

Introduction à la physique statistique

M.Simon

2018-2019

Contents

1	Fondements	7
1.1	Motivations et origine de la thermodynamique	7
1.1.1	Notions de base	8
1.1.2	Les fondements de la mécanique statistique	9
1.1.3	Maximisation de l'entropie et loi de Boltzmann	10
1.2	Définitions générales des objets micro-canoniques	13
1.2.1	Distribution micro-canonique	13
1.2.2	Dynamique Hamiltonienne	15
1.2.3	Equipartition de l'énergie et thermalisation	17
1.2.4	Conclusion	17
1.3	L'équivalence des ensembles	18
1.4	Le modèle d'Ising	22
1.4.1	Une transition de phase pour les aimants	22
1.4.2	Définition du modèle d'Ising	23
2	Transition de phase dans le modèle d'Ising	27
2.1	Limite thermodynamique : pression et magnétisation	27
2.2	Calculs explicites en dimension 1	32
2.3	Première définition de la transition de phase	34
3	Mesures de Gibbs	39
3.1	Modèle d'Ising avec conditions au bord fixes	39

3.2	Notions de convergence et théorème	41
3.3	Inégalités de corrélation	42
3.3.1	Fonctions locales et fonctions cylindriques	42
3.3.2	Les inégalités GKS et FKG	43
3.3.3	Conséquences des inégalités GKS et FKG	44
3.4	Preuve du Théorème 3.2.1	46
3.5	Preuve de l'inégalité FKG	47
3.5.1	Construction d'une chaîne de Markov à partir de sa mesure invariante	47
3.5.2	Couplage monotone	49
3.5.3	Conclusion et preuve de l'inégalité FKG	50
3.6	Diagramme de phase	51
4	Unicité et finitude	53
4.1	Deux critères pour la non-unicité	53
4.2	La valeur critique $\beta_c(d)$	56
5	Haute température	59
5.1	Hautes températures	59
5.2	Lorsque $h \neq 0$	62
5.3	Résumé	62
6	Modèle de Curie-Weiss	65
6.1	Approximation de champs moyen	65
6.2	Comportement lorsque $h = 0$	66
6.3	Comportement en $h \neq 0$ lorsque N est suffisamment grand	70

References

- *A short course on mean field spin glasses*, Anton Bovier and Irina Kurkova.
In book: *Spin Glasses: Statics and Dynamics* (pp.3-44), Publisher: Birkhäuser Verlag, Basel. 2009.
- *Statistical Mechanics of Lattice Systems: A Concrete Mathematical Introduction*, S. Friedli and Y. Velenik.
Cambridge: Cambridge University Press, 2017.
- *A Remark on Stirling's Formula*, Herbert Robbins.
The American Mathematical Monthly, Vol. 62, No. 1 (Jan., 1955), pp. 26-29

Chapter 1

Fondements de la thermodynamique et introduction au modèle d'Ising

1.1 Motivations et origine de la thermodynamique

La théorie de la **thermodynamique** a connu un grand essor tout au long du XIX^{ème} siècle. L'objectif pour les scientifiques de l'époque est de comprendre comment l'énergie mécanique peut être convertie en énergie thermique, et réciproquement. À la fin du XIX^{ème} siècle, L. Boltzmann (physicien autrichien), postule que les lois de la thermodynamique doivent toutes être déduites des principes mécaniques donnés par les lois de Newton. Le problème est le suivant : les systèmes mécaniques sont principalement caractérisés par des quantités géométriques, telles que les positions et vitesses des objets. Lorsque l'on cherche à décrire un gaz, d'autres propriétés deviennent cruciales, en particulier, la température. Pour cette raison, la **mécanique statistique**, initiée par J. W. Gibbs, a fait son apparition et a connu un grand succès dans l'étude microscopique des gaz.

La physique classique se base souvent sur le postulat suivant : si l'état du système est connu précisément à un instant donné, alors les lois de la physique déterminent complètement son état futur. Cependant, en thermodynamique, plusieurs affirmations nécessitent d'avoir recours à des concepts probabilistes. Par exemple : *l'eau gèle à 0 degré celsius*, ou bien *lorsque deux corps à différente température sont en contact, la chaleur va du plus chaud vers le plus froid*. Il est en effet possible de construire des scénarios qui seraient consistants avec les

lois de la physique, mais qui violeraient chacune de ces affirmations, bien qu'ils soient extrêmement improbables (POUR ALLER PLUS LOIN : voir le paradoxe du *démon de Maxwell*).

1.1.1 Notions de base

Le but de la thermodynamique est de décrire les propriétés de systèmes **macroscopiques** à l'**équilibre**. Pour cela, on considère un petit nombre de variables, telles que : le volume V , l'énergie interne E , la pression P , le nombre de particules N , la température T , etc... Ces variables ne sont pas toutes indépendantes, il existe des **relations thermodynamiques** qui relient certaines d'entre elles, et qui peuvent être valides dans un contexte très général.

◇ Quelques principes de la thermodynamique :

1. Les variables thermodynamiques sont divisées en deux groupes : les variables **extensives**, qui changent avec la taille du système (V , E , N) et les variables **intensives**, qui restent invariantes (T , P).
2. Un système isolé est à l'**équilibre thermique** si T est uniforme au sein du système. Il est à l'**équilibre mécanique** si P est uniforme.
3. La **première loi de la thermodynamique** stipule que l'énergie E augmente lorsque l'on apporte de la chaleur au système, ou un travail mécanique. Mathématiquement, cela s'écrit :

$$dE = \delta Q + \delta W,$$

où δQ et δW sont des différentielles **inexactes**, c'est à dire que les intégrales $\int \delta Q$ et $\int \delta W$ ne dépendent pas seulement des points d'arrivée et de départ, mais également du chemin parcouru.

Exemple : Sur \mathbb{R}^2 , $\delta z = xdy - ydx$ n'est pas une forme différentielle exacte.

4. La **deuxième loi de la thermodynamique** stipule qu'il existe une fonction S appelée **entropie**, telle que, lorsque le système est isolé thermiquement (*i.e.* $\delta Q = 0$), elle vérifie $dS \geq 0$.

◇ Les trois lois de probabilité les plus utilisées en physique statistique :

1. La **loi uniforme** sur un sous-ensemble $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, qui a pour densité

$$U(x) = \begin{cases} 1/\text{Vol}(\Omega) & \text{si } x \in \Omega \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

2. La **loi normale** de moyenne μ et de variance σ^2 , dont la densité est donnée sur \mathbb{R} par

$$N(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right), \quad \mu \in \mathbb{R}, \sigma > 0. \quad (1.1)$$

Cette loi de probabilité apparaît très souvent à cause du **Théorème Central Limite**, en particulier, les quantités physiques qui sont supposées être la somme de plusieurs éléments indépendants (tels que les mesures d'erreur par exemple) ont des lois très proches des lois normales. Lorsque $\mu = 0$ et $\sigma = 1$, la loi normale est dite **standard**.

3. La loi de **Boltzmann-Gibbs**, qui a été introduite pour décrire la probabilité d'observer un système de particules X d'énergie $E(X) \geq 0$ à température fixée T :

$$\mathbb{P}(X) = \frac{1}{Z} e^{-E(X)/(k_B T)}, \quad (1.2)$$

où $k_B > 0$ est la **constante de Boltzmann** et Z est une constante de normalisation. Autrement dit, la probabilité décroît exponentiellement vite avec l'énergie.

1.1.2 Les fondements de la mécanique statistique

DÉFINITION 1.1.1. *Pour décrire un système thermodynamique, il faut :*

1. *Un macro-état, qui dépend d'un (relativement petit) nombre de variables telles que : pression, température.*
2. *Un micro-état, qui correspond à une description microscopique, i.e. de tous les constituants du gaz, au moyen de leurs positions et vitesses. Cette description nécessite un très grand nombre de données, et l'évolution temporelle est souvent extrêmement compliquée.*

La mécanique statistique ne s'intéresse pas à chaque micro-état individuellement, mais à l'ensemble des micro-états correspondant à un macro-état donné.

Autrement dit, un macro-état (V, T) (par exemple) correspond exactement à une loi de probabilité $f_{(V,T)}$ sur l'ensemble de tous les micro-états.

Le macro-état d'équilibre est celui qui est associé au plus grand nombre de micro-états, c'est-à-dire qu'il est le plus probable parmi tous les macro-états.

◇ **L'exemple de base :** Jouons à pile ou face, et considérons la pièce comme une particule, qui peut être dans deux états : 0 ou 1. Lorsque l'on lance N pièces, on obtient un système de N particules.

- Les **micro-états** sont tous les éléments de $\{0, 1\}^N$, il y en a 2^N au total.
- Les **macro-états** sont caractérisés par deux nombres : N_0 , le nombre de particules dans l'état 0, et N_1 , le nombre de particules dans l'état 1. Ils satisfont : $N_0 + N_1 = N$. Le nombre ω de micro-états associés à un macro-état (N_0, N_1) est donné par

$$\omega = \binom{N}{N_0} = \frac{N!}{N_0!(N - N_0)!}.$$

- Le macro-état $(N, 0)$ est moins probable que le macro-état $(N/2, N/2)$.

◇ **L'entropie :** La seconde loi de la thermodynamique affirme que si un système isolé n'est pas à l'équilibre initialement, alors il évoluera jusqu'à un état d'équilibre caractérisé par une **entropie maximale**. Par conséquent, l'entropie $S(X)$ et le nombre ω de micro-états associés au macro-état X doivent être reliés par une fonction monotone. Boltzmann a introduit :

$$S = k_B \log \omega,$$

cette formule étant aujourd'hui gravée sur sa tombe. L'entropie S a l'avantage d'être additive : si deux sous-systèmes n'interagissent pas entre eux, alors $S = S_1 + S_2$ tandis que $\omega = \omega_1 \omega_2$.

1.1.3 Maximisation de l'entropie et loi de Boltzmann

On considère maintenant un système de N particules, chacune pouvant être dans p états différents, notés $\{1, \dots, p\}$. Soit (N_1, \dots, N_p) un macro-état (N_i étant

le nombre de particules dans l'état i). Le nombre de micro-états possibles associés à (N_1, \dots, N_p) est donné par

$$\omega = \frac{N!}{N_1! \cdots N_p!}.$$

On suppose qu'il n'y a aucun échange d'énergie avec le système. En particulier, non seulement le nombre $N = N_1 + \cdots + N_p$ est fixé, mais cette fois l'énergie totale du système est elle aussi fixée. L'énergie de l'état $i \in \{1, \dots, p\}$ est notée $\varepsilon_i > 0$.

L'objectif est de définir la notion de **température**, en recherchant le macro-état d'équilibre, *i.e.* celui qui contient le plus grand nombre de micro-états. On doit donc trouver celui qui réalise le maximum de ω parmi tous les (N_1, \dots, N_p) qui satisfont

$$\sum_{i=1}^p N_i = N, \quad \sum_{i=1}^p N_i \varepsilon_i = N\varepsilon, \quad (1.3)$$

où $\varepsilon > 0$ est fixé. En pratique, il est plus pertinent de maximiser $\log(\omega)$ plutôt que ω , et le problème devient :

$$\max_{N_1, \dots, N_p} \left\{ \log \left(\frac{N!}{N_1! \cdots N_p!} \right) ; \text{ tel que } \sum_{i=1}^p N_i = N, \sum_{i=1}^p N_i \varepsilon_i = N\varepsilon \right\}.$$

On peut utiliser la méthode des multiplicateurs de Lagrange, et dans ce cas, la fonction à maximiser est

$$\Phi(N_1, \dots, N_p) = \log(\omega) + \alpha \sum_{i=1}^p N_i + \beta \sum_{i=1}^p N_i \varepsilon_i, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}.$$

On s'intéresse en particulier au comportement lorsque $N \rightarrow \infty$. En utilisant la formule de Stirling, on garde le terme dominant dans le développement asymptotique de Φ , qui devient :

$$\Phi(N_1, \dots, N_p) \simeq \log N! - \sum_{i=1}^p N_i \log(N_i) + (\alpha + 1) \sum_{i=1}^p N_i + \beta \sum_{i=1}^p N_i \varepsilon_i.$$

Lorsque l'on dérive par rapport aux N_i et qu'on cherche les points d'annulation, on obtient :

$$N_i = e^{\alpha + \beta \varepsilon_i}.$$

Les multiplicateurs α et β peuvent être déduits de (1.3) et la probabilité de trouver une particule dans l'état i est donnée par

$$p_i = \frac{N_i}{N} = \frac{1}{Z(\beta)} e^{\beta \varepsilon_i} \quad \text{avec } Z(\beta) = \sum_{i=1}^p e^{\beta \varepsilon_i}.$$

C'est exactement la version discrète de la loi de Boltzmann (1.2) (à condition que $\beta < 0$), et de plus β est donné de manière implicite par

$$\frac{d(\log Z)}{d\beta}(\beta) = \varepsilon. \quad (1.4)$$

On verra en exercice que cette équation admet une unique solution $\beta < 0$.

Autrement dit, p_i est la densité de particules dans l'état i , et on peut vérifier les relations

$$\sum_{i=1}^p p_i = 1, \quad \sum_{i=1}^p p_i \varepsilon_i = \varepsilon. \quad (1.5)$$

Par la suite, ω_{eq} désigne le nombre de micro-états possibles associés à $N_i = \lfloor N e^{\beta \varepsilon_i} / Z(\beta) \rfloor$.

DÉFINITION 1.1.2. *Le paramètre $T = (-k_B \beta)^{-1}$, où β est la solution de (1.4), est appelée température du système thermodynamique. En particulier, la température est définie seulement à l'équilibre, et dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$.*

DÉFINITION 1.1.3. *La quantité*

$$s(p_1, \dots, p_p) := -k_B \sum_{i=1}^p p_i \log(p_i) \quad (1.6)$$

est appelée entropie thermodynamique.

PROPOSITION 1.1.1. *L'entropie thermodynamique s'écrit également*

$$s(p_1, \dots, p_p) = s(\varepsilon, \beta) = k_B (-\beta \varepsilon + \log Z(\beta)).$$

On a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{k_B \log(\omega_{\text{eq}})}{N} = s(\varepsilon, \beta),$$

et

$$\frac{\partial s}{\partial \beta} = 0,$$

et par conséquent s est une fonction de ε uniquement.

On remarquera que le macro-état d'équilibre est celui qui maximise l'entropie fini-dimensionnelle $S_N(N_1, \dots, N_p) := k_B \log(\omega)$ (parmi tous les ω qui vérifient les conditions (1.3)). Enfin, on notera aussi que

$$\frac{\partial s}{\partial \varepsilon} = \frac{1}{T},$$

qui correspond à l'une des affirmations célèbres de la thermodynamique.

1.2 Définitions générales des objets micro-canoniques

Dans cette section nous allons donner des définitions plus générales.

1.2.1 Distribution micro-canonique

DÉFINITION 1.2.1 (Système thermodynamique). *Un système thermodynamique est composé de :*

1. un paramètre $N \in \mathbb{N}$ qui représente le nombre de particules
2. un espace d'état X et l'espace d'états produit X^N
3. un Hamiltonien $H_N : X^N \rightarrow \mathbb{R}$ qui représente la fonction énergie du système
4. éventuellement, des contraintes sur les paramètres macroscopiques.

REMARQUE 1.2.1. Pour un gaz, l'espace X est très généralement l'espace des phases pour une particule, c'est-à-dire les valeurs possibles prises par $x = (p, q)$ où p est le moment, et q la position de la particule. L'Hamiltonien H_N contient toutes les interactions entre les particules, et la contrainte est la fonction indicatrice que chaque position doit être à l'intérieur d'un certain volume V .

