

Aspects rigoureux de la mécanique statistique à l'équilibre

Corrigé du TD A : équivalences entre modèles

Jérémie Bouttier et Guilhem Semerjian

20 février 2014

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

1 Couplage entre modèle de Potts et FK-percolation

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

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

se factorise immédiatement en

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

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

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

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

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

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

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

(modèle de Potts ferromagnétique à q états en champ externe nul, le couplage pouvant être absorbé dans la température).

La fonction de partition est ainsi donnée par

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

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

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

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

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

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

qu'on peut réécrire

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

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

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

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

– approche combinatoire : on a

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

En substituant toutes ces expressions dans la relation

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

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

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

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

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

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

Pour la seconde intégrale, par linéarité il suffit de vérifier l’égalité pour des vecteurs \vec{u}_1, \vec{u}_2 de la base canonique de \mathbb{R}^n . Lorsque $\vec{u}_1 = \vec{u}_2$, on calcule la moyenne du carré de l’une des composantes d’un vecteur unitaire tiré uniformément sur S^{n-1} , qui vaut $1/n$ (la somme des carrés de toutes les composantes vaut 1, et toutes les composantes sont équidistribuées par invariance par rotation). Lorsque $\vec{u}_1 \neq \vec{u}_2$, l’intégrale est nulle puisque, si on considère une réflexion laissant \vec{u}_1 invariant et retournant \vec{u}_2 , alors l’intégrande change de signe mais la mesure est invariante.

4. On a

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

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

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

$$\int (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_3)(\vec{\sigma}_3 \cdot \vec{\sigma}_1) d\mu(\vec{\sigma}_1) d\mu(\vec{\sigma}_2) d\mu(\vec{\sigma}_3) = \frac{1}{n} \int (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{\sigma}_1) d\mu(\vec{\sigma}_1) d\mu(\vec{\sigma}_2) = \frac{1}{n^2} \int (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_1) d\mu(\vec{\sigma}_1) = \frac{1}{n^2}.$$

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

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

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

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

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

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

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

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