcal{E}_{\text{permis}}(\Phi)$,*

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \liminf_{\Lambda \rightarrow \infty} s_{m,\Lambda,\delta}(e, \Phi) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \limsup_{\Lambda \rightarrow \infty} s_{m,\Lambda,\delta}(e, \Phi), \quad (203)$$

la limite pouvant être prise au sens de Van Hove. On note $s_m(e, \Phi)$ la limite commune, et l'on a

$$s_m(e, \Phi) = \inf_{\beta \geq 0} [\beta e - \beta f(\beta, \Phi)], \quad (204)$$

qui est donc une fonction concave de e (en tant qu'inf de fonctions affines donc concaves).

Démonstration (partielle). Considérons un volume fini Λ . Pour n'importe quelle valeur de β on a :

$$N_{\Lambda,\delta}(e, \Phi) = \sum_{\underline{\alpha}_\Lambda} \mathbb{I}(|H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda) - |\Lambda|e| \leq \delta|\Lambda|) \quad (205)$$

$$= \sum_{\underline{\alpha}_\Lambda} \mathbb{I}(|H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda) - |\Lambda|e| \leq \delta|\Lambda|) \frac{e^{-\beta H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda)}}{Z_\Lambda(\beta, \Phi)} Z_\Lambda(\beta, \Phi) e^{\beta H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda)}, \quad (206)$$

que l'on peut ensuite borner inférieurement et supérieurement.

Comme dans la somme $H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda) \leq |\Lambda|(e + \delta)$,

$$N_{\Lambda,\delta}(e, \Phi) \leq Z_\Lambda(\beta, \Phi) e^{\beta|\Lambda|(e+\delta)} \sum_{\underline{\alpha}_\Lambda} \mathbb{I}(|H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda) - |\Lambda|e| \leq \delta|\Lambda|) \frac{e^{-\beta H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda)}}{Z_\Lambda(\beta, \Phi)} \quad (207)$$

$$\leq Z_\Lambda(\beta, \Phi) e^{\beta|\Lambda|(e+\delta)} \sum_{\underline{\alpha}_\Lambda} \frac{e^{-\beta H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda)}}{Z_\Lambda(\beta, \Phi)} = Z_\Lambda(\beta, \Phi) e^{\beta|\Lambda|(e+\delta)}, \quad (208)$$

et donc en prenant le log, en divisant par $|\Lambda|$ et en prenant $\Lambda \rightarrow \infty$,

$$\limsup_{\Lambda \rightarrow \infty} s_{m,\Lambda,\delta}(e, \Phi) \leq -\beta f(\beta, \Phi) + \beta(e + \delta), \quad (209)$$

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \limsup_{\Lambda \rightarrow \infty} s_{m,\Lambda,\delta}(e, \Phi) \leq -\beta f(\beta, \Phi) + \beta e, \quad (210)$$

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \limsup_{\Lambda \rightarrow \infty} s_{m,\Lambda,\delta}(e, \Phi) \leq \inf_{\beta \geq 0} [\beta e - \beta f(\beta, \Phi)], \quad (211)$$

où dans la dernière étape on a utilisé la validité de l'inégalité précédente pour tout β .

La borne inférieure donne

$$N_{\Lambda,\delta}(e, \Phi) \geq Z_\Lambda(\beta, \Phi) e^{\beta|\Lambda|(e-\delta)} \eta_{\Lambda,\beta}(|H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda) - |\Lambda|e| \leq \delta|\Lambda|), \quad (212)$$

où $\eta_{\Lambda,\beta}$ est la mesure aux conditions aux bords libres dans le volume Λ , où l'on explicite la dépendance en β .

Si on peut montrer que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \ln \eta_{\Lambda,\beta(e,\Phi)}(|H_\Lambda^\Phi(\underline{\alpha}_\Lambda) - |\Lambda|e| \leq \delta|\Lambda|) = 0, \quad (213)$$

alors le théorème est prouvé. En effet,

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \liminf_{\Lambda \rightarrow \infty} s_{m,\Lambda,\delta}(e, \Phi) \geq [\beta(e, \Phi)e - \beta(e, \Phi)f(\beta(e, \Phi), \Phi)] \geq \inf_{\beta \geq 0} [\beta e - \beta f(\beta, \Phi)], \quad (214)$$

à comparer à (211).

La preuve de (213), que l'on admettra ici, repose sur l'idée d'ergodicité. On montre d'abord que pour tout $e \in \mathcal{E}_{\text{permis}}(\Phi)$ il existe une température inverse β_* et une mesure de Gibbs invariante par translation $\mu \in \mathcal{G}_{\text{inv}}(\beta_*, \Phi)$ telle que $\mu(u_\Phi) = e$, la densité d'énergie (th III.3.11 Simon). Pour certaines valeurs de e on peut par ailleurs choisir μ extrémale, et donc ergodique.

On peut voir $\frac{1}{|\Lambda|} H_\Lambda^\Phi$ comme une moyenne spatiale de $|\Lambda|$ translatées de u_Φ , cette moyenne spatiale est donc "presque sûrement dans la limite $\Lambda \rightarrow \infty$ " proche de la moyenne d'ensemble e : c'est le contenu du théorème ergodique.

Si μ est une mesure invariante par translation et ergodique, pour toute fonction f continue,

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} T_x f = \mu(f), \quad (215)$$

presque sûrement et dans L_1 .

□

D'après ce qu'on a vu au TD 3 on peut inverser la transformée de Legendre en

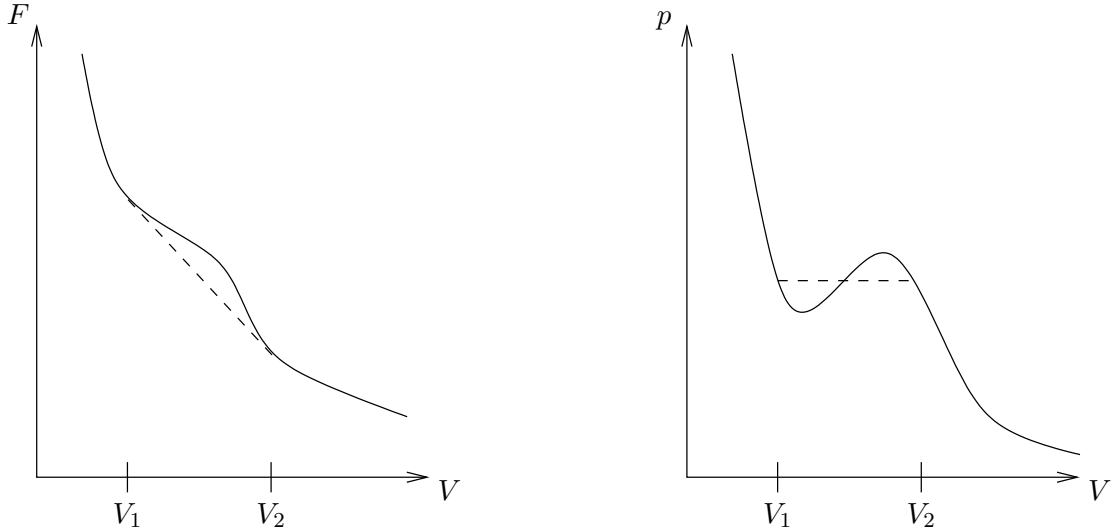
$$f(\beta, \Phi) = \inf_{e \in \mathcal{E}_{\text{permis}}} \left[e - \frac{1}{\beta} s_{\text{m}}(e, \Phi) \right]. \quad (216)$$

Le fait que l'énergie libre soit la transformée de Legendre de l'entropie microcanonique est naturel au vu du calcul rudimentaire de l'équation (200). Ce qui est non-trivial c'est que l'entropie microcanonique soit une fonction concave, et donc que la transformée de Legendre entre les $f(\beta)$ et $s_{\text{m}}(e)$ soit inversible. Ce fait repose crucialement sur la dimension finie du réseau sur lequel on a défini le modèle (et peut devenir faux en champ moyen). On peut le justifier intuitivement de la façon suivante. Supposons que $s_{\text{m}}(e)$ soit non-concave sur un intervalle $[e_1, e_2]$, avec $s_{\text{m}}(\alpha e_1 + (1 - \alpha)e_2) < \alpha s_{\text{m}}(e_1) + (1 - \alpha)s_{\text{m}}(e_2)$. Alors on pourrait construire, dans la limite thermodynamique, une configuration de densité d'énergie $\alpha e_1 + (1 - \alpha)e_2$ en divisant le volume Λ en deux parties de volumes $\alpha|\Lambda|$ et $(1 - \alpha)|\Lambda|$, à l'intérieur desquels on mettrait les configurations d'énergie proche, respectivement, de e_1 et e_2 . Comme la paroi de domaine entre les deux parties a un effet négligeable dans la limite thermodynamique, on construirait une configuration d'entropie $\alpha s_{\text{m}}(e_1) + (1 - \alpha)s_{\text{m}}(e_2)$ plus élevée que $s_{\text{m}}(\alpha e_1 + (1 - \alpha)e_2)$, ce qui serait contradictoire. Cet argument repose sur l'existence d'une tension de surface finie et d'une surface négligeable devant le volume, ce qui est faux en champ moyen.

Notons finalement que l'on peut considérer des ensemble où d'autres grandeurs, outre l'énergie, sont contraintes ou libres de fluctuer. Dans le cas de systèmes de spin d'Ising par exemple, on peut fixer strictement la densité d'aimantation m , ou introduire un champ magnétique h qui lui est conjugué. La construction de transformée de Legendre se généralise à ces cas-là, ainsi que la concavité de la fonction thermodynamique à paramètre contraint pour les systèmes en dimension finie. On reviendra sur cette question dans la partie 6.

6 Limite de Kac

On a vu dans le chapitre précédente que l'énergie libre des modèles définis en dimension finie doit vérifier des propriétés de convexité. Les approximations (incontrôlées) de type champ moyen peuvent toutefois conduire à des énergies libres non-convexes. L'exemple physique le plus révélateur est celui du gaz de van der Waals, pour lequel à basse température on obtient une énergie libre $F(T, V, N)$ non-convexe dans le volume V , autrement dit des isothermes dans le plan (V, p) non-monotones, ce qui n'est pas acceptable physiquement. La résolution habituelle de ce problème consiste à effectuer la construction de Maxwell, autrement dit à remplacer $F(V)$ par son enveloppe convexe, ou, de manière équivalente, à remplacer la partie non-monotone de l'isotherme par un palier qui vérifie la loi des aires :



Justifions brièvement l'équivalence entre la prise de l'enveloppe convexe de $F(V)$ et la construction du palier de Maxwell sur $p(V)$. Rappelons que la pression et l'énergie libre sont reliées par $p = -\frac{\partial F}{\partial V}|_{T,N}$ d'après les relations générales de thermodynamique. Notons $[V_1, V_2]$ l'intervalle sur lequel $F(V)$ diffère de son enveloppe convexe, qui est une droite de pente notée $-p_0$. Par construction $F'(V_1) = F'(V_2) = -p_0$, la partie affine de l'enveloppe convexe étant tangente à F en ces deux points. De plus $p_0 = -\frac{F(V_2) - F(V_1)}{V_2 - V_1}$. Calculons maintenant l'aire entre les isothermes avant et après l'introduction du palier en p_0 :

$$(V_2 - V_1)p_0 - \int_{V_1}^{V_2} dV p(V) = (V_2 - V_1)p_0 + F(V_2) - F(V_1) = 0. \quad (217)$$

La construction de Maxwell correspond à imposer l'égalité des pressions et des potentiels chimiques entre les deux phases en coexistence ; ces derniers se lisent comme l'ordonnée à l'origine de la tangente en un point de la courbe.

L'objectif de ce chapitre est de justifier rigoureusement la construction de Maxwell dans le cadre d'une limite bien contrôlée. On utilisera pour simplifier le langage d'un modèle de spins d'Ising sur réseau, une approche similaire peut être suivie pour les systèmes de particules.

Rappelons tout d'abord les résultats du TD 1 pour le modèle de champ moyen de Curie-Weiss, défini par un Hamiltonien agissant sur N spins d'Ising sans géométrie,

$$H(\underline{\sigma}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i=1}^N \sigma_i. \quad (218)$$

On a montré que son énergie libre par spin vaut, dans la limite thermodynamique,

$$f_{\text{cm}}(\beta, h) = \inf_{m \in [-1,1]} [\widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m) - h m], \quad (219)$$

$$\widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m) = -\frac{1}{2}m^2 - \frac{1}{\beta}s(m), \quad s(m) = -\frac{1+m}{2} \ln \left(\frac{1+m}{2} \right) - \frac{1-m}{2} \ln \left(\frac{1-m}{2} \right). \quad (220)$$

Insistons sur le fait que ce modèle ne rentre absolument pas dans le cadre des modèles de dimension finie traités dans les chapitres précédents.

Considérons maintenant une fonction φ de \mathbb{R}^d dans \mathbb{R} , continue et à dérivées continues, à support inclus dans la boule unité de \mathbb{R}^d , non-négative. Elle est donc intégrable au sens de Riemann (une fonction définie sur un compact est Riemann intégrable ssi elle est bornée et presque partout continue), et on la suppose normalisée avec $\int dr \varphi(r) = 1$. On supposera aussi qu'elle est symétrique autour de l'origine, i.e. $\varphi(r) = \varphi(-r)$. Définissons l'interaction de Kac à l'échelle $R \in \mathbb{R}_+$, notée $\Phi(R)$, selon

$$\phi_X(\underline{\sigma}) = \begin{cases} -h \sigma_x & \text{si } X = \{x\} \\ -J_{x,y} \sigma_x \sigma_y & \text{si } X = \{x, y\} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad \text{avec } J_{x,y} = \frac{1}{R^d} \varphi\left(\frac{x-y}{R}\right) \quad (221)$$

Les spins à distance plus grande que R n'interagissent pas entre eux, tous les couplages pour des distances nettement plus petites que R sont par contre du même ordre. Pour $R \approx 1$ on a une interaction à proches voisins, pour $R \approx \text{diam}(\Lambda)$ on retrouve approximativement le modèle de Curie-Weiss. La limite de Kac, étudiée notamment par Lebowitz et Penrose en 1966, consiste à prendre $R \rightarrow \infty$, mais seulement après la limite thermodynamique, ce qui va permettre d'interpoler entre un modèle de dimension finie à portée finie et un modèle de champ moyen. Notons en effet que pour tout R fini l'interaction définie ci-dessus est à portée finie (φ étant de support borné), donc la limite thermodynamique de l'énergie libre existe, notons-la $f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) = \lim_{\Lambda \rightarrow \infty} f_{\Lambda}(\beta, \Phi(R))$.

Le choix de la normalisation des $J_{x,y}$ et de φ est tel que $\sum_{y \in \mathbb{Z}^d \setminus x} J_{x,y} \approx 1$ (quand R est grand), ce qui correspond à la même normalisation pour le couplage total d'un spin avec les autres spins que pour le modèle de Curie-Weiss.

Le résultat principal que l'on veut prouver est le suivant :

Théorème 16. *Dans la limite des grandes portées l'interaction de Kac a l'énergie libre de champ moyen :*

$$\lim_{R \rightarrow \infty} f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) = f_{\text{cm}}(\beta, h) . \quad (222)$$

Remarquons que dans la limite de Kac l'énergie libre devient indépendant des détails de φ (du moment que son intégrale est normalisée à 1), mais aussi, ce qui est a priori plus surprenant, de la dimension d de l'espace. En particulier pour $d = 1$ la limite $R \rightarrow \infty$ est nécessairement singulière : pour tout R fini l'interaction est à portée finie, et f_{Kac} est une fonction analytique de h (comme on l'a vu au TD 1 il n'y a pas de transition de phase en dimension 1), alors que sa limite f_{cm} est singulière en $h = 0$ (à basse température). Il existe aussi des résultats (assez difficiles à prouver) en $d \geq 2$ qui montrent l'existence d'une transition de phase pour R grand mais fini (cf Presutti).

Démonstration. Le schéma de la preuve consistera à prouver des bornes supérieures et inférieures coïncidentes sur les lim sup et lim inf de f_{Kac} quand $R \rightarrow \infty$.

Une des inégalités vient de la méthode variationnelle vue au TD3. On a en effet, dans un volume fini Λ ,

$$H_{\Lambda}^{\Phi}(\underline{\sigma}) = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ x \neq y}} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y - h \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x . \quad (223)$$

En appliquant la méthode variationnelle du TD 3 avec une mesure produit de spins indépendants d'aimantation moyenne m arbitraire, il vient

$$f_{\Lambda}(\beta, \Phi) \leq -\frac{1}{2} m^2 \left(\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ x \neq y}} J_{x,y} \right) - h m - \frac{1}{\beta} s(m) . \quad (224)$$

En prenant la limite thermodynamique $\Lambda \rightarrow \infty$ avec R fixé, comme les effets de bords disparaissent il vient

$$f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) \leq -\frac{1}{2} J(R) m^2 - h m - \frac{1}{\beta} s(m), \quad \text{avec } J(R) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d \setminus 0} J_{0,x} = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d \setminus 0} \frac{1}{R^d} \varphi\left(\frac{x}{R}\right) . \quad (225)$$

Or quand $R \rightarrow \infty$ cette dernière somme de Riemann devient une intégrale,

$$J(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \int dr \varphi(r) = 1 , \quad (226)$$

on a donc, en notant que m était arbitraire jusque-là,

$$\limsup_{R \rightarrow \infty} f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) \leq \inf_{m \in [-1, 1]} \left[-\frac{1}{2}m^2 - hm - \frac{1}{\beta}s(m) \right] = f_{\text{cm}}(\beta, h) . \quad (227)$$

Il faut maintenant trouver une borne inférieure pour l'énergie libre. L'idée dans la suite est que pour $R \gg 1$, tous les spins dans une zone de taille ℓ avec $1 \ll \ell \ll R$ interagissent entre eux, on peut donc voir le système total comme une juxtaposition de modèles de Curie-Weiss interagissant les uns avec les autres.

Plus formellement, fixons un entier positif ℓ avec $\ell < R$, et prenons pour le système $\Lambda \subset_f \mathbb{Z}^d$ un cube de côté L , avec pour simplifier L multiple de ℓ . Λ sera donc vu comme l'union de cubes C_α de côtés ℓ , l'indice α allant de 1 à $N = \left(\frac{L}{\ell}\right)^d$. On notera $r_\alpha \in \mathbb{Z}^d$ la position du centre du cube C_α (si ℓ est pair on prendra la partie entière de ses coordonnées).

Pour une configuration $\underline{\sigma}_\Lambda$ des spins d'Ising dans Λ on note $m_\alpha(\underline{\sigma})$ l'aimantation par spin dans le cube α , i.e.

$$m_\alpha(\underline{\sigma}) = \frac{1}{\ell^d} \sum_{x \in C_\alpha} \sigma_x , \quad (228)$$

qui appartient à $\mathcal{M}_\ell = \{-1, -1 + \frac{2}{\ell^d}, \dots, 1 - \frac{2}{\ell^d}, 1\}$.

On va choisir dans la suite ℓ petit devant l'échelle R sur laquelle varient sensiblement les couplages $J_{x,y}$. Pour exploiter cette idée nous allons réécrire la fonction de partition

$$Z_\Lambda = \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \exp \left[\beta \frac{1}{2} \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ x \neq y}} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y + \beta h \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x \right] \quad (229)$$

en termes des aimantations de bloc m_α , au prix d'une erreur qui deviendra négligeable dans la limite de Kac. On a

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ x \neq y}} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{x,y \in C_\alpha} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y - \frac{1}{2} N \ell^d J_{0,0} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \alpha'=1 \\ \alpha \neq \alpha'}}^N \sum_{x \in C_\alpha, y \in C_{\alpha'}} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y , \quad (230)$$

où l'on a utilisé l'invariance par translation de J pour traiter à part les termes diagonaux. En remplaçant maintenant dans les $J_{x,y}$ les coordonnées de x, y par celles du centre du bloc auquel ils appartiennent,

$$\frac{1}{2} \sum_{\substack{x,y \in \Lambda \\ x \neq y}} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y = \frac{1}{2} \ell^{2d} \sum_{\alpha, \alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} m_\alpha(\underline{\sigma}) m_{\alpha'}(\underline{\sigma}) + E , \quad (231)$$

où l'erreur E commise dans ce remplacement vaut

$$E = -\frac{1}{2} N \ell^d J_{0,0} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{x,y \in C_\alpha} [J_{x,y} - J_{r_\alpha, r_\alpha}] \sigma_x \sigma_y + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\alpha, \alpha'=1 \\ \alpha \neq \alpha'}}^N \sum_{x \in C_\alpha, y \in C_{\alpha'}} [J_{x,y} - J_{r_\alpha, r_{\alpha'}}] \sigma_x \sigma_y \quad (232)$$

Dans la première somme x et y sont au plus à distance ℓ du centre r_α du bloc, donc

$$|J_{x,y} - J_{r_\alpha, r_\alpha}| = \frac{1}{R^d} \left| \varphi \left(\frac{x-y}{R} \right) - \varphi(0) \right| \leq C \frac{1}{R^d} \frac{\ell}{R} , \quad (233)$$

où C est une constante qui ne dépend que de φ et de la dimension, que l'on pourrait expliciter en terme d'une borne supérieure sur les dérivées premières de φ (qui sont finies par les hypothèses faites). Dans la deuxième somme on peut écrire similairement

$$|J_{x,y} - J_{r_\alpha, r_{\alpha'}}| \leq C' \frac{1}{R^d} \frac{\ell}{R} \mathbb{I}(\|r_\alpha - r_{\alpha'}\| \leq 2R), \quad (234)$$

la dernière fonction indicatrice étant justifiée car le support de φ est inclus dans la boule unité (le facteur 2, non-optimal, assure qu'en cas contraire aucun des spins de C_α ne peut interagir avec un spin de $C_{\alpha'}$). On peut donc borner l'erreur selon

$$|E| \leq \frac{1}{2} L^d \frac{\varphi(0)}{R^d} + \frac{1}{2} \frac{L^d}{\ell^d} \ell^{2d} C \frac{1}{R^d} \frac{\ell}{R} + \frac{1}{2} \frac{L^d}{\ell^d} \ell^{2d} C'' \frac{1}{R^d} \frac{\ell}{R} \frac{R^d}{\ell^d}, \quad (235)$$

le dernier facteur comptant le nombre de blocs qui peuvent interagir avec un bloc donné. On écrira finalement

$$|E| \leq L^d b(\ell, R, \varphi, d), \quad \text{avec } b(\ell, R, \varphi, d) = O\left(\frac{1}{R^d}\right) + O\left(\left(\frac{\ell}{R}\right)^{d+1}\right) + O\left(\frac{\ell}{R}\right). \quad (236)$$

Revenant maintenant au calcul de la fonction de partition,

$$Z_\Lambda \leq e^{L^d b(\ell, R, \varphi, d)} \sum_{\underline{\sigma}_\Lambda} \exp \left[\beta \frac{1}{2} \ell^{2d} \sum_{\alpha, \alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} m_\alpha(\underline{\sigma}) m_{\alpha'}(\underline{\sigma}) + \beta h \ell^d \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha(\underline{\sigma}) \right]. \quad (237)$$

Comme dans cette dernière expression toute la dépendance dans les configurations passe par les aimantations des blocs m_α , la somme vaut

$$\sum_{\{m_\alpha \in \mathcal{M}_\ell\}_{\alpha=1}^N} Z(m_1, \dots, m_N), \quad (238)$$

$$\text{où } Z(m_1, \dots, m_N) = \exp \left[\sum_{\alpha=1}^N \ell^d s_\ell(m_\alpha) + \beta \frac{1}{2} \ell^{2d} \sum_{\alpha, \alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} m_\alpha m_{\alpha'} + \beta h \ell^d \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha \right], \quad (239)$$

où l'on a introduit l'entropie $s_\ell(m)$ pour $m \in \mathcal{M}_\ell$ selon

$$e^{\ell^d s_\ell(m)} = \binom{\ell^d}{\ell^d \frac{1+m}{2}}. \quad (240)$$

On va maintenant utiliser le fait que les interactions sont ferromagnétiques (i.e. que $J_{x,y} \geq 0$) et qu'ainsi les configurations des $\{m_\alpha\}$ avec m_α constante dans l'espace sont privilégiées. En effet,

$$\sum_{\alpha, \alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} m_\alpha m_{\alpha'} = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha, \alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} (m_\alpha - m_{\alpha'})^2 + \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^2 \sum_{\alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} \leq \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^2 \sum_{\alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}}, \quad (241)$$

où l'on a utilisé la symétrie $J_{x,y} = J_{y,x}$. En majorant la somme des $Z(m_1, \dots, m_N)$ par le produit du nombre de termes et d'une borne supérieure sur chacun des termes, il vient

$$\begin{aligned} \sum_{\{m_\alpha \in \mathcal{M}_\ell\}_{\alpha=1}^N} Z(m_1, \dots, m_N) &\leq |\mathcal{M}_\ell|^N \sup_{m_1, \dots, m_N} Z(m_1, \dots, m_N) \\ &\leq |\mathcal{M}_\ell|^N \sup_{m_1, \dots, m_N} \exp \left[\sum_{\alpha=1}^N \ell^d s_\ell(m_\alpha) + \beta \frac{1}{2} \ell^{2d} \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha^2 \sum_{\alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} + \beta h \ell^d \sum_{\alpha=1}^N m_\alpha \right] \\ &\leq |\mathcal{M}_\ell|^N \exp \left[N \sup_{m \in \mathcal{M}_\ell} \left\{ \ell^d s_\ell(m) + \beta \frac{1}{2} \ell^{2d} m^2 \sup_{\alpha} \left(\sum_{\alpha'=1}^N J_{r_\alpha, r_{\alpha'}} \right) + \beta h \ell^d m \right\} \right] \end{aligned} \quad (242)$$

où l'on a utilisé l'équation (241) pour passer de la première à la deuxième ligne.

On peut passer maintenant à la limite thermodynamique $\Lambda \rightarrow \infty$, ici en prenant $L \rightarrow \infty$. On sait d'après les résultats généraux que la limite existe, on peut donc écrire

$$\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} \frac{1}{L^d} \ln Z_\Lambda \leq b(\ell, R, \varphi, d) + \frac{1}{\ell^d} \ln(\ell^d + 1) + \sup_{m \in \mathcal{M}_\ell} \left\{ s_\ell(m) + \beta \frac{1}{2} m^2 \sum_{x \in \ell \mathbb{Z}^d} \ell^d J_{0,x} + \beta h m \right\}, \quad (243)$$

autrement dit

$$f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) \geq \inf_{m \in \mathcal{M}_\ell} \left\{ -\frac{1}{2} J(R, \ell) m^2 - h m - \frac{1}{\beta} s_\ell(m) \right\} - \frac{1}{\beta} b(\ell, R, \varphi, d) - \frac{1}{\beta} \frac{1}{\ell^d} \ln(\ell^d + 1) \quad (244)$$

avec

$$J(R, \ell) = \sum_{x \in \ell \mathbb{Z}^d} \ell^d J_{0,x} = \sum_{x \in \ell \mathbb{Z}^d} \frac{\ell^d}{R^d} \varphi\left(\frac{x}{R}\right) = \sum_{x \in \mathbb{Z}^d} \left(\frac{\ell}{R}\right)^d \varphi\left(\frac{\ell}{R} x\right) \quad (245)$$

Considérons maintenant la limite $R \rightarrow \infty$. On est libre de choisir dans la borne ci-dessus une dépendance arbitraire de ℓ par rapport à R , on va donc prendre $\ell(R) \rightarrow \infty$ quand $R \rightarrow \infty$, mais avec $\ell(R)/R \rightarrow 0$. On peut par exemple prendre $\ell(R) = \lfloor \sqrt{R} \rfloor$. Alors les deux derniers termes de l'équation (245) vont à 0 (d'après la caractérisation de b donnée en (236)), $J(R, \ell(R)) \rightarrow 1$, $s_\ell(m) \rightarrow s(m)$ (en utilisant le développement de Stirling des factorielles), et la minimisation sur \mathcal{M}_ℓ peut être remplacé par une minimisation sur $[-1, 1]$ (l'erreur ainsi faite est d'ordre $(\ln \ell)/\ell$ qui est bien négligeable). On obtient finalement

$$\liminf_{R \rightarrow \infty} f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) \geq f_{\text{cm}}(\beta, h), \quad (246)$$

qui combinée avec la borne (227) achève la preuve du théorème. \square

Notons que l'on peut exploiter de manière beaucoup plus poussée le passage ("coarse-graining" en anglais) des variables microscopiques σ_i aux variables "mésoscopiques" m_α . Dans la limite de Kac on peut en effet étudier les probabilités de profils d'aimantation mésoscopique $m(x)$, avec des coordonnées d'espace x désormais continues, qui sont données par une fonctionnelle d'énergie libre fait d'un terme local et d'une interaction de couplage φ . Ce genre d'études, largement développées dans le livre de Presutti, permet notamment de définir la tension de surface entre deux phases à une transition du premier ordre.

Revenons finalement sur l'objectif initial du chapitre, à savoir la justification de la construction de Maxwell. Dans le cadre des systèmes de spin on définirait $\widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi)$, l'énergie libre micro-canonique pour la paire de variables conjuguées $m \leftrightarrow h$, en contraignant la fonction de partition Z_Λ aux configurations d'aimantation par spin m (à un δ près, pris à 0 après la limite thermodynamique). D'après les résultats généraux énoncés et partiellement prouvés au chapitre précédent :

- $f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi)$ est une fonction concave de h (c'est facile à prouver en calculant sa dérivée seconde en volume fini)
- $\widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi)$ est une fonction convexe de m (on l'admet ici, même schéma que la preuve partielle donnée pour la concavité de l'entropie)
- $\widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi)$ et $f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi)$ sont transformées de Legendre l'une de l'autre (à des signes près par rapport à la définition standard des transformées de Legendre) :

$$f_{\text{Kac}}(h) = \inf_{m \in [-1, 1]} [\widehat{f}_{\text{Kac}}(m) - h m], \quad \widehat{f}_{\text{Kac}}(m) = \sup_{h \in \mathbb{R}} [f_{\text{Kac}}(h) + h m], \quad (247)$$

en gardant implicite les autres arguments (égaux) dans ces deux fonctions.

Dans la limite de Kac $R \rightarrow \infty$ on a vu que f_{Kac} avait pour limite $f_{\text{cm}}(\beta, h)$. On va finalement montrer un théorème similaire sur les énergies libres fonctions de m , qui justifie rigoureusement la construction de Maxwell :

Théorème 17. *Dans la limite des grandes portées l'interaction de Kac a pour énergie libre fonction de l'aimantation l'enveloppe convexe de celle de champ moyen :*

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) = E.C. \widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m) \quad (248)$$

Démonstration. D'après le résultat admis rappelé ci-dessus, $\widehat{f}_{\text{Kac}}(m, R) = \sup_{h \in \mathbb{R}} [f_{\text{Kac}}(h, R) + h m]$. Donc pour tout h , $\widehat{f}_{\text{Kac}}(m, R) \geq f_{\text{Kac}}(h, R) + h m$. En passant à la limite $R \rightarrow \infty$ et en utilisant le théorème précédent, il vient

$$\liminf_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) \geq f_{\text{cm}}(\beta, h) + h m, \quad (249)$$

et comme c'est vrai quelque soit h ,

$$\liminf_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) \geq \sup_{h \in \mathbb{R}} [f_{\text{cm}}(\beta, h) + h m]. \quad (250)$$

Par définition $f_{\text{cm}}(\beta, h) = \inf_m [f_{\text{cm}}(\beta, m) - h m]$, donc par les propriétés générales des transformées de Legendre vues au TD 3, $\sup_{h \in \mathbb{R}} [f_{\text{cm}}(\beta, h) + h m] = E.C. \widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m)$. On a donc prouvé pour l'instant

$$\liminf_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) \geq E.C. \widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m), \quad (251)$$

il reste donc à prouver une borne supérieure sur $\widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi)$ dans la limite $R \rightarrow \infty$. Pour cela on peut utiliser l'équation (225) pour écrire

$$f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) \leq -\frac{1}{2}J(R)m'^2 - h m' - \frac{1}{\beta}s(m') \quad \forall m' \in [-1, 1]. \quad (252)$$

Alors

$$\widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) = \sup_h [f_{\text{Kac}}(\beta, h, R, d, \varphi) + h m] \leq \sup_h \left[-\frac{1}{2}J(R)m'^2 + h(m - m') - \frac{1}{\beta}s(m') \right], \quad (253)$$

cette inégalité étant valable pour tout m' . En prenant $m' = m$ il vient

$$\widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) \leq -\frac{1}{2}J(R)m^2 - \frac{1}{\beta}s(m), \quad (254)$$

et en prenant la limite $R \rightarrow \infty$, pour laquelle $J(R) \rightarrow 1$, on obtient

$$\limsup_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) \leq \widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m). \quad (255)$$

En regroupant les deux inégalités il vient

$$E.C. \widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m) \leq \liminf_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) \leq \limsup_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi) \leq \widehat{f}_{\text{cm}}(\beta, m). \quad (256)$$

Or $\limsup_{R \rightarrow \infty} \widehat{f}_{\text{Kac}}(\beta, m, R, d, \varphi)$ est une fonction convexe de m (en tant que \limsup de telles fonctions pour tout R finie), comprise entre \widehat{f}_{cm} et son enveloppe convexe, elle est donc nécessairement égale à cette dernière, ce qui conclut la preuve du théorème. \square