Par la suite on aura besoin des définitions suivantes :

DÉFINITION 1.2.2. *La fonction caractéristique $\mathbb{1}_A$ d'un ensemble A est définie comme*

$$\mathbb{1}_A(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in A, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

La fonction δ -Dirac sur \mathbb{R} est définie comme suit : pour toute fonction lisse ϕ , et tout $a \in \mathbb{R}$, elle satisfait

$$\int_{\mathbb{R}} \phi(y) \delta(y - a) dy = \phi(a).$$

DÉFINITION 1.2.3 (Ensemble micro-canonique). *L'ensemble micro-canonique d'un système thermodynamique est la collection de toutes les mesures de probabilités $f_{E,V,N}$ uniformes sur les ensembles*

$$\Omega_{E,V,N} := \{x \in X^N ; H_N(x) = E \text{ et } x \in V\}.$$

La fonction de partition micro-canonique est la fonction

$$Z_{E,V,N} := \frac{1}{N!} \int_{X^N} \delta(E - H_N(x)) \mathbb{1}_{x \in V} dx, \quad (1.7)$$

où δ est la fonction δ -Dirac sur \mathbb{R} et $\mathbb{1}_A$ est la fonction caractéristique de l'ensemble A .

L'entropie fini-dimensionnelle est définie comme

$$S(E, V, N) := \log(Z_{E,V,N}).$$

On remarquera que le facteur $1/N!$ est introduit ci-dessus afin de prendre en compte le caractère indistinguable des particules, et d'assurer que S soit proportionnelle à N (et additive). Enfin, la densité de probabilité micro-canonique des micro-états $x \in X^N$ associés au macro-état (E, V, N) est

$$f_{E,V,N}(x) := \frac{1}{Z_{E,V,N}} \times \frac{1}{N!} \delta(E - H_N(x)) \mathbb{1}_{x \in V}, \quad x \in \Omega_{E,V,N}.$$

REMARQUE 1.2.2. Dans beaucoup de livres de physique, cette dernière mesure est remplacée par la mesure de Lebesgue (normalisée) de l'ensemble $\{x \in X^N ; |H_N(x) - E| \leq \varepsilon\}$, qui donne les mêmes résultats en pratique. Notre choix est cohérent avec la physique classique : tout d'abord, il tient compte de la conservation de l'énergie, et de plus, le théorème de Liouville affirme que la mesure uniforme est invariante pour l'évolution du système qui suit une dynamique Hamiltonienne (voir Section 1.2.2 pour plus de détails).

REMARQUE 1.2.3. On remarque que la définition de la fonction δ -Dirac implique que, si ψ est une fonction sur X^N , alors

$$\int_{X^N} \int_{\mathbb{R}} \delta(y - H_N(x)) \psi(x) \phi(y) dy dx = \int_{X^N} \psi(x) \phi(H_N(x)) dx.$$

Nous pouvons désormais définir les concepts de température et de pression. À partir de maintenant nous supposons que la constante de Boltzmann k_B est égale à 1.

DÉFINITION 1.2.4. Supposons que l'entropie micro-canonique vérifie

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S(E, V, N)}{N} = s(e, v), \quad \text{où} \quad \frac{V}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} v \quad \text{et} \quad \frac{E}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} e.$$

La pression p et la température T sont définies comme

$$\frac{\partial s}{\partial e}(e, v) = \frac{1}{T} = \beta, \quad \frac{\partial s}{\partial v}(e, v) = \frac{p}{T}.$$

1.2.2 Dynamique Hamiltonienne

Dans cette section nous verrons pourquoi la loi micro-canonique est la plus naturelle. En mécanique Hamiltonienne, le système physique est décrit par ses coordonnées canoniques $\mathbf{r} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$, où chaque composante (p_i, q_i) correspond respectivement au moment et à la position de la particule i , tous deux éléments de \mathbb{R}^d . L'ensemble $(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)^N$ est l'espace d'état.

DÉFINITION 1.2.5. Les équations Hamiltoniennes sont associées à une fonction Hamiltonienne donnée

$$H_N(\mathbf{p}, \mathbf{q}) : (\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)^N \rightarrow \mathbb{R}$$

et gouvernent l'évolution temporelle du système de la façon suivante :

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{q}}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) \quad (1.8)$$

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = +\frac{\partial H_N}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) \quad (1.9)$$

REMARQUE 1.2.4. En réalité, nous effectuons ici un abus de notation : les moments p_i sont des vecteurs définis sur l'espace co-tangent.

Dans nos exemples, l'Hamiltonien représente l'énergie totale du système, qui est la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie potentielle, c'est-à-dire, de manière générale :

$$H_N(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^T p_i}{2m_i} + V(\mathbf{q}),$$

où $m_i > 0$ est la masse de la particule i et V est le potentiel d'interaction. Dans ce cas, l'équation (1.8) se traduit de la manière suivante : la dérivée temporelle du moment est égale à la force Newtonienne, *i.e.* l'opposé du gradient de l'énergie potentielle. L'équation (1.9) dit simplement que la dérivée temporelle de la position est égale à la vitesse.

REMARQUE 1.2.5. Une solution du système (1.8)+(1.9) vérifie la propriété suivante : $H_N(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) = H_N(\mathbf{p}(0), \mathbf{q}(0))$ est constante, autrement dit l'énergie totale est conservée au cours de l'évolution temporelle.

DÉFINITION 1.2.6. Le flot Hamiltonien $\varphi_t : (\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)^N \rightarrow (\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)^N$ est la fonction

$$\varphi_t(\mathbf{p}_*, \mathbf{q}_*) = (\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)), \quad (1.10)$$

où $(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$ est la solution du système (1.8)+(1.9) avec les conditions initiales $\mathbf{p}(0) = \mathbf{p}_*$ et $\mathbf{q}(0) = \mathbf{q}_*$.

Si l'on veut décrire l'évolution temporelle de n'importe quelle fonction de la forme $\mathbf{A}(t) = A(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$, alors on peut vérifier que

$$\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \{H_N, A\}(t),$$

où le symbole $\{\cdot, \cdot\}$ est appelé *crochet de Poisson* et est défini comme

$$\{B, A\} := \sum_{i=1}^N \frac{\partial B}{\partial p_i} \frac{\partial A}{\partial q_i} - \frac{\partial B}{\partial q_i} \frac{\partial A}{\partial p_i}.$$

Supposons que l'état initial n'est pas connu, mais que l'on connaît la *densité de probabilité* $\rho_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ qui donne la probabilité de trouver initialement (\mathbf{p}, \mathbf{q}) quelque part dans l'espace d'états. Si la condition initiale est donnée de cette manière (en termes de densité de probabilité), dans ce cas l'évolution temporelle doit aussi être décrite de manière probabiliste. Autrement dit, nous devons travailler avec la loi $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}; t)$, qui satisfait au temps initial $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}; 0) = \rho_0(\mathbf{p}, \mathbf{q})$.

Avec cette notation, la densité de points se trouvant à l'intérieur d'un volume $\Omega_0 \subset (\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d)^N$ au temps t est donnée par l'intégrale

$$N_{\Omega_0}(t) = \int_{\Omega_0} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}; t) d\mathbf{p}d\mathbf{q}.$$

THÉORÈME 1.2.1 (Liouville). *L'évolution temporelle de $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}; t)$ est régie par l'équation de continuité de Liouville*

$$\frac{d}{dt} \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}; t) = \{H_N, \rho\} = -\{\rho, H_N\}.$$

EXEMPLE 1.2.1 (Lois de probabilité invariantes). Le théorème de Liouville implique que si ρ constante sur l'espace des phases (*i.e.* la probabilité est uniforme), alors ρ est *invariante*, autrement dit $d\rho/dt = 0$.

Une autre loi de probabilité invariante est donnée par

$$\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{Z} e^{-H_N(\mathbf{p}, \mathbf{q})},$$

où Z est la constante de normalisation.

En général, les lois invariantes sont de bons candidats pour être *ergodiques*, et on peut s'attendre à ce qu'elles vérifient : pour toute fonction bornée g définie sur l'espace des phases,

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t g(\varphi_s(\mathbf{p}, \mathbf{q})) ds \longrightarrow \int g(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rho(\mathbf{p}, \mathbf{q}) d\mathbf{p}d\mathbf{q}. \quad (1.11)$$

Plus précisément, les moyennes temporelles de la dynamique convergent en temps long vers les moyennes spatiales prises par rapport aux lois uniformes. Ce résultat est souvent lié au *Théorème ergodique de Birkhoff*. Il s'avère que être invariant est une condition nécessaire pour être ergodique.

Lorsque ρ est la loi micro-canonique définie en Section 1.2, la moyenne temporelle (1.11) est appelée *moyenne micro-canonique*.

1.2.3 Equipartition de l'énergie et thermalisation

La convergence donnée en (1.11) est intéressante en physique lorsque g correspond à l'énergie potentielle ou l'énergie cinétique d'une particule. Une question particulièrement difficile pour les mathématiciens est la suivante : que peut-on dire des moyennes temporelles des fonctions individuelles d'énergie, et comment sont-elles reliées entre elles ?

Tout d'abord, prouver que la limite (1.11) existe est déjà non trivial. Il n'est pas difficile de voir que la moyenne micro-canonique de l'énergie cinétique de chaque particule prise individuellement est la même pour toutes les particules. Cette propriété est appelée *équipartition de l'énergie*. Elle est à la base de la définition de la température T en mécanique statistique : l'énergie cinétique moyenne de chaque particule doit être égale à $k_B T/2$.

Néanmoins, ce sont les moyennes temporelles de l'énergie cinétique qui devraient réellement donner une définition de la température. Supposons que le système soit initialement dans un état où toute l'énergie se concentre sur une seule particule. Si l'équipartition de l'énergie est vérifiée, on devrait voir un phénomène d'équilibration se produire : l'énergie cinétique devrait s'équilibrer équitablement, en moyenne, entre toutes les particules. Ce processus est appelé *thermalisation*.

1.2.4 Conclusion

On a vu que la loi micro-canonique, qui est uniforme sur $\Omega_{E,V,N}$ est invariante le long de l'évolution Hamiltonienne, qui correspond exactement à une dynamique des molécules consistante avec les lois de la physique classique. Pour cette raison, cette loi de probabilité est vue comme un macro-état d'*équilibre*.

REMARQUE 1.2.6. Malheureusement, les compétences mathématiques actuelles ne permettent pas de donner une preuve rigoureuse des théorèmes ergodiques qui donnent un lien solide entre la mécanique classique et la thermodynamique.

Il existe très peu d'exemples avec une démonstration complète : ceux-ci concernent principalement le mouvement de sphères dures dans des boîtes fermées (les *billars de Sinai*).

1.3 L'équivalence des ensembles

La difficulté principale qui apparait dans les calculs utilisant l'ensemble microcanonique provient de l'intégrale sur un espace contraint $\{H_N(x) = E\}$ en très grande dimension. Cela s'avère un problème de géométrie particulièrement ardu. C'est pour cette raison qu'il est plus judicieux de changer d'ensembles : nous allons désormais considérer le système où l'énergie n'est plus fixée mais peut varier, alors que la température sera fixée.

DÉFINITION 1.3.1. Soit $\beta > 0$. La fonction de partition canonique associée à (β, V, N) est donnée par

$$\zeta_{\beta, V, N} = \int e^{-\beta E} Z_{E, V, N} dE = \int e^{-\beta E + S(E, V, N)} dE = \frac{1}{N!} \int e^{-\beta H_N(x)} dx,$$

et est liée à la densité de probabilité canonique (ou mesure de Gibbs)

$$\mathcal{G}_{\beta, V, N}(x) = \frac{\int e^{-\beta E} Z_{E, V, N} f_{E, V, N}(x) dE}{\zeta_{\beta, V, N}} = \frac{e^{-\beta H_N(x)}}{\int e^{-\beta H_N(x)} dx}.$$

THÉORÈME 1.3.1 (Equivalence des ensembles). Supposons que l'entropie microcanonique vérifie

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{S(E, V, N)}{N} = s(e, v), \quad (1.12)$$

lorsque

$$\frac{V}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} v \quad \text{and} \quad \frac{E}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} e.$$

On fait l'hypothèse que s est strictement concave, continue, et vérifie, pour tout $\beta \geq 0$,

$$\int_{\{e; s(e, v) - \beta e \leq a\}} \exp(N[s(e, v) - \beta e]) de \leq C \exp(Na). \quad (1.13)$$

On définit la fonction $f(\beta, v)$ de la manière suivante :

$$\beta f(\beta, v) = \min_{e \in \mathbb{R}} \{e\beta - s(e, v)\}. \quad (1.14)$$

Enfin, on suppose que la convergence dans (1.12) est telle que, uniformément en e ,

$$\frac{S(E, V, N) - \beta E}{N[s(e, v) - \beta e]} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1. \quad (1.15)$$

Alors, pour tout $\beta \geq 0$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log \zeta_{\beta, V, N}}{\beta N} = -f(\beta, v). \quad (1.16)$$

REMARQUE 1.3.1. La fonction (βf) est appelée *transformée de Legendre* de s . On peut facilement montrer que, si s est différentiable et strictement concave, alors

$$f(\beta, v) = e^*(\beta, v) - \beta^{-1} s(e^*(\beta, v), v) \quad (1.17)$$

où e^* est l'unique solution de l'équation

$$\beta = \frac{\partial s(e, v)}{\partial e}.$$

Une fois de plus, on retrouve une relation fondamentale de la thermodynamique.

Preuve. On note

$$D_\delta := \{e \in \mathbb{R} ; s(e, v) - \beta e > s(e^*, v) - \beta e^* - \delta\},$$

et D_δ^c le complément de D_δ . D'une part, l'hypothèse sur la convergence uniforme (1.15) implique que, pour tout N suffisamment grand, on peut remplacer l'intégrande dans

$$\int e^{-\beta E + S(E, V, N)} dE \quad (1.18)$$

par sa limite : en effet, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $N_0 \in \mathbb{N}$ tel que, pour tout $N \geq N_0$, pour tout $e \in \mathbb{R}$,

$$\left| N^{-1} [S(E, V, N) - \beta E] - [s(e, v) - \beta e] \right| \leq \varepsilon |s(e, v) - \beta e|.$$

Plus précisément, pour de tels $N \geq 0$, on effectue le changement de variables $E = eN$ dans (1.18) et on majore

$$\begin{aligned} \int_{D_\delta^c} e^{-\beta eN + S(eN, V, N)} de &\leq \int_{D_\delta^c} e^{N[s - \beta e] + [S - \beta E - N(s - \beta e)]} de \\ &\leq \int_{D_\delta^c} e^{N[(s - \beta e) + \varepsilon |s - \beta e|]} de \\ &\leq C \exp(N[s(e^*, v) - \beta e^* + \varepsilon |s(e^*, v) - \beta e^*| - \delta]). \end{aligned}$$

D'autre part, pour N suffisamment grand, l'intégrale sur D_δ peut être majorée d'après (1.13) comme suit :

$$\int_{D_\delta} e^{-\beta eN + S(eN, V, N)} de \leq C \exp(N[s(e^*, v) - \beta e^*](1 + \varepsilon)).$$

De plus, puisque la fonction s a des dérivées bornées, sur un ensemble de taille N^{-1} l'intégrande ne peut pas varier plus qu'une constante $c > 0$, c'est-à-dire que l'on peut écrire :

$$\int_{D_\delta} e^{-\beta eN + S(eN, V, N)} de \geq cN^{-1} \exp(N[s(e^*, v) - \beta e^*](1 + \varepsilon)).$$

On prend le logarithme, on divise par N , et pour tout $\varepsilon > 0$ on obtient

$$-\beta f(\beta, v)(1 - \varepsilon) \leq \liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(N \int e^{-\beta eN + S(eN, V, N)} de \right)$$

et

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left(N \int e^{-\beta eN + S(eN, V, N)} de \right) \leq -\beta f(\beta, v)(1 + \varepsilon).$$

Ceci implique (1.16). □

◇ **Conclusion :** Le théorème d'équivalence des ensembles justifie l'utilisation de l'ensemble *canonique* pour calculer des quantités thermodynamiques, et donc l'utilisation de la fonction de partition canonique plutôt que micro canonique. On peut en particulier tout calculer à l'aide de transformées de Legendre.

On souligne que cette équivalence n'est valide que lorsque le nombre de particules (et donc, le volume, l'énergie, etc...) devient infini. Ceci illustre le fait que la mécanique statistique ne s'intéresse qu'à la description du système lorsque sa taille devient très grande.

RÉSUMÉ: La **mécanique statistique** ne cherche pas à donner une description complète de tous les constituants d'un gaz (au nombre de l'ordre de 10^{23}), mais cherche une **loi de probabilité** sur tous les **micro-états** qui soit compatible avec un **macro-état** donné.

La modélisation microscopique des gaz à l'**équilibre** peut être décrite ainsi :

1. Si N = nombre de particules, E = énergie *totale* du système, et V = volume dans lequel se situent les particules:

$(H_N, \Omega_{E,V,N}) \mapsto$ loi de probabilité **micro-canonique** $f_{E,V,N}$ à **énergie fixée**:

$$H_N(x) = E, \quad x \in \Omega_{E,V,N}.$$

Cette mesure est difficile à manipuler (mesure uniforme sur des niveaux d'énergie *a priori* très compliqués), on préfère fixer la température, mais on ne peut pas le faire comme précédemment car il n'existe pas de fonction similaire à l'Hamiltonien pour la température.

2. On préfère donc utiliser la **mesure de Gibbs canonique**

$$\mathcal{G}_{\beta,V,N}(x) = \frac{e^{-\beta H_N(x)}}{\int_{\Omega_{V,N}} e^{-\beta H_N(z)} dz}, \quad \text{avec } x \in \Omega_{V,N} := \{x \in X^N ; x \in V\}$$

et $\beta > 0$ nommé **inverse de la température** est relié à l'énergie :

- (i) Si $|X| < \infty$ (on exclut donc le cas $X = \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ de la Section 1.2.2, mais on se place dans le cadre de la Section 1.1.3, où le paramètre V n'est plus une donnée du problème), alors, grâce aux multiplicateurs de Lagrange, on peut voir que la mesure de probabilité *discrète*

$$\mu_\beta(x) = \frac{e^{-\beta H_N(x)}}{\sum_{y \in X^N} e^{-\beta H_N(y)}}, \quad x \in X^N \quad (1.19)$$

est celle qui maximise l'**entropie**

$$- \sum_{x \in X^N} \mu(x) \log(\mu(x)),$$

sur l'ensemble de toutes les mesures de probabilité μ à support dans X^N et vérifiant la condition

$$\sum_{x \in X^N} \mu(x) H_N(x) = E. \quad (1.20)$$

Le paramètre β est uniquement déterminé par la relation (1.20) une fois que l'on sait que le maximiseur de l'entropie s'écrit sous la forme (1.19).

- (ii) Si $|X| = \infty$, alors β et E ne sont reliés *a priori* que dans la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$. C'est le résultat du **théorème de l'équivalence des ensembles**.

À partir de maintenant nous allons considérer le cas $|X| < \infty$.

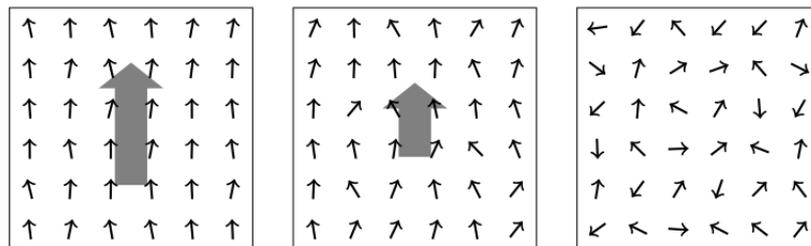
1.4 Le modèle d'Ising

1.4.1 Une transition de phase pour les aimants

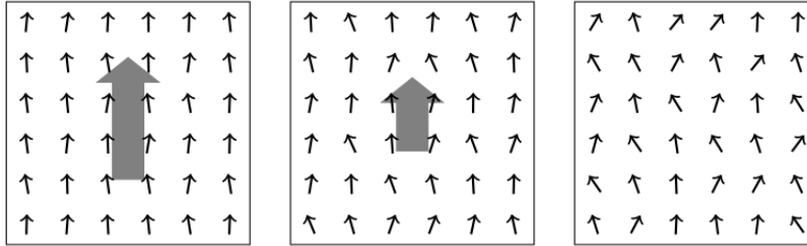
Le modèle d'Ising a été introduit par Wilhelm Lenz en 1920, dans le but de comprendre les transitions de phase entre des comportements dits *ferromagnétiques* et *paramagnétiques* (Ising était étudiant en thèse sous la supervision de Lenz). En effet, il avait été observé en 1895 par Pierre Curie qu'un même matériau pouvait être ferromagnétique ou paramagnétique, en fonction de sa température (d'où une transition de phase entre les deux comportements). Plus précisément, ce phénomène peut être mesuré quantitativement grâce à la **magnétisation**. Supposons que le matériau soit soumis à un champ magnétique extérieur $h\vec{u}$, d'intensité $h \in \mathbb{R}$ orienté dans la direction \vec{u} . Le matériau est lui composé d'atomes qui portent chacun un moment magnétique d'intensité 1, qui a tendance à s'aligner sur le champ extérieur. La magnétisation m correspond à la moyenne de tous les spins, projetés sur \vec{u} . Si tous les spins sont alignés sur le champ extérieur, alors la magnétisation m sera très proche de $\text{sgn}(h) = \pm 1$.

Imaginons maintenant que l'on fasse décroître l'intensité h jusque 0. Deux phénomènes peuvent se produire :

1. la **paramagnétisation** : la magnétisation tend elle aussi vers 0, c'est-à-dire que les spins perdent complètement leur alignement



2. la **ferromagnétisation** : les interactions entre spins restent suffisamment fortes pour conserver un certain alignement, même sans la présence d'un champ extérieur. Dans ce cas, m tend vers une valeur appelée **magnétisation spontanée** $\pm m^*$, dont le signe dépend si le champ extérieur h tend vers 0 par valeurs positives ou négatives :



1.4.2 Définition du modèle d'Ising

Le modèle d'Ising s'est avéré le premier système atomique avec interactions pour lequel il a été possible de prouver rigoureusement la présence d'une telle transition de phase.

Dans le modèle d'Ising, l'ensemble des **micro-états** (aussi appelés **configurations**) est

$$\Omega_\Lambda := \{-1, 1\}^\Lambda, \quad \text{où } \Lambda \subset \mathbb{Z}^d.$$

La valeur ± 1 au site $x \in \Lambda$ est appelé **spin**. L'ensemble Λ est un réseau pour lequel x et y sont voisins, notés $x \sim y$, si et seulement si $\|x - y\|_1 = 1$.

Les **interactions**, encodées dans l'Hamiltonien, sont définies de telle sorte que

- les seules interactions possibles sont entre deux voisins $x \sim y$ de Λ ;
- l'interaction doit favoriser les configurations pour lesquelles les spins de deux sites voisins sont identiques. Autrement dit, si $\omega_x = \omega_y$, alors l'énergie totale (ou l'Hamiltonien) décroît (ce qui augmente la valeur de la probabilité), et si $\omega_x \neq \omega_y$ alors l'énergie totale croît ;
- les spins cherchent à s'aligner avec un champ magnétique extérieur $h \in \mathbb{R}$.

Ceci conduit à la définition de l'**Hamiltonien** pour le modèle d'Ising :

$$H_{\Lambda, \beta, h}(\omega) := -\beta \sum_{x \sim y} \omega_x \omega_y - h \sum_{x \in \Lambda} \omega_x.$$

La **mesure de Gibbs** est notée

$$\mathcal{G}_{\Lambda, \beta, h}(\omega) = \frac{e^{-H_{\Lambda, \beta, h}(\omega)}}{Z_{\Lambda, \beta, h}}.$$

La **limite thermodynamique** est lorsque Λ devient très grand, par exemple lorsque $\Lambda = \{-n, \dots, n\}^d$ avec $n \rightarrow \infty$. Dans ce cas le nombre de spins est $N = n^d = |\Lambda|$.

DÉFINITION 1.4.1 (Magnétisation). *La magnétisation totale est l'observable donnée par*

$$M_\Lambda(\omega) = \sum_{x \in \Lambda} \omega_x.$$

La densité de magnétisation est

$$m_\Lambda(\omega) = \frac{M_\Lambda(\omega)}{|\Lambda|} \in [-1, 1].$$

Si m_Λ est proche de 0, alors la quantité de -1 et $+1$ est pratiquement égale. Si m_Λ est proche de l'une de ces deux valeurs, alors les spins sont presque tous alignés dans le même sens.

Enfin, on définit la magnétisation moyenne

$$\bar{m}_\Lambda(\beta, h) = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} m_\Lambda(\omega) \mathcal{G}_{\Lambda, \beta, h}(\omega).$$

QUESTIONS QUE L'ON VA SE POSER :

1. Si $h \neq 0$, les spins ont-ils tendance à s'aligner sur $\text{sgn}(h)$? Autrement dit, est-ce que la magnétisation moyenne $\bar{m}_\Lambda(\beta, h)$ est proche de $\text{sgn}(h)$, quelque soit β , lorsque Λ devient infiniment grand ?
2. Si $h = 0$, peut-on observer les comportements distincts :
 - (i) ou bien, la magnétisation moyenne est proche de 0 (la proportion de ± 1 est presque identique)
 - oui à haute température (β petit)
 - (ii) ou bien, la mesure de Gibbs $\mathcal{G}_{\Lambda, \beta, 0}$ se concentre essentiellement sur deux configurations : la configuration ω^+ où tous les spins sont égaux à $+1$, et la configuration ω^- où tous les spins sont -1
 - oui à faible température (β grand)
 - dans ce cas, il est judicieux de regarder le comportement de $\bar{m}_\Lambda(\beta, h)$ lorsque $h \rightarrow 0^+$ et $h \rightarrow 0^-$. On s'attend en effet à ce que les deux limites ne coïncident pas.
3. Dans le cas $h = 0$, y a-t-il une valeur de β critique où l'on passe d'un comportement à un autre ? Comme peut-on décrire cette **transition de phase** ?

LES DIFFICULTÉS :

Ces comportements seront observés dans la limite thermodynamique (Λ infiniment grand), et pour commencer, dans les limites à faible et haute température ($\beta \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow \infty$). On sera aussi intéressé à la limite $h \rightarrow 0$ (pour connaître la magnétisation spontanée). Donc, au total, trois limites, à prendre dans le bon ordre !

Chapter 2

Transition de phase dans le modèle d'Ising

2.1 Limite thermodynamique : pression et magnétisation

DÉFINITION 2.1.1 (Pression). *La pression micro-canonique du modèle d'Ising est définie comme*

$$\psi_\Lambda(\beta, h) = \frac{1}{|\Lambda|} \log(Z_{\Lambda, \beta, h}).$$

LEMME 2.1.1. *La pression et la magnétisation moyenne sont reliés par*

$$\bar{m}_\Lambda(\beta, h) = \frac{\partial \psi_\Lambda(\beta, h)}{\partial h}.$$

La fonction $(\beta, h) \mapsto \psi_\Lambda(\beta, h)$ est convexe.

Proof. La première égalité est un simple calcul. Soit $\alpha \in [0, 1]$. On remarque tout d'abord que $H_{\Lambda, \beta, h}$ est une fonction affine du couple (β, h) . On peut donc écrire l'égalité suivante, puis appliquer l'inégalité d'Hölder:

$$\begin{aligned} Z_{\Lambda, \alpha\beta_1 + (1-\alpha)\beta_2, \alpha h_1 + (1-\alpha)h_2} &= \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} \exp(-\alpha H_{\Lambda, \beta_1, h_1}(\omega) - (1-\alpha)H_{\Lambda, \beta_2, h_2}(\omega)) \\ &\leq \left(\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} e^{-H_{\Lambda, \beta_1, h_1}(\omega)} \right)^\alpha \left(\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda} e^{-H_{\Lambda, \beta_2, h_2}(\omega)} \right)^{1-\alpha}, \end{aligned}$$

ce qui prouve que ψ_Λ est convexe. □

On considérera principalement deux cas :

1. **le modèle symétrique centré en 0**, i.e. $\Lambda = \{-n, \dots, n\}^d =: \mathcal{B}(n)$
2. **le modèle sur le tore**, i.e. défini de la manière suivante : l'ensemble des sites sur lesquels sont disposés les spins est

$$\Lambda = \{0, \dots, n-1\}^d =: \mathcal{V}(n)$$

et deux sites x, y sont voisins si et seulement si

$$\sum_{i=1}^d |(x_i - y_i) \bmod n| = 1.$$

Dans ce cas, pour se rappeler que les conditions au bord sont périodiques, on notera l'Hamiltonien

$$H_{\mathcal{V}(n), \beta, h}^{\text{per}}(\omega) = -\beta \sum_{x \sim y} \omega_x \omega_y - h \sum_{x \in \mathcal{V}(n)} \omega_x$$

et de même pour $\mathcal{G}_{\mathcal{V}(n), \beta, h}^{\text{per}}$, $\mathcal{Z}_{\mathcal{V}(n), \beta, h}^{\text{per}}$, $\mathcal{M}_{\mathcal{V}(n)}^{\text{per}}$ etc.

THÉORÈME 2.1.2. *Dans la limite thermodynamique $n \rightarrow \infty$, la pression*

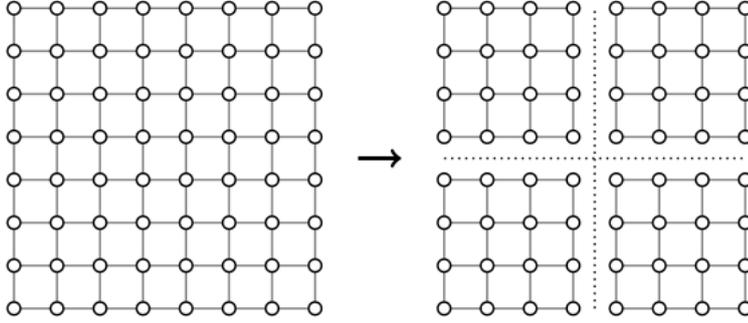
$$\psi(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{\Lambda_n}(\beta, h)$$

est bien définie et ne dépend pas du réseau $\Lambda_n = \mathcal{B}(n)$ ou $\Lambda_n = \mathcal{V}(n)$ choisi, ni des conditions de bord (périodiques ou non). De plus, elle est convexe sur $\mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}$ et vérifie $\psi(\beta, h) = \psi(\beta, -h)$.

Proof. Step 1: existence de la limite. On commence par montrer que la limite existe dans le cas $\Lambda = \mathcal{B}(n)$.

Pour cela, on considère d'abord $\Lambda = \mathcal{D}(n) = \{1, 2, \dots, 2^n\}^d$ et ceci impliquera que la limite existe pour $\Lambda = \mathcal{B}(n)$ et $\Lambda = \mathcal{V}(n)$ (sans conditions de bord périodiques).

On va montrer que la pression dans la boîte $\mathcal{D}(n+1)$ est très proche de la pression dans la boîte $\mathcal{D}(n)$. Il est possible de décomposer $\mathcal{D}(n+1)$ en 2^d translatés disjoints de $\mathcal{D}(n)$, notés $\mathcal{D}^1(n), \dots, \mathcal{D}^{2^d}(n)$.



L'Hamiltonien sur $D(n+1)$ se décompose alors :

$$H_{D(n+1)}(\omega) = \sum_{i=1}^{2^d} H_{D^i(n)}(\omega) + R_n,$$

où R_n contient toutes les interactions entre des spins qui appartiennent à des sous-boîtes différentes, c'est-à-dire ceux qui sont situés sur les faces de contact. Il y a exactement d faces, et chacune de ces faces contient $(2^{n+1})^{d-1}$ points. On peut donc borner :

$$|R_n| \leq \beta d (2^{n+1})^{d-1}.$$

On écrit donc

$$H_{D(n+1)}(\omega) \geq \sum_{i=1}^{2^d} H_{D^i(n)}(\omega) - \beta d (2^{n+1})^{d-1},$$

ce qui implique

$$Z_{D(n+1)} \leq e^{\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} \sum_{\omega \in \Omega_{D(n+1)}} \prod_{i=1}^{2^d} \exp(-H_{D^i(n)}(\omega)).$$

Dans la somme, on peut de nouveau décomposer $D(n+1)$ et on écrit alors 2^d sommes sur $\omega^i \in D^i(n)$:

$$\sum_{\omega \in \Omega_{D(n+1)}} \prod_{i=1}^{2^d} \exp(-H_{D^i(n)}(\omega)) = \prod_{i=1}^{2^d} \sum_{\omega^i \in \Omega_{D^i(n)}} \exp(-H_{D^i(n)}(\omega^i)) = (Z_{D(n)})^{2^d}.$$

On obtient de la même façon une borne inférieure, et en résumé :

$$e^{-\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} (Z_{D(n)})^{2^d} \leq Z_{D(n+1)} \leq e^{\beta d 2^{(n+1)(d-1)}} (Z_{D(n)})^{2^d}.$$

On prend alors le logarithme, on divise par $|D(n+1)| = 2^{d(n+1)}$, et on obtient

$$|\psi_{D(n+1)} - \psi_{D(n)}| \leq \frac{\beta d 2^{(n+1)(d-1)}}{2^{d(n+1)}} = \beta d 2^{-(n+1)}.$$

Ceci implique que $(\psi_{D(n)})$ est une suite de Cauchy : pour tout $n \leq m$,

$$|\psi_{D(m)} - \psi_{D(n)}| \leq \beta d (2^{-n} - 2^{-m}).$$

Donc la limite $\lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{D(n)}$ existe et on la note ψ .

Step 2: limite dans le cas général $\Lambda_n = \mathcal{B}(n)$ ou $\Lambda_n = \mathcal{V}(n)$. Commençons par quelques remarques utiles. Le bord de Λ_n noté $\partial\Lambda_n$ est composé de $2d$ faces de dimension $d-1$, c'est-à-dire :

- $|\partial\Lambda_n| = 2d(2n+1)^{d-1}$ points, dans le cas $\Lambda_n = \mathcal{B}(n)$,
- $|\partial\Lambda_n| = 2dn^{d-1}$ points dans le cas $\Lambda_n = \mathcal{V}(n)$.

Enfin, $[\Lambda_n] \setminus \Lambda_n$ contient au plus $|\partial\Lambda_n| |D_k|$ points.

On fixe un entier $k \in \mathbb{N}$ et on partitionne \mathbb{Z}^d en partant de D_k et en pavant tout le domaine par des translatés de D_k , tous adjacents. Pour chaque $n \in \mathbb{N}$ on note $[\Lambda_n]$ un *recouvrement minimal* de Λ_n par des éléments de cette partition, c'est-à-dire : il existe $J \subset \mathbb{N}$ tel que

$$\Lambda_n \subset [\Lambda_n] := \bigcup_{j \in J} D_k^{(j)}$$

et de plus, si pour un certain $J' \subset \mathbb{N}$ on a

$$\Lambda_n \subset \bigcup_{j \in J'} D_k^{(j)}, \quad \text{alors } J \subset J'.$$

On compare alors ψ_{Λ_n} avec la limite précédente ψ , en utilisant l'inégalité triangulaire de la manière suivante :

$$|\psi_{\Lambda_n} - \psi| \leq |\psi_{\Lambda_n} - \psi_{[\Lambda_n]}| + |\psi_{[\Lambda_n]} - \psi_{D_k}| + |\psi_{D_k} - \psi|.$$

Soit $\varepsilon > 0$. Puisque, d'après l'étape précédente, $\psi_{D_k} \rightarrow \psi$ lorsque $k \rightarrow \infty$, il existe k_0 (qui dépend des paramètres β, h et de ε) tel que

$$|\psi_{D_k} - \psi| \leq \varepsilon/3, \quad \text{pour tout } k \geq k_0.$$

On calcule ensuite $\psi_{[\Lambda_n]}$: de manière similaire à ce qui précède, on montre facilement que

$$H_{[\Lambda_n]}(\omega) = \sum_{j \in J} H_{D_k^{(j)}}(\omega) + W_n,$$

où W_n contient toutes les interactions entre les sites qui sont situées sur les faces de dimension $d - 1$ des boîtes D_k (qui sont adjacentes). Il y a exactement $|J| = |[\Lambda_n]| / |D_k|$ telles boîtes. On en déduit

$$|W_n| \leq \beta \frac{|[\Lambda_n]|}{|D_k|} \frac{2d(2^k)^{d-1}}{2} = \beta d 2^{-k} |[\Lambda_n]|.$$

Par conséquent, un calcul très identique à celui effectué dans l'étape 1 montre qu'il existe k_1 (qui dépend de β et ε) tel que

$$|\psi_{[\Lambda_n]} - \psi_{D_k}| \leq \frac{|W_n|}{|[\Lambda_n]|} = \beta d 2^{-k} \leq \varepsilon/3.$$

On fixe alors $k \geq \max\{k_0, k_1\}$. Et on définit $\Delta_n := [\Lambda_n] \setminus \Lambda_n$. On voit facilement que

$$|H_{\Lambda_n}(\omega) - H_{[\Lambda_n]}(\omega)| \leq (2d\beta + |h|)|\Delta_n| \leq (2d\beta + |h|)|\partial\Lambda_n||D_k|, \quad \omega \in \Omega_{[\Lambda_n]}.$$

On en déduit :

$$\begin{aligned} Z_{[\Lambda_n]} &= \sum_{\omega \in \Omega_{[\Lambda_n]}} e^{-H_{[\Lambda_n]}(\omega)} \leq \sum_{\omega' \in \Omega_{\Lambda_n}} e^{-H_{\Lambda_n}(\omega')} \sum_{\omega'' \in \Omega_{\Delta_n}} e^{(2d\beta + |h|)|\Delta_n|} \\ &= e^{(2d\beta + |h| + \log 2)|\Delta_n|} Z_{\Lambda_n}. \end{aligned}$$

On en déduit,

$$|\log Z_{[\Lambda_n]} - \log Z_{\Lambda_n}| \leq |\partial\Lambda_n||D_k| (2d\beta + |h| + \log 2).$$

Enfin, puisque

$$1 \leq \frac{|[\Lambda_n]|}{|\Lambda_n|} \leq 1 + \frac{|\partial\Lambda_n||D_k|}{|\Lambda_n|}$$

et en utilisant le fait que $|\partial\Lambda_n|/|\Lambda_n| \rightarrow 0$, on a pour n assez grand

$$|\psi_{\Lambda_n} - \psi_{[\Lambda_n]}| \leq \varepsilon/3.$$

On en déduit que, pour n assez grand

$$|\psi_{\Lambda_n} - \psi| \leq \varepsilon.$$

Step 3: indépendance des conditions de bord (périodiques ou non). On doit maintenant comparer $\psi_{V(n)}^{\text{per}}$ avec $\psi_{V(n)}$ (pour lequel on sait que la limite existe).

On le fait de la même façon que précédemment : dans $H_{V(n)}^{\text{per}}$ il y a dn^{d-1} interactions supplémentaires (celles entre les faces de dimension $d-1$), et on peut montrer de manière similaire que

$$e^{-\beta dn^{d-1}} Z_{V(n)} \leq Z_{V(n)}^{\text{per}} \leq e^{\beta dn^{d-1}} Z_{V(n)},$$

and therefore

$$|\psi_{V(n)}^{\text{per}} - \psi_{V(n)}| \leq \frac{\beta dn^{d-1}}{n^d} = \beta dn^{-1} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Step 4: convexité et symétrie. Puisque $(\beta, h) \mapsto \psi_{\Lambda}(\beta, h)$ est convexe (Lemme 2.1.1), sa limite est également convexe. De même, il est facile de voir que $h \mapsto \psi_{\Lambda}(\beta, h)$ et $h \mapsto \psi_{\Lambda}^{\text{per}}(\beta, h)$ sont paires, quelque soit β . Il en est donc de même pour la limite. \square

2.2 Calculs explicites en dimension 1

Dans toute cette section on supposera $d = 1$. Nos deux espaces deviennent $\mathcal{B}(n) = \{-n, \dots, n\}$ et $V(n) = \mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$.

THÉORÈME 2.2.1. *Pour tout $\beta \geq 0$ et tout $h \in \mathbb{R}$, la pression $\psi(\beta, h)$ est égale à*

$$\psi(\beta, h) = \log \left\{ e^{\beta} \cosh(h) + \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)} \right\}$$

Proof. Puisque la limite $\psi(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{\Lambda_n}(\beta, h)$ ne dépend pas de Λ_n , on va choisir $\Lambda_n = V(n)$ avec conditions au bord périodiques. Grâce à ce choix, on va écrire $Z_{V(n), \beta, h}^{\text{per}}$ comme la trace d'une matrice 2×2 . En effet, pour chaque $\omega \in \Omega_{V(n)}$, on a $\omega = (\omega_0, \dots, \omega_{n-1})$, et on définit par convention $\omega_n = \omega_0$. Alors, la fonction de partition s'écrit

$$\begin{aligned} Z_{V(n), \beta, h}^{\text{per}} &= \sum_{\omega \in \Omega_{V(n)}} e^{-H_{V(n), \beta, h}^{\text{per}}(\omega)} \\ &= \sum_{\omega_0 = \pm 1} \sum_{\omega_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\omega_{n-1} = \pm 1} \prod_{i=0}^{n-1} e^{\beta \omega_i \omega_{i+1} + h \omega_i}. \end{aligned}$$

On note A la matrice:

$$A := \begin{pmatrix} A_{++} & A_{+-} \\ A_{-+} & A_{--} \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} e^{\beta+h} & e^{-\beta-h} \\ e^{-\beta+h} & e^{\beta-h} \end{pmatrix}.$$

Cette définition nous permet d'écrire $Z_{V(n),\beta,h}^{\text{per}}$ comme

$$Z_{V(n),\beta,h}^{\text{per}} = \sum_{\omega_0=\pm 1} \sum_{\omega_1=\pm 1} \cdots \sum_{\omega_{n-1}=\pm 1} \prod_{i=1}^{n-1} A_{\omega_{i+1},\omega_i}.$$

On remarque alors que, pour tout n , le coefficient de la n -ème puissance de A se calcule :

$$\begin{aligned} (A^n)_{\omega_0\omega_0} &= \sum_{\omega_1=\pm 1} A_{\omega_1\omega_0} (A^{n-1})_{\omega_0\omega_1} = \sum_{\omega_1=\pm 1} A_{\omega_1\omega_0} \sum_{\omega_2=\pm 1} A_{\omega_2\omega_1} (A^{n-2})_{\omega_0\omega_2} \\ &= \cdots \\ &= \sum_{\omega_1=\pm 1} \cdots \sum_{\omega_{n-1}=\pm 1} A_{\omega_1\omega_0} \cdots A_{\omega_0\omega_{n-1}}. \end{aligned}$$

Et ainsi

$$Z_{V(n),\beta,h}^{\text{per}} = \text{Tr}(A^n).$$

Il suffit donc de calculer les valeurs propres de la matrice A . Elles sont données par

$$\lambda_{\pm} = e^{\beta} \cosh(h) \pm \sqrt{e^{2\beta} \cosh^2(h) - 2 \sinh(2\beta)},$$

avec $\lambda_+ > \lambda_-$. On en déduit

$$\frac{\log Z_{V(n),\beta,h}^{\text{per}}}{n} = \log \lambda_+ + \frac{1}{n} \log \left(1 + \left(\frac{\lambda_-}{\lambda_+} \right)^n \right) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \log \lambda_+.$$

□

COROLLAIRE 2.2.2. *La densité de magnétisation moyenne*

$$\bar{m}(\beta, h) := \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{m}_{\Lambda_n}(\beta, h)$$

est bien définie, ne dépend pas du choix $\Lambda_n = \mathcal{B}(n)$ ou $\Lambda = V(n)$, et elle vérifie

$$\bar{m}(\beta, h) = \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h).$$

De plus, $h \mapsto \bar{m}(\beta, h)$ est continue sur \mathbb{R} (quelque soit β) et

$$\lim_{h \rightarrow 0} \bar{m}(\beta, h) = \bar{m}(\beta, 0) = 0.$$

C'est ce qu'on appelle un comportement paramagnétique : lorsque l'intensité du champ extérieur tend vers 0, les spins perdent complètement leur alignement, et la proportion de ± 1 devient comparable.

Proof. Pour prouver que la limite existe, il suffit d'inverser deux limites :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \overline{m}_{\Lambda_n}(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\partial \psi_{\Lambda_n}(\beta, h)}{\partial h} = \frac{\partial}{\partial h} \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{\Lambda_n}(\beta, h) = \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h).$$

Pour montrer la deuxième égalité, on utilise la propriété suivante : Soit $\{g_n\}$ une suite de fonctions convexes qui convergent ponctuellement vers une fonction g . Si g est différentiable en x , alors $\lim_{n \rightarrow \infty} \partial^+ g_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \partial^- g_n(x) = g'(x)$.

Pour montrer le dernier point, on peut facilement vérifier que

$$\frac{\partial \psi(\beta, 0)}{\partial h} = 0$$

en utilisant la parité de $h \mapsto \psi(\beta, h)$ donnée par le Théorème 2.1.2. \square

REMARQUE 2.2.1. On remarque que ce résultat ne dépend pas de l'aspect unidimensionnel, mais seulement du fait que $\psi(\beta, \cdot)$ est suffisamment régulière. En fait, ce résultat peut se généraliser, c'est l'objet du paragraphe suivant.

2.3 Première définition de la transition de phase

On note

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}_\beta &:= \{h \in \mathbb{R} ; \psi(\beta, \cdot) \text{ n'est pas différentiable en } h\} \\ &= \left\{ h \in \mathbb{R} ; \frac{\partial \psi}{\partial h^-}(\beta, h) \neq \frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h) \right\} \end{aligned}$$

LEMME 2.3.1 (Rappels sur les fonctions convexes). *L'ensemble \mathfrak{D}_β est au plus dénombrable.*

Proof. On va le montrer pour n'importe quelle fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ convexe. Puisque \mathbb{R} est une union dénombrable d'intervalles fermés $[a, b]$, il suffit de se restreindre à un tel intervalle. La définition d'une fonction convexe nous dit que, pour tout $x < y < z$,

$$\frac{f(y) - f(x)}{y - x} \leq \frac{f(z) - f(x)}{z - x} \leq \frac{f(z) - f(y)}{z - y}.$$

Par conséquent, les fonctions

$$x \mapsto \frac{f(y) - f(x)}{y - x}, \quad y \mapsto \frac{f(y) - f(x)}{y - x}.$$

sont croissantes, et les dérivées à droite et à gauche $\partial^+ f$ et $\partial^- f$ sont bien définies. De plus, pour tout $x < y$, elles vérifient

$$\partial^- f(x) \leq \partial^+ f(x), \quad \partial^+ f(x) \leq \frac{f(y) - f(x)}{y - x} \leq \partial^- f(y). \quad (2.1)$$

En particulier, $\partial^+ f$ et $\partial^- f$ sont croissantes. Soit $\varepsilon > 0$. On va d'abord borner les dérivées à droite et à gauche. Pour cela, soit $\varepsilon > 0$. Puisque f est continue, on peut définir

$$M := M_{a,b,\varepsilon} = \sup_{x \in [a-\varepsilon, b+\varepsilon]} |f(x)| < \infty.$$

D'après (2.1),

$$\begin{aligned} \partial^+ f(b) &\leq \frac{f(b+\varepsilon) - f(b)}{\varepsilon} \leq \frac{2M}{\varepsilon} \\ \partial^- f(a) &\geq \frac{f(a) - f(a-\varepsilon)}{\varepsilon} \geq -\frac{2M}{\varepsilon}. \end{aligned}$$

Comme, par ailleurs,

$$\partial^- f(a) \leq \partial^- f(x) \leq \partial^+ f(x) \leq \partial^+ f(b), \quad \text{pour tout } x \in [a, b],$$

on en déduit

$$\sup_{x \in [a,b]} |\partial^\pm f(x)| \leq \frac{2M}{\varepsilon}.$$

Soit $r \in \mathbb{N}$. On remarque que

$$\{x \in [a, b]; \partial^+ f(x) > \partial^- f(x)\} = \bigcup_{r \geq 1} \{x \in [a, b]; \partial^+ f(x) - \partial^- f(x) \geq \frac{1}{r}\}.$$

Il suffit donc de montrer que pour tout $r \in \mathbb{N}, r \geq 1$, l'ensemble

$$\mathcal{A}_r := \{x \in [a, b]; \partial^+ f(x) - \partial^- f(x) \geq \frac{1}{r}\}$$

ne contient qu'un nombre fini de points. Soit x_1, \dots, x_N des points distincts de \mathcal{A}_r , ordonnés de la manière suivante

$$x_1 < x_2 < \dots < x_N.$$

D'après (2.1), $\partial^+ f(x_k) \leq \partial^- f(x_{k+1})$ et donc

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N (\partial^+ f(x_k) - \partial^- f(x_k)) &\leq \partial^+ f(x_N) - \partial^- f(x_N) + \sum_{k=1}^{N-1} (\partial^- f(x_{k+1}) - \partial^- f(x_k)) \\ &= \partial^+ f(x_N) - \partial^- f(x_1) \\ &\leq \frac{4M}{\varepsilon}. \end{aligned}$$

Par ailleurs, par définition de \mathcal{A}_r , on a également

$$\sum_{k=1}^N (\partial^+ f(x_k) - \partial^- f(x_k)) \geq \frac{N}{r},$$

on en déduit donc

$$N \leq \frac{4Mr}{\varepsilon},$$

et \mathcal{A}_r est fini. □

PROPOSITION 2.3.2 (Régularité de la pression et magnétisation).

1. **Comportement en dehors de \mathfrak{D}_β** : Pour tout point (β, h) tel que $h \notin \mathfrak{D}_\beta$, la densité de magnétisation moyenne

$$\bar{m}(\beta, h) := \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{m}_{\Lambda_n}(\beta, h)$$

est bien définie, ne dépend pas du choix $\Lambda_n = \mathcal{B}(n)$ ou $\Lambda_n = \mathcal{V}(n)$, ni des conditions de bord. Elle est donc bien définie presque partout.

De plus, elle est continue en h et satisfait

$$\bar{m}(\beta, h) = \frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h).$$

2. **Comportement sur \mathfrak{D}_β** : Pour tout (β, h) tel que $h \in \mathfrak{D}_\beta$, soit

- $\{h_k^+\}$ une suite à valeurs dans $\mathbb{R} \setminus \mathfrak{D}_\beta$ qui tend vers h par valeurs $> h$,
- $\{h_k^-\}$ une suite à valeurs dans $\mathbb{R} \setminus \mathfrak{D}_\beta$ qui tend vers h par valeurs $< h$.

Alors :

$$\lim_{\substack{h_k^+ \rightarrow h \\ h_k^+ > h}} \bar{m}(\beta, h_k^+) = \frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h), \quad \lim_{\substack{h_k^- \rightarrow h \\ h_k^- < h}} \bar{m}(\beta, h_k^-) = \frac{\partial \psi}{\partial h^-}(\beta, h).$$

En particulier, $h \mapsto \bar{m}(\beta, h)$ est discontinue en tout point $h \in \mathfrak{D}_\beta$.

Proof. Comme nous l'avons rappelé précédemment, les dérivées à droite et à gauche d'une fonction convexe f vérifient plusieurs propriétés :

1. les fonctions $x \mapsto \partial^+ f(x)$ et $x \mapsto \partial^- f(x)$ sont croissantes;
2. $x \mapsto \partial^+ f(x)$ est continue à droite, et $x \mapsto \partial^- f(x)$ est continue à gauche,

3. si $\{f_n\}$ est une suite de fonctions convexes qui converge ponctuellement vers une fonction f , et si f est différentiable en x , alors $\lim_{n \rightarrow \infty} \partial^+ f_n(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} \partial^- f_n(x) = f'(x)$.

Les deux premiers points se déduisent directement de (2.1). On montre rapidement le troisième point : de nouveau en utilisant (2.1), on a quelque soit $h > 0$,

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \partial^+ f_n(x) \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \frac{f_n(x+h) - f_n(x)}{h} = \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

et en faisant $h \rightarrow 0, h > 0$, on obtient

$$\partial^+ f(x) \geq \limsup_{n \rightarrow \infty} \partial^+ f_n(x).$$

On montre de la même manière

$$\partial^- f(x) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \partial^- f_n(x).$$

Enfin, comme f_n est convexe, les deux inégalités donnent

$$\partial^- f(x) \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \partial^- f_n(x) \leq \limsup_{n \rightarrow \infty} \partial^+ f_n(x) \leq \partial^+ f(x)$$

et comme f est différentiable en x , les deux extrémités sont égales : $\partial^+ f(x) = \partial^- f(x)$ et toutes les inégalités sont des égalités. Revenons au théorème :

1. Comportement en dehors de \mathfrak{D}_β : puisque $\psi(\beta, \cdot)$ est différentiable en $h \notin \mathfrak{D}_\beta$, on peut intervertir les limites d'après le point 3 ci-dessus :

$$\frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h) = \frac{\partial}{\partial h} \lim_{n \rightarrow \infty} \psi_{\Lambda_n}(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\partial \psi_{\Lambda_n}(\beta, h)}{\partial h} = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{m}_{\Lambda_n}(\beta, h).$$

La continuité de \bar{m} est une conséquence du point 2 ci-dessus.

2. Comportement sur \mathfrak{D}_β : On applique directement ce qui précède à h_k^+ et h_k^- , qui n'appartiennent pas à \mathfrak{D}_β . \square

DÉFINITION 2.3.1 (Transition de phase). *On définit la densité de magnétisation spontanée*

$$m^*(\beta) := \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h > 0}} \bar{m}(\beta, h),$$

qui est toujours bien définie, quitte à prendre une suite $\{h_k\}$ à valeurs dans $\mathbb{R} \setminus \mathfrak{D}_\beta$.

On dit qu'il y a transition de phase en (β_0, h_0) si $h \mapsto \psi(\beta_0, h)$ n'est pas différentiable en h_0 (i.e. $h_0 \in \mathfrak{D}_{\beta_0}$).

La pression nous apporte donc des informations sur le comportement ferromagnétique ou paramagnétique du modèle d'Ising. Malheureusement, elle est souvent très difficile (voire impossible) à calculer. La dimension 1 est un cas très particulier.

Dans le chapitre suivant, nous allons voir que la régularité de la pression est également liée à l'unicité des mesures de Gibbs en volume infini.

Chapter 3

Mesures de Gibbs en volume infini et inégalités de corrélations

La compréhension des mesures de Gibbs $\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}$ va nous permettre :

1. de détecter la présence ou non d'une transition de phase, lorsque $\Lambda = \mathbb{Z}^d$ (on va donc commencer par construire les mesures de Gibbs en *volume infini*),
2. d'obtenir des propriétés *statistiques* du modèle, par exemple les fluctuations de la densité de magnétisation, ou bien les corrélations entre des spins éloignés.

3.1 Modèle d'Ising avec conditions au bord fixes

DÉFINITION 3.1.1. Soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ un réseau fini, et $\eta \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$ une configuration donnée. On définit le modèle d'Ising sur Λ avec condition au bord η de la manière suivante :

- son espace d'états est $\Omega_\Lambda^\eta := \{\omega \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d} ; \omega_x = \eta_x \quad \forall x \notin \Lambda\}$;
- l'ensemble des arêtes comportant des interactions est

$$\mathcal{E}_\Lambda^b := \{(x, y) \in \mathbb{Z}^d \times \mathbb{Z}^d ; \|x - y\|_1 = 1 \text{ et } \{x, y\} \cap \Lambda \neq \emptyset\} ;$$

- l'énergie d'une configuration $\omega \in \Omega_\Lambda^\eta$ est

$$H_{\Lambda,\beta,h}^b(\omega) := -\beta \sum_{\{x,y\} \in \mathcal{E}_\Lambda^b} \omega_x \omega_y - h \sum_{x \in \Lambda} \omega_x ;$$

- sa mesure de Gibbs est la mesure de probabilité sur Ω_Λ^η donnée par

$$\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^\eta := \frac{1}{Z_{\Lambda,\beta,h}^\eta} \exp(-H_{\Lambda,\beta,h}^b),$$

où $Z_{\Lambda,\beta,h}^\eta$ est la fonction de partition

$$Z_{\Lambda,\beta,h}^\eta := \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} \exp(-H_{\Lambda,\beta,h}^b(\omega)).$$

Deux conditions au bord joueront un rôle important par la suite :

1. la condition au bord η^+ , qui vérifie $\eta_x^+ = 1$ pour tout x ,
2. la condition au bord η^- , qui vérifie $\eta_x^- = -1$ pour tout x .

Dans ce cas, on notera les mesures de Gibbs respectivement $\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^+$ et $\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^-$ (et de la même façon, Ω_Λ^+ , Ω_Λ^- , etc.). Afin d'unifier les notations, les mesures de Gibbs vues précédemment seront notées : $\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^\emptyset$ si les conditions au bord sont libres, et $\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^{\text{Per}}$ si les conditions au bord sont périodiques.

Notation: Plus généralement, $\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^\#$ désigne la mesure de Gibbs du modèle d'Ising sur le réseau Λ avec conditions au bord $\#$. Les autres caractéristiques du modèle sont notées de la même manière : $Z_{\Lambda,\beta,h}^\#$, etc.

Enfin, à partir de maintenant on notera l'espérance d'une fonction f par rapport à une mesure de probabilité μ entre crochets : plus précisément, l'espérance de f par rapport à $\mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^\#$ est notée

$$\langle f \rangle_{\Lambda,\beta,h}^\# := \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\#} f(\omega) \mathcal{G}_{\Lambda,\beta,h}^\#(\omega).$$

Dans les sections suivantes, on va construire des *mesures de Gibbs en volume infini* en considérant les limites de suites de type

$$\mathcal{G}_{\Lambda_n,\beta,h}^{\#_n}$$

où $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$ et $\#_n$ est une suite de conditions au bord bien choisies.

3.2 Notions de convergence et théorème

On va d'abord donner un sens plus précis à la convergence de réseaux $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$.

DÉFINITION 3.2.1. *On dit que la suite de réseaux finis $\{\Lambda_n\}$ converge vers \mathbb{Z}^d si*

1. *la suite est croissante : $\Lambda_n \subset \Lambda_{n+1}$*
2. *la réunion recouvre \mathbb{Z}^d : $\bigcup_{n \geq 1} \Lambda_n = \mathbb{Z}^d$.*

DÉFINITION 3.2.2 (Fonctions locales). *Une fonction $f : \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d} \rightarrow \mathbb{R}$ est dite locale s'il existe $\Delta \subset \mathbb{Z}^d$ de cardinal fini tel que $f(\omega) = f(\omega')$ dès que ω et ω' coïncident sur Δ (c'est-à-dire $\omega_x = \omega'_x$ pour tout $x \in \Delta$). Le plus petit ensemble Δ vérifiant cette propriété est appelé le support de f et est noté $\text{Supp}(f)$.*

DÉFINITION 3.2.3. *Soit $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$ et $\{\#_n\}$ une suite de conditions de bord.*

On dit que la suite de mesures de Gibbs $\{\mathcal{G}_{\Lambda_n, \beta, h}^{\#_n}\}$ converge vers l'état $\langle \cdot \rangle$ si et seulement si,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^{\#_n} = \langle f \rangle$$

pour toute fonction locale $f : \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d} \rightarrow \mathbb{R}$.

Cet état $\langle \cdot \rangle$ est appelé état de Gibbs en volume infini à température β^{-1} et champ extérieur h .

REMARQUE 3.2.1. En particulier, les propriétés suivantes sont automatiquement vérifiées par la limite $\langle \cdot \rangle$:

1. **Normalisation :** $\langle 1 \rangle = 1$
2. **Positivité :** si $f \geq 0$, alors $\langle f \rangle \geq 0$
3. **Linéarité :** pour tout $\lambda \in \mathbb{R}$, $\langle f + \lambda g \rangle = \langle f \rangle + \lambda \langle g \rangle$.

DÉFINITION 3.2.4. *On dit qu'un état $\langle \cdot \rangle$ est invariant par translation si, pour tout fonction locale f et tout $x \in \mathbb{Z}^d$,*

$$\langle f \circ \theta_x \rangle = \langle f \rangle,$$

où θ_x est la fonction de translation définie par

$$(\theta_x \omega)_y := \omega_{y-x}.$$

L'un des premiers théorèmes que l'on va montrer est le suivant :

THÉORÈME 3.2.1. *Soit $\beta \geq 0$ et $h \in \mathbb{R}$, et soit $\{\Lambda_n\}$ une suite de réseaux qui converge vers \mathbb{Z}^d . Les mesures de Gibbs suivantes convergent lorsque $n \rightarrow \infty$:*

$$\langle \cdot \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+, \quad \langle \cdot \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^- \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$$

et les deux états de Gibbs obtenus, $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$ et $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$ ne dépendent pas de la suite $\{\Lambda_n\}$ choisie. De plus, ils sont invariants par translation.

Nous allons introduire maintenant les outils nécessaires à la démonstration de ce résultat.

3.3 Inégalités de corrélation

3.3.1 Fonctions locales et fonctions cylindriques

Puisque l'on doit calculer la limite de

$$\langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^\pm$$

pour toute fonction locale f , commençons d'abord par étudier la structure de ces fonctions locales. Pour cela, quelque soit $\omega \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$, et quelque soit $A \subset \mathbb{Z}^d$ sous-réseau fini, on note

$$\omega_A := \prod_{x \in A} \omega_x \in \{-1, 1\},$$

$$n_A(\omega) := \prod_{x \in A} n_x(\omega), \quad \text{avec } n_x(\omega) := \frac{1}{2}(1 + \omega_x) \in \{0, 1\}.$$

LEMME 3.3.1. *Soit $f : \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction locale.*

Il existe deux suites de coefficients $\{\hat{f}_A\}_{A \subset \text{Supp}(f)}$ et $\{\tilde{f}_A\}_{A \subset \text{Supp}(f)}$ telles que

$$f = \sum_{A \subset \text{Supp}(f)} \hat{f}_A \omega_A, \quad f = \sum_{A \subset \text{Supp}(f)} \tilde{f}_A n_A(\omega).$$

Proof. La preuve est donnée en exercice (Feuille 3). □

Grâce à ce lemme, pour montrer la convergence de $\langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^\pm$, il suffit d'étudier la convergence de

$$\langle \omega_A \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^\pm \quad \text{pour tout } A \subset \text{Supp}(f),$$

ou

$$\langle n_A(\omega) \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^\pm \quad \text{pour tout } A \subset \text{Supp}(f).$$

3.3.2 Les inégalités GKS et FKG

L'inégalité GKS (Griffiths–Kelly–Sherman) montrent que ω_x et ω_y sont *positivement corrélés* lorsque les conditions au bord sont libres, ou périodiques ou η^+ . Elle est en fait vérifiée dans un contexte plus général : soit $\mathbf{B} = \{\beta_{xy}\}$ une suite de réels ≥ 0 indexés par les arêtes $\{x, y\} \in \mathcal{E}_\Lambda^b$, et soit $\mathbf{h} = \{h_x\}$ une suite de réels indexés par les sites $x \in \Lambda$. On définit alors l'*Hamiltonien généralisé*, pour tout $\omega \in \Omega_\Lambda^\eta$, par

$$H_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^b(\omega) := - \sum_{\{x, y\} \in \mathcal{E}_\Lambda^b} \beta_{xy} \omega_x \omega_y - \sum_{x \in \Lambda} h_x \omega_x.$$

THÉORÈME 3.3.2 (Inégalité GKS). *Soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ un réseau fini, soit \mathbf{B} et \mathbf{h} comme ci-dessus, et supposons $h_x \geq 0$ pour tout $x \in \Lambda$.*

Alors, quelque soit $A, A' \subset \Lambda$, on a

$$\begin{aligned} \langle \omega_A \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^+ &\geq 0 \\ \langle \omega_A \omega_{A'} \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^+ &\geq \langle \omega_A \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^+ \langle \omega_{A'} \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^+. \end{aligned}$$

Ces inégalités sont vraies également pour les mesures $\langle \cdot \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^\emptyset$ et $\langle \cdot \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^{\text{Per}}$.

Proof. La preuve sera donnée en exercice (Feuille 3). □

L'inégalité FKG (Fortuin–Kasteleyn–Ginibre) s'intéresse aux événements croissants. Pour cela, nous devons d'abord définir un *ordre partiel* sur les configurations ω : on dit que $\omega \leq \omega'$ si et seulement si $\omega_x \leq \omega'_x$ pour tout $x \in \Lambda$.

DÉFINITION 3.3.1. *On dit qu'un événement $E \subset \{-1, 1\}^\Lambda$ est croissant si*

$$(\omega \in E \text{ et } \omega \leq \omega') \Rightarrow \omega' \in E.$$

On dit qu'une fonction $f : \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d} \rightarrow \mathbb{R}$ est croissante si et seulement si

$$f(\omega) \leq f(\omega') \quad \text{pour tout } \omega \leq \omega'.$$

En particulier, si E est croissant, alors la fonction indicatrice $\mathbf{1}_E$ est croissante.

Par exemple, les fonctions suivantes sont des fonctions croissantes : pour tout $x \in \Lambda$ et $A \subset \Lambda$,

$$\omega \mapsto \omega_x, \quad \omega \mapsto n_x(\omega)$$

ainsi que

$$\omega \mapsto n_A(\omega), \quad \omega \mapsto \sum_{x \in A} n_x(\omega) - n_A(\omega).$$

Cette fois, l'inégalité FKG est valide quelque soit les valeurs prises par les champs h_x :

THÉORÈME 3.3.3 (Inégalité FKG). *Soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ un réseau fini, soit \mathbf{B} et \mathbf{h} comme ci-dessus, et soit $\#$ n'importe quelle condition de bord.*

Alors, pour toutes fonctions croissantes f et g ,

$$\langle fg \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^{\#} \geq \langle f \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^{\#} \langle g \rangle_{\Lambda, \mathbf{B}, \mathbf{h}}^{\#}.$$

Proof. La preuve sera faite au chapitre suivant. □

3.3.3 Conséquences des inégalités GKS et FKG

L'une des conséquences les plus importantes pour construire les états de Gibbs en volume infini est la suivante :

LEMME 3.3.4. *Soit f une fonction croissante, et $\Lambda_1 \subset \Lambda_2 \subset \mathbb{Z}^d$ deux réseaux finis. Alors, pour tout $\beta \geq 0$ et $h \in \mathbb{R}$;*

$$\langle f \rangle_{\Lambda_1, \beta, h}^+ \geq \langle f \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+.$$

La même inégalité est vérifiée pour la condition au bord négative – si f est une fonction décroissante.

Proof. La propriété suivante se montre facilement : soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ fini. Pour tout $\Delta \subset \Lambda$, pour toute configuration $\eta \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}^d}$, et tout $\omega' \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}$, on a l'égalité des mesures suivantes :

$$\mathcal{G}_{\Lambda, \beta, h}^{\eta} \left(\cdot \mid \omega_x = \omega'_x \text{ pour tout } x \in \Lambda \setminus \Delta \right) = \mathcal{G}_{\Delta, \beta, h}^{\omega'}(\cdot). \quad (3.1)$$

Pour montrer cette égalité (on donne seulement quelques éléments), on commence par le cas $h = 0$, et on remarque que

$$\mathcal{E}_{\Lambda}^b = \mathcal{E}_{\Delta}^b \cup \{ \{x, y\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b ; \{x, y\} \cap \Delta = \emptyset \}.$$

Puis on utilise la formule des probabilités conditionnelles. Si $\omega \in \Omega_{\Lambda}^{\omega'}$, on peut facilement décomposer le terme exponentiel :

$$\exp \left(\beta \sum_{\{x, y\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b} \omega_x \omega_y \right) = \exp \left(\beta \sum_{\{x, y\} \in \mathcal{E}_{\Delta}^b} \omega_x \omega_y \right) \exp \left(\beta \sum_{\substack{\{x, y\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b \\ \{x, y\} \cap \Delta = \emptyset}} \omega'_x \omega'_y \right).$$

La fonction de partition peut être décomposée de la même façon : la somme sur $\omega \in \Omega_{\Lambda}$ est écrite comme une somme sur $\omega_{\Delta} \in \Omega_{\Delta}$ et une somme sur $\bar{\omega} \in \Omega_{\Lambda \setminus \Delta}$.

$$Z_{\Lambda, \beta, 0}^{\eta} = Z_{\Delta, \beta, 0}^{\omega'} \sum_{\bar{\omega} \in \Omega_{\Lambda \setminus \Delta}} \exp \left(\beta \sum_{\substack{\{x, y\} \in \mathcal{E}_{\Lambda}^b \\ \{x, y\} \cap \Delta = \emptyset}} \bar{\omega}_x \bar{\omega}_y \right)$$

Le cas $h > 0$ en découle facilement, puisqu'il n'ajoute qu'une somme $\sum \omega_x$ qui peut être décomposée de la même manière sur Δ et sur $\Lambda \setminus \Delta$. Après quelques calculs la propriété (3.1) est démontrée.

On utilise cette propriété avec $\Delta = \Lambda_1$ et $\Lambda = \Lambda_2$, et $\omega' = \eta = \eta^+$. On calcule l'espérance de f :

$$\begin{aligned} \langle f \rangle_{\Lambda_1, \beta, h}^+ &= \langle f \mid \omega_x = 1, \forall x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1 \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+ \\ &= \frac{\langle f \mathbf{1}_{\{\omega_x = 1, \forall x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+}{\langle \mathbf{1}_{\{\omega_x = 1, \forall x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+}. \end{aligned}$$

Puisque la fonction $\mathbf{1}_{\{\omega_x = 1, \forall x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}}$ est une fonction croissante, on peut appliquer l'inégalité FKG, et on obtient :

$$\langle f \rangle_{\Lambda_1, \beta, h}^+ \leq \frac{\langle f \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+ \langle \mathbf{1}_{\{\omega_x = 1, \forall x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+}{\langle \mathbf{1}_{\{\omega_x = 1, \forall x \in \Lambda_2 \setminus \Lambda_1\}} \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+} = \langle f \rangle_{\Lambda_2, \beta, h}^+.$$

□

Une autre conséquence importante est le rôle des conditions au bord + et - :

LEMME 3.3.5. *Soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ fini et soit f une fonction croissante. Pour tout $\beta \geq 0$, tout $h \in \mathbb{R}$, et toute condition au bord η ,*

$$\langle f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^- \leq \langle f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^\eta \leq \langle f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+$$

Proof. On introduit la fonction

$$I(\omega) = \exp\left(\beta \sum_{\substack{x \in \Lambda, y \notin \Lambda \\ x \sim y}} \omega_x (\eta_y^+ - \eta_y)\right) = \exp\left(\beta \sum_{\substack{x \in \Lambda, y \notin \Lambda \\ x \sim y}} \omega_x (1 - \eta_y)\right).$$

Tout d'abord, on observe que

$$\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^+} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)} = \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)} I(\omega).$$

À chaque $\omega \in \Omega_\Lambda^+$ dans la somme correspond un unique $\tilde{\omega} \in \Omega_\Lambda^\eta$ qui vérifie $\tilde{\omega} \leq \omega$. Et par conséquent, puisque f est croissante, $f(\omega') \leq f(\omega)$, on en déduit :

$$\sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^+} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)} f(\omega) \geq \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^\eta} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)} I(\omega) f(\omega).$$

Ce qui implique :

$$\langle f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ = \frac{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^+} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)} f(\omega)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^+} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)}} \geq \frac{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)} \mathbf{I}(\omega) f(\omega)}{\sum_{\omega \in \Omega_{\Lambda}^{\eta}} e^{-H_{\Lambda, \beta, h}^b(\omega)} \mathbf{I}(\omega)} = \frac{\langle \mathbf{I} f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^{\eta}}{\langle \mathbf{I} \rangle_{\Lambda, \beta, h}^{\eta}}.$$

Puisque \mathbf{I} est croissante, on peut utiliser l'inégalité FKG, et on obtient :

$$\langle f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ \geq \langle f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^{\eta}.$$

□

3.4 Preuve du Théorème 3.2.1

Considérons la condition au bord positive $+$. Soit f une fonction locale. D'après le Lemme 3.3.1, et par linéarité,

$$\langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ = \sum_{A \subset \text{Supp}(f)} \tilde{f}_A \langle n_A(\omega) \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+.$$

Puisque les fonctions $\omega \mapsto n(\omega)_A$ sont croissantes, on peut appliquer le Lemme 3.3.4, et on obtient, pour tout $n \geq 1$,

$$\langle n_A(\omega) \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ \geq \langle n_A(\omega) \rangle_{\Lambda_{n+1}, \beta, h}^+.$$

La suite $\{\langle n_A(\omega) \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+\}_{n \geq 1}$ est décroissante et minorée par 0, donc elle converge lorsque $n \rightarrow \infty$ vers une limite, que l'on note ℓ_A . On pose alors

$$\langle f \rangle_{\beta, h}^+ := \sum_{A \subset \text{Supp}(f)} \tilde{f}_A \ell_A = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+.$$

On vérifie facilement que $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$ vérifie les propriétés de normalisation, linéarité et positivité.

Nous vérifions maintenant que la limite ne dépend pas de la suite $\{\Lambda_n\}$ choisie. Soient $\Lambda_n^1 \rightarrow \mathbb{Z}^d$ et $\Lambda_n^2 \rightarrow \mathbb{Z}^d$ deux suites de réseaux, et notons $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^{+,1}$ et $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^{+,2}$ les limites respectivement obtenues. Il existe une suite $\{\Delta_n\}_{n \geq 1}$ telle que, pour tout $k \geq 1$,

$$\Delta_{2k-1} \subset \bigcup_{n \geq 1} \Lambda_n^1, \quad \Delta_{2k} \subset \bigcup_{n \geq 1} \Lambda_n^2, \quad \Delta_k \not\subset \Delta_{k+1}.$$

Par définition, $\Delta_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$, et on sait d'après ce qui précède que $\lim_{k \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\Delta_k, \beta, h}^+$ existe quelque soit f locale. Or,

- $\{\langle f \rangle_{\Delta_{2k-1}, \beta, h}^+\}_k$ est une sous suite de $\{\langle f \rangle_{\Lambda_n^1, \beta, h}^+\}_n$
- $\{\langle f \rangle_{\Delta_{2k}, \beta, h}^+\}_k$ est une sous suite de $\{\langle f \rangle_{\Lambda_n^2, \beta, h}^+\}_n$,

ce qui implique que les limites $\langle f \rangle_{\beta, h}^{+,1}$ et $\langle f \rangle_{\beta, h}^{+,2}$ coïncident quelque soit f .

Enfin, nous prouvons l'invariance par translation. Soit f une fonction locale. Quelque soit $x \in \mathbb{Z}^d$, $f \circ \theta_x$ est aussi une fonction locale, et la suite de réseaux $\theta_{-x}\Lambda_n := \Lambda_n - x$ converge vers \mathbb{Z}^d . De plus, on vérifie facilement

$$\langle f \circ \theta_x \rangle_{\theta_{-x}\Lambda_n, \beta, h}^+ = \langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+.$$

Comme la limite ne dépend pas de la suite de réseaux choisis, on a d'après ce qui précède

$$\langle f \circ \theta_x \rangle_{\theta_{-x}\Lambda_n, \beta, h}^+ \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle f \circ \theta_x \rangle_{\beta, h}^+,$$

et

$$\langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \langle f \rangle_{\beta, h}^+,$$

ce qui prouve l'invariance par translations.

3.5 Preuve de l'inégalité FKG

Nous donnons ici une preuve élégante de l'inégalité FKG, dans le cas où \mathbf{B} est constante égale à $\beta \geq 0$ et \mathbf{h} est constante égale à $h \in \mathbb{R}$.

Pour cela, nous commençons par quelques rappels sur les chaînes de Markov à temps discret.

3.5.1 Construction d'une chaîne de Markov à partir de sa mesure invariante

Soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, et soit μ une mesure de probabilité sur l'espace $\Omega_\Lambda = \{-1, 1\}^\Lambda$ (de cardinal fini). On suppose que

$$\mu(\omega) > 0, \quad \text{pour tout } \omega \in \Omega_\Lambda.$$

On souhaite construire une chaîne de Markov (X_n) sur l'espace d'états Ω_Λ telle que μ soit son unique mesure invariante. Cela peut être réalisé grâce à la construction suivante, due à Gibbs :

1. On choisit $X_0 \in \Omega_\Lambda$ selon une loi quelconque.
2. Supposons que l'on ait construit $X_n = \omega \in \Omega_\Lambda$. On construit $X_{n+1} = \omega'$ de la façon suivante :
 - (a) On tire un nombre $u \in [0, 1]$ selon la loi uniforme sur $[0, 1]$.
 - (b) On choisit un sommet $x \in \Lambda$ selon la loi uniforme sur l'ensemble des sommets Λ .
 - (c) On définit ω' sur $\Lambda \setminus \{x\}$:

$$\omega'_y = \omega_y, \quad \text{pour tout } y \neq x.$$

- (d) La valeur de ω'_x est choisie selon la valeur de u :

$$\omega'_x = \begin{cases} +1 & \text{si } u \leq \mu(\tilde{\omega}_x = +1 \mid \tilde{\omega}_y = \omega_y, \text{ pour tout } y \neq x) \\ -1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Autrement dit, les transitions $X_n \rightarrow X_{n+1}$ changent la valeur d'un seul site de la configuration, et de plus, la probabilité de transition pour passer de ω à ω' , si ω et ω' ne diffèrent d'au plus d'une valeur sur un seul site, est égale à :

$$\begin{aligned} p(\omega \rightarrow \omega') &= \frac{1}{|\Lambda|} \mu(\tilde{\omega}_x = +1 \mid \tilde{\omega}_y = \omega_y, \text{ pour tout } y \neq x) \\ &= \frac{1}{|\Lambda|} \frac{\mu(\omega')}{\mu(\omega) + \mu(\omega')}. \end{aligned}$$

On montre facilement les propriétés suivantes :

LEMME 3.5.1. *La chaîne de Markov (X_n) ainsi construite est irréductible, apériodique, et son unique mesure invariante est μ .*

Proof. Montrons d'abord qu'elle est irréductible. Soit $\omega \neq \omega'$ deux configurations de Ω_Λ . Alors il existe une suite

$$(\omega = \omega_0, \omega_1, \dots, \omega_k = \omega')$$

telle que, pour tout $i \in \{0, \dots, k-1\}$, ω_i et ω_{i+1} ne diffèrent que par la valeur d'un seul site, et k est fini (au plus égal à $|\Lambda|$). Chaque transition $\omega_i \rightarrow \omega_{i+1}$ a une probabilité strictement positive. Donc il existe un entier k tel que la probabilité que X_k soit égal à ω' sachant que $X_0 = \omega$ est strictement positive.

La chaîne est apériodique car $p(\omega \rightarrow \omega) = 1/(2|\Lambda|) > 0$.

Enfin, ceci implique que la mesure invariante est unique, donc il suffit de montrer que μ est bien invariante pour la chaîne. C'est en effet le cas car (X_n) est réversible pour la mesure μ : on a

$$\mu(\omega)p(\omega \rightarrow \omega') = \frac{1}{|\Lambda|} \frac{\mu(\omega)\mu(\omega')}{\mu(\omega) + \mu(\omega')} = \mu(\omega')p(\omega' \rightarrow \omega).$$

□

3.5.2 Couplage monotone

On considère maintenant deux mesures de probabilités μ et $\tilde{\mu}$ sur Ω_Λ telles que $\mu(\omega) > 0$ et $\tilde{\mu}(\omega) > 0$ pour tout ω . On suppose de plus : pour tout $\tilde{\omega}, \omega' \in \Omega_\Lambda$ tels que $\omega' \leq \tilde{\omega}$, et pour tout $x \in \Lambda$,

$$\mu(\omega_x \mid \omega_y = \omega'_y, \text{ pour tout } y \neq x) \leq \tilde{\mu}(\omega_x \mid \omega_y = \tilde{\omega}_y, \text{ pour tout } y \neq x). \quad (3.2)$$

DÉFINITION 3.5.1. *Un couplage monotone de μ et $\tilde{\mu}$ est la donnée des deux chaînes de Markov (X_n) et (\tilde{X}_n) construites comme précédemment, mais avec la même valeur $u \in [0, 1]$ et le même sommet $x \in \Lambda$.*

LEMME 3.5.2. *Soit (X_n, \tilde{X}_n) un couplage monotone de μ et $\tilde{\mu}$.*

Si, au rang $n \in \mathbb{N}$, $X_n \leq \tilde{X}_n$ alors $X_{n+1} \leq \tilde{X}_{n+1}$.

Proof. On suppose $X_n \leq \tilde{X}_n$.

Soit $x \in \Lambda$ et $u \in [0, 1]$ le sommet et la valeur qui ont été sélectionnés pour construire X_{n+1} et \tilde{X}_{n+1} . Par l'absurde, si l'inégalité au rang $n + 1$ n'est pas vérifiée, alors nécessairement :

$$(X_{n+1})_x = +1, \quad (\tilde{X}_{n+1})_x = -1.$$

Ceci implique

$$u \leq \mu(\omega_x \mid \omega_y = (X_n)_y, \text{ pour tout } y \neq x).$$

D'après (3.2), on obtient

$$u \leq \mu(\omega_x \mid \omega_y = (\tilde{X}_n)_y, \text{ pour tout } y \neq x),$$

ce qui donne $(\tilde{X}_{n+1})_x = +1$, d'où la contradiction. □

COROLLAIRE 3.5.3. *Pour tout fonction $f : \Omega_\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ croissante,*

$$\langle f \rangle_\mu \leq \langle f \rangle_{\tilde{\mu}}.$$

On dit que $\tilde{\mu}$ domine stochastiquement μ .

Proof. On considère le couplage monotone (X_n, \tilde{X}_n) construit avec les valeurs initiales $X_0 = \eta^- \equiv -1$ et $\tilde{X}_0 = \eta^+ \equiv +1$. On note \mathbb{P} la mesure de probabilité des deux chaînes de Markov $\{(X_n, \tilde{X}_n)\}_{n \in \mathbb{N}}$. Puisque ces deux chaînes convergent respectivement vers μ et $\tilde{\mu}$, on peut écrire

$$\langle f \rangle_{\tilde{\mu}} - \langle f \rangle_\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{\omega, \tilde{\omega} \in \Omega_\Lambda} (f(\tilde{\omega}) - f(\omega)) \mathbb{P}(X_n = \omega, \tilde{X}_n = \tilde{\omega}).$$

Puisque le couplage est monotone, on a,

$$\mathbb{P}(\tilde{X}_n \geq X_n, \text{ pour tout } n \in \mathbb{N}) = 1.$$

On peut donc restreindre la somme sur les couples $\tilde{\omega} \geq \omega$, ce qui implique (puisque f est croissante) $f(\tilde{\omega}) \geq f(\omega)$. Ainsi, la limite précédente est positive. \square

3.5.3 Conclusion et preuve de l'inégalité FKG

Soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$, $\beta \geq 0$, $h \in \mathbb{R}$, et $f, g : \Omega_\Lambda \rightarrow \mathbb{R}$ deux fonctions croissantes. Soit $\eta \in \{-1, 1\}^{\mathbb{Z}}$ une condition au bord. Nous allons montrer

$$\langle fg \rangle_{\Lambda, \beta, h}^\eta \geq \langle f \rangle_{\Lambda, \beta, h}^\eta \langle g \rangle_{\Lambda, \beta, h}^\eta. \quad (3.3)$$

Tout d'abord, nous pouvons supposer que, pour tout $\sigma \in \Omega_\Lambda^\eta$, $g(\sigma) > 0$, puisque remplacer g par $g - c$ avec c constante ne change pas l'inégalité (3.3).

On définit alors deux mesures de probabilités sur Ω_Λ : pour tout $\omega \in \Omega_\Lambda$, ω^η correspond à la configuration qui coïncide avec ω sur Λ et avec η en dehors de Λ . Les mesures μ et $\tilde{\mu}$ sont données par

$$\mu(\omega) := \mathcal{G}_{\Lambda, \beta, h}^\eta(\omega^\eta), \quad \tilde{\mu}(\omega) := \frac{g(\omega^\eta)}{\langle g \rangle_{\Lambda, \beta, h}^\eta} \mathcal{G}_{\Lambda, \beta, h}^\eta(\omega^\eta).$$

Par définition, pour tout $\omega \in \Omega_\Lambda$, on a $\mu(\omega) > 0$ et $\tilde{\mu}(\omega) > 0$. L'inégalité (3.3) se réécrit tout simplement

$$\langle f \rangle_{\tilde{\mu}} \geq \langle f \rangle_\mu.$$

Pour utiliser le Corollaire 3.5.3, on va montrer que (3.2) est vérifiée. Soit $\tilde{\omega}, \omega' \in \Omega_\Lambda$ tels que $\omega' \leq \tilde{\omega}$, et soit $x \in \Lambda$. On note $(+1)\tilde{\omega}$ (resp. $(-1)\tilde{\omega}$) la configuration qui coïncide avec $\tilde{\omega}$ sur tous les sites $y \neq x$, et qui vaut $+1$ (resp. -1) au site x . On calcule :

$$\begin{aligned} \tilde{\mu}(\omega_x = 1 \mid \omega_y = \tilde{\omega}_y, \forall y \neq x) &= \frac{\tilde{\mu}((+1)\tilde{\omega})}{\tilde{\mu}((+1)\tilde{\omega}) + \tilde{\mu}((-1)\tilde{\omega})} \\ &= \frac{\mu((+1)\tilde{\omega})g((+1)\tilde{\omega})}{\mu((+1)\tilde{\omega})g((+1)\tilde{\omega}) + \mu((-1)\tilde{\omega})g((-1)\tilde{\omega})} \\ &= \left(1 + \frac{\mu((-1)\tilde{\omega})g((-1)\tilde{\omega})}{\mu((+1)\tilde{\omega})g((+1)\tilde{\omega})}\right)^{-1}. \end{aligned}$$

Puisque $(-1)\tilde{\omega} \leq (+1)\tilde{\omega}$, on utilise le fait que g est croissante pour écrire que cette dernière expression est supérieure à

$$\left(1 + \frac{\mu((-1)\tilde{\omega})}{\mu((+1)\tilde{\omega})}\right)^{-1}. \quad (3.4)$$

On calcule maintenant, de la même façon,

$$\mu(\omega_x = 1 \mid \omega_y = \omega'_y, \forall y \neq x) = \left(1 + \frac{\mu((-1)\omega')}{\mu((+1)\omega')}\right)^{-1}. \quad (3.5)$$

Il suffit donc de comparer (3.4) avec (3.5), sachant que $\omega' \leq \tilde{\omega}$. On calcule donc

$$\frac{\mu((-1)\tilde{\omega})}{\mu((+1)\tilde{\omega})} = \frac{\mathcal{G}_{\Lambda, \beta, h}^\eta(((-1)\tilde{\omega})^\eta)}{\mathcal{G}_{\Lambda, \beta, h}^\eta(((+1)\tilde{\omega})^\eta)} = \exp\left(-2\beta \sum_{y; y \sim x} (\tilde{\omega}^\eta)_y - 2h\right),$$

qui est une fonction décroissante de $\tilde{\omega}$. On en déduit que (3.4) est plus grand que (3.5), et c'est ce qu'on voulait montrer pour appliquer le Corollaire 3.5.3 et conclure la preuve de l'inégalité FKG.

3.6 Diagramme de phase

Nous allons maintenant nous intéresser à la question suivante : est-ce que les deux états de Gibbs en volume infini, $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$ et $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$ sont distincts, ou bien sont-ils identiques ? Que se passe-t-il si l'on choisit une autre suite de conditions au bord $\{\#_n\}$? Autrement dit, est-ce que les conditions au bord imposées en volume fini *survivent* à la limite en volume infini ?

Nous allons énoncer le principal théorème de l'ensemble du cours :

- THÉORÈME 3.6.1.** 1. *Quelque soit la dimension $d \geq 1$: si $h \neq 0$, alors il existe un **unique** état de Gibbs infini, quelque soit la valeur de $\beta \geq 0$.*
2. *En dimension $d = 1$: l'état de Gibbs infini est **toujours unique** quelque soit $(\beta, h) \in [0, +\infty) \times \mathbb{R}$.*
3. *En dimension $d \geq 2$: si $h = 0$, alors il existe une valeur **critique** $\beta_c = \beta_c(d) > 0$ finie, telle que*
- *si $\beta < \beta_c$, alors l'état de Gibbs infini pour $(\beta, 0)$ est unique ;*
 - *si $\beta > \beta_c$, alors $\langle \cdot \rangle_{\beta, 0}^+ \neq \langle \cdot \rangle_{\beta, 0}^-$.*

REMARQUE 3.6.1. Il est aussi vrai que l'état de Gibbs au point critique $(\beta_c, 0)$ est unique, mais c'est un résultat récent et difficile, qui ne rentre pas dans les objectifs du cours.

Ce théorème sera démontré tout au long des chapitres suivants.

Chapter 4

Caractérisation de l'unicité et finitude de la température critique

4.1 Deux critères pour la non-unicité

Nous allons voir le rôle important joué par $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$ et $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$.

THÉORÈME 4.1.1. *Soit $\beta \geq 0$ et $h \in \mathbb{R}$. Les assertions suivantes sont équivalentes*

1. *Il existe un unique état de Gibbs infini pour (β, h) .*
2. $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+ = \langle \cdot \rangle_{\beta, h}^-$.
3. $\langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+ = \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^-$.

Proof. Les implications $1 \Rightarrow 2 \Rightarrow 3$ sont triviales. Nous commençons par montrer $3 \Rightarrow 2$. Soit $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$ et A un sous réseau fini de \mathbb{Z}^d . La fonction

$$\omega \mapsto \sum_{x \in A} n_x(\omega) - n_A(\omega) = \sum_{x \in A} \left(\frac{1}{2}(1 + \omega_x) \right) - \prod_{x \in A} \left(\frac{1}{2}(1 + \omega_x) \right)$$

est croissante (en effet, il suffit de montrer que $f(\omega) \leq f(\omega')$ pour tout ω, ω' qui ne diffèrent au plus de la valeur sur un seul site x , avec $\omega_x = -1$ et $\omega'_x = +1$).

On peut donc appliquer le Lemme 3.3.5 et on obtient

$$\left\langle \sum_{x \in A} n_x(\omega) - n_A(\omega) \right\rangle_{\Lambda_n \beta, h}^- \leq \left\langle \sum_{x \in A} n_x(\omega) - n_A(\omega) \right\rangle_{\Lambda_n \beta, h}^+$$

On utilise la linéarité de l'espérance et en faisant $n \rightarrow \infty$ on obtient

$$\sum_{x \in A} (\langle n_x(\omega) \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_x(\omega) \rangle_{\beta, h}^-) \geq \langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^-.$$

Par invariance par translation :

$$\langle n_x(\omega) \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_x(\omega) \rangle_{\beta, h}^- = \langle n_0(\omega) \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_0(\omega) \rangle_{\beta, h}^- = \frac{1}{2} (\langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+ - \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^-),$$

qui est donc nul si 3 est vérifié. D'après le Lemme 3.3.5 on a également

$$\langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^+ - \langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^- \geq 0.$$

On obtient donc :

$$\langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^+ = \langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^-$$

quelque soit A. D'après le Lemme 3.3.1, c'est aussi vrai quelque soit f fonction locale, et donc 2 est vérifié.

On montre maintenant $2 \Rightarrow 1$. On rappelle (Lemme 3.3.5) que, quelque soit la condition au bord fixe η ,

$$\langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^- \leq \langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^\eta \leq \langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+$$

et dans le partiel, on a vu que la même inégalité est vérifiée pour la condition au bord libre \emptyset :

$$\langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^- \leq \langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^\emptyset \leq \langle f \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+$$

et on peut facilement montrer que la même inégalité est satisfaite pour les conditions au bord périodiques. En particulier, n'importe quel état de Gibbs noté $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}$ (construit comme limite d'une suite quelconque $\langle \cdot \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^\#$) satisfait :

$$\langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^- \leq \langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h} \leq \langle n_A(\omega) \rangle_{\beta, h}^+.$$

Donc, si 2 est vérifié, les inégalités ci-dessus sont des égalités. Et ces égalités s'étendent à n'importe quelle fonction f d'après le Lemme 3.3.1. \square

On étudie maintenant la magnétisation en volume infini. On rappelle la définition :

$$\bar{m}_\Lambda^\#(\beta, h) = \langle m_\Lambda(\omega) \rangle_{\Lambda, \beta, h}^\# = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} \langle \omega_x \rangle_{\Lambda, \beta, h}^\#.$$

PROPOSITION 4.1.2. Soit $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$ telle que $|\partial^{\text{in}} \Lambda_n|/|\Lambda_n| \rightarrow 0$ lorsque $n \rightarrow \infty$, où

$$\partial^{\text{in}} \Lambda := \{x \in \Lambda; \exists y \notin \Lambda; y \sim x\}.$$

Alors, quelque soit $\beta \geq 0$ et $h \in \mathbb{R}$, les limites

$$\bar{m}^+(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{m}_{\Lambda_n}^+(\beta, h), \quad \bar{m}^-(\beta, h) = \lim_{n \rightarrow \infty} \bar{m}_{\Lambda_n}^-(\beta, h)$$

existent et de plus elles sont égales à

$$\bar{m}^+(\beta, h) = \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+, \quad \bar{m}^-(\beta, h) = \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^-$$

De plus, la fonction $h \mapsto \bar{m}^+(\beta, h)$ est continue à droite, et la fonction $h \mapsto \bar{m}^-(\beta, h)$ est continue à gauche.

REMARQUE 4.1.1. D'après la Proposition 2.3.2, on obtient : si $h \notin \mathfrak{D}_\beta$, alors $\bar{m}^+(\beta, h) = \bar{m}(\beta, h)$. Par conséquent, si $\{h_k\}$ est une suite décroissante vers 0 telle que $h_k \notin \mathfrak{D}_\beta$ pour tout k , alors on a les égalités :

$$m^*(\beta) = \lim_{k \rightarrow \infty} \bar{m}^+(\beta, h_k) = \bar{m}^+(\beta, 0) = \langle \omega_0 \rangle_{\beta, 0}^+.$$

Proof. Soit $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$ telle que $|\partial^{\text{in}} \Lambda_n|/|\Lambda_n| \rightarrow 0$. D'après l'invariance par translation de $\langle \cdot \rangle_{\beta, h}^+$, et par le Lemme 3.3.4,

$$\langle \omega_0 \rangle_{\beta, 0}^+ = \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\beta, h}^+ \leq \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+.$$

On en déduit

$$\langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+ \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+.$$

Il nous manque l'autre borne. On fixe $k \geq 1$ et $x \in \Lambda_n$. D'une part, si $x + B(k) \subset \Lambda_n$, alors toujours le Lemme 3.3.4 implique

$$\langle \omega_x \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ \leq \langle \omega_x \rangle_{x+B(k), \beta, h}^+ = \langle \omega_0 \rangle_{B(k), \beta, h}^+.$$

D'autre part, si $x + B(k)$ n'est pas inclus dans Λ_n , alors dans ce cas $x + B(k)$ intersecte $\partial^{\text{in}} \Lambda_n$. Par conséquent

$$\begin{aligned} \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ &= \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{\substack{x \in \Lambda_n \\ x+B(k) \subset \Lambda_n}} \langle \omega_x \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ + \frac{1}{|\Lambda_n|} \sum_{\substack{x \in \Lambda_n \\ x+B(k) \cap \partial^{\text{in}} \Lambda_n \neq \emptyset}} \langle \omega_x \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ \\ &\leq \langle \omega_0 \rangle_{B(k), \beta, h}^+ + \frac{2|B(k)| |\partial^{\text{in}} \Lambda_n|}{|\Lambda_n|}, \end{aligned}$$

ce qui implique, quelque soit $k \geq 1$,

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} \langle m_{\Lambda_n} \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ \leq \langle \omega_0 \rangle_{B(k), \beta, h}^+,$$

et on conclut en faisant tendre $k \rightarrow \infty$. On montre maintenant un lemme intermédiaire :

LEMME 4.1.3. *Quelque soit $\beta \geq 0$, la fonction $h \mapsto \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+$ est croissante et continue à droite, et la fonction $h \mapsto \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^-$ est croissante et continue à gauche. Quelque soit $h \geq 0$, la fonction $\beta \mapsto \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+$ est croissante, et, quelque soit $h \leq 0$, la fonction $\beta \mapsto \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^-$ est décroissante.*

Nous allons montrer seulement les affirmations pour $\langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+$ (le reste s'en déduit facilement). Soit $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ fini. D'après l'inégalité FKG,

$$\frac{\partial}{\partial h} \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ = \sum_{x \in \Lambda} (\langle \omega_0 \omega_x \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ - \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ \langle \omega_x \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+) \geq 0.$$

Donc la fonction $h \mapsto \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+$ est croissante pour tout Λ fixé. La propriété de monotonie est conservée par passage à la limite $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$.

Soit $\{h_m\}$ une suite de réels qui tend vers h en décroissant ($h_m > h$) et soit $\Lambda_n \rightarrow \mathbb{Z}^d$. Le lemme 3.3.4 implique que la suite double $\{\langle \omega_0 \rangle_{\Lambda_n, \beta, h_m}^+\}_{n, m}$ est bornée et décroissante. On peut donc intervertir les limites :

$$\begin{aligned} \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h_m}^+ &= \lim_{m \rightarrow \infty} \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda_n, \beta, h_m}^+ \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \lim_{m \rightarrow \infty} \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda_n, \beta, h_m}^+ = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+ = \langle \omega_0 \rangle_{\beta, h}^+. \end{aligned}$$

La dernière égalité provient de la continuité en h de la fonction $h \mapsto \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda_n, \beta, h}^+$ (à n fixé).

De la même manière, et en utilisant cette fois l'inégalité GKS pour $h \geq 0$, on obtient

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ = \sum_{\{x, y\} \in \mathcal{E}_\Lambda^b} (\langle \omega_0 \omega_x \omega_y \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ - \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+ \langle \omega_y \omega_x \rangle_{\Lambda, \beta, h}^+) \geq 0,$$

et la propriété de monotonie est conservée par passage à la limite. \square

4.2 La valeur critique $\beta_c(d)$

Lorsque $h = 0$, on a $\langle \omega_0 \rangle_{\beta, 0}^- = -\langle \omega_0 \rangle_{\beta, 0}^+$. Par conséquent, la condition d'unicité (3.) du Théorème 4.1.1 est équivalente à $m^*(\beta) = 0$. On sait également que la fonction $\beta \mapsto m^*(\beta)$ est monotone, et on peut donc définir :

DÉFINITION 4.2.1. *La température inverse critique est*

$$\beta_c(d) := \inf \{ \beta \geq 0 ; m^*(\beta) > 0 \} = \sup \{ \beta \geq 0 ; m^*(\beta) = 0 \}.$$

Ceci signifie que $\beta_c(d)$ est l'unique valeur de β telle que $m^*(\beta) = 0$ si $\beta < \beta_c$ et $m^*(\beta) > 0$ si $\beta > \beta_c$. On ne sait pas encore si $0 < \beta_c(d) < \infty$.

REMARQUE 4.2.1. Par invariance par translation, $\langle \omega_x \rangle_{\beta,0}^+ = \langle \omega_0 \rangle_{\beta,0}^+ = m^*(\beta)$ quelque soit $x \in \mathbb{Z}^d$. On utilise l'inégalité de FKG et on obtient

$$\langle \omega_0 \omega_x \rangle_{\beta,0}^+ \geq \langle \omega_0 \rangle_{\beta,0}^+ \langle \omega_x \rangle_{\beta,0}^+ = (m^*(\beta))^2.$$

En particulier, si $\beta > \beta_c(d)$ alors

$$\inf_{x \in \mathbb{Z}^d} \langle \omega_0 \omega_x \rangle_{\beta,0}^+ > 0.$$

C'est ce qu'on appelle un effet d'ordre à longue portée.

On admet le théorème suivant :

THÉORÈME 4.2.1. *Pour tout $d \geq 2$, $\beta_c(d) < \infty$.*

On fait maintenant le lien avec la régularité de la pression :

THÉORÈME 4.2.2. *Quelque soit $\beta \geq 0$ et $h \in \mathbb{R}$, on a*

$$\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h) = \bar{m}^+(\beta, h), \quad \frac{\partial \psi}{\partial h^-}(\beta, h) = \bar{m}^-(\beta, h).$$

En particulier, on a la caractérisation suivante : il existe un unique état de Gibbs infini en (β, h) si et seulement si $h' \mapsto \psi(\beta, h')$ est différentiable en h .

Proof. Rappelons que l'ensemble \mathfrak{D}_β des points h où $h \mapsto \psi(\beta, h)$ n'est pas différentiable est au plus dénombrable. Par conséquent, quelque soit $h \in \mathbb{R}$, il est possible de trouver une suite $\{h_k\}$ qui tend en décroissant vers h telle que $h_k \notin \mathfrak{D}_\beta$ pour tout k . On déduit de la Proposition 2.3.2 que

$$\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, h) = \lim_{h_k \rightarrow h} \bar{m}(\beta, h_k) = \lim_{h_k \rightarrow h} \bar{m}^+(\beta, h_k) = \bar{m}^+(\beta, h).$$

La dernière égalité provient de la continuité à droite de la fonction $h \mapsto \bar{m}^+(\beta, h)$.

Par symétrie, on a

$$\frac{\partial \psi}{\partial h^-}(\beta, h) = -\frac{\partial \psi}{\partial h^+}(\beta, -h) = -\bar{m}^+(\beta, -h) = \bar{m}^-(\beta, h).$$

Par conséquent :

$$\frac{\partial \psi}{\partial h}(\beta, h) \text{ existe si et seulement si } \bar{m}^+(\beta, h) = \bar{m}^-(\beta, h).$$

On conclut d'après le Théorème 4.1.1. □

Chapter 5

Unicité à haute température et en présence de champ magnétique

5.1 Hautes températures

Nous allons maintenant considérer le cas des hautes températures, c'est-à-dire des $\beta < \beta_c$ et nous allons montrer l'unicité de l'état de Gibbs.

Pour cela, on écrit d'abord l'égalité suivante : puisque $\omega_x \omega_y$ ne peut prendre que les valeurs ± 1 , on a

$$e^{\beta \omega_x \omega_y} = \cosh(\beta) + \omega_x \omega_y \sinh(\beta) = \cosh(\beta) (1 + \tanh(\beta) \omega_x \omega_y).$$

Ceci implique : pour tout $\Lambda \subset \mathbb{Z}^d$ fini, et tout $\omega \in \Omega_\Lambda^+$,

$$e^{-H_{\Lambda,\beta,0}^b(\omega)} = \prod_{\{x,y\} \in \mathcal{E}_\Lambda^b} e^{\beta \omega_x \omega_y} = (\cosh(\beta))^{|\mathcal{E}_\Lambda^b|} \prod_{\{x,y\} \in \mathcal{E}_\Lambda^b} (1 + \tanh(\beta) \omega_x \omega_y).$$

En exercice nous montrerons : quelque soit \mathcal{E} un ensemble de cardinal fini et non vide,

$$\prod_{e \in \mathcal{E}} (1 + f(e)) = \sum_{E \subset \mathcal{E}} \prod_{e \in E} f(e).$$

Ceci implique :

$$Z_{\Lambda,\beta,0}^+ = (\cosh(\beta))^{|\mathcal{E}_\Lambda^b|} \sum_{E \subset \mathcal{E}_\Lambda^b} \left((\tanh(\beta))^{|E|} \sum_{\omega \in \Omega_\Lambda^+} \prod_{x \in \Lambda} \omega_x^{I(x,E)} \right),$$

où $I(x, E)$ est le nombre d'incidence défini par

$$I(x, E) := \#\{y \in \mathbb{Z}^d ; \{x, y\} \in E\}.$$

On peut alors calculer la somme sur ω à x fixé :

$$\sum_{\omega_x = \pm 1} \omega_x^{I(x,E)} = \begin{cases} 2 & \text{si } I(x,E) \text{ est pair} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

On en conclut :

$$Z_{\Lambda,\beta,0}^+ = 2^{|\Lambda|} (\cosh(\beta))^{|E_\Lambda^b|} \sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{even}}^+} (\tanh(\beta))^{|E|}, \quad (5.1)$$

où

$$\mathfrak{E}_{\Lambda,\text{even}}^+ := \{E \subset E_\Lambda^b ; I(x,E) \text{ est pair pour tout } x \in \Lambda\}.$$

L'égalité (5.1) est appelée *représentation à haute température* de la fonction de partition. De la même façon, il est facile de voir que

$$\begin{aligned} \langle \omega_0 \rangle_{\Lambda,\beta,0}^+ &= \frac{1}{Z_{\Lambda,\beta,0}^+} 2^{|\Lambda|} (\cosh(\beta))^{|E_\Lambda^b|} \sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{odd}}^+} (\tanh(\beta))^{|E|} \\ &= \frac{\sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{odd}}^+} (\tanh(\beta))^{|E|}}{\sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{even}}^+} (\tanh(\beta))^{|E|}} \end{aligned} \quad (5.2)$$

où

$$\mathfrak{E}_{\Lambda,\text{odd}}^+ := \{E \subset E_\Lambda^b ; I(x,E) \text{ est pair pour tout } x \in \Lambda \setminus \{0\}, \text{ et } I(0,E) \text{ est impair}\}.$$

Pour tout $E \subset E_\Lambda^b$, on note $\Delta(E)$ l'ensemble de toutes les arêtes de E_Λ^b qui n'intersectent aucun point présent dans E .

Tout $E \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{odd}}^+$ peut se décomposer comme $E = E_0 \cup E'$ où $E_0 \neq \emptyset$ est la composante connexe de E qui contient 0, et $E' \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{even}}^+$ satisfait $E' \subset \Delta(E_0)$. Par conséquent

$$\langle \omega_0 \rangle_{\Lambda,\beta,0}^+ = \sum_{\substack{E_0 \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{odd}}^+ \\ E_0 \text{ connexe}, 0 \in E_0}} (\tanh(\beta))^{|E_0|} \frac{\sum_{E' \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{even}}^+, E' \subset \Delta(E_0)} (\tanh(\beta))^{|E'|}}{\sum_{E \in \mathfrak{E}_{\Lambda,\text{even}}^+} (\tanh(\beta))^{|E|}} \quad (5.3)$$

On est maintenant prêt à prouver :

PROPOSITION 5.1.1. *Pour tout $d \geq 1$, $\beta_c(d) > 0$.*

Proof. Choisissons $\Lambda = B(n)$. Si on borne la fraction dans (5.3) par 1, on obtient

$$\langle \omega_0 \rangle_{B(n), \beta, 0}^+ \leq \sum_{\substack{E_0 \in \mathfrak{E}_{B(n), \text{odd}}^+ \\ E_0 \text{ connexe}, 0 \in E_0}} (\tanh(\beta))^{|E_0|}$$

On utilise le lemme suivant :

LEMME 5.1.2. *Soit G un graphe connexe qui contient N arêtes. Pour n'importe quel sommet g de G il existe un chemin partant de g qui visite chaque arête de G exactement 2 fois.*

La preuve de ce lemme se fait par récurrence sur N . On remarque qu'un graphe connexe peut toujours être construit pas à pas par une suite de graphes $(G_1, \dots, G_k, \dots, G_N)$, on construisant une arête à chaque étape de telle manière que le graphe reste toujours connexe (G_i contient i arêtes). Lorsque $N = 1$, le résultat du lemme est trivial. Supposons que le résultat soit vrai pour $N = k$. On va montrer que la propriété est conservée lorsqu'on ajoute une arête au graphe de telle façon à ce qu'il soit connexe. Soit e cette arête, donc $G_{k+1} = G_k \cup e$. Elle contient forcément un sommet v qui appartient au graphe G_k . Soit g un sommet dans G_{k+1} , et soit $\pi = (\pi(1), \dots, \pi(2k))$ un chemin d'arêtes dans G_k qui visite chaque arête de G exactement 2 fois et qui part de v . Si $g \in G_k$ alors on suit le chemin π jusqu'à rencontrer v , puis on parcourt la nouvelle arête deux fois (une fois dans chaque sens), puis on continue de suivre π . Si g est le nouveau sommet ajouté, alors on parcourt une fois la nouvelle arête, on suit le chemin π puis on parcourt de nouveau la nouvelle arête.

En utilisant ce lemme, on voit que le nombre de graphes E_0 qui contiennent exactement ℓ arêtes et qui donnent une contribution non nulle à la somme précédente peut être borné par le nombre de chemins de longueurs 2ℓ partant de 0. Ce dernier est nécessairement plus petit que $(2d)^{2\ell}$ puisque chaque nouvelle arête peut être choisie parmi au plus $2d$ directions possibles. D'autre part, E_0 doit nécessairement connecter 0 au complémentaire de $B(n)$. En effet, on a

$$\sum_{x \in \mathbb{Z}^d} I(x, E_0) = 2|E_0|$$

qui est pair. Puisque $I(0, E_0)$ est impair par hypothèse, il existe au moins un sommet $x \neq 0$ tel que $I(x, E_0)$ est impair. Ce sommet ne peut pas appartenir à $B(n)$ puisque $I(x, E_0)$ est pair pour tout $x \in B(n) \setminus \{0\}$. On en conclut que $|E_0| \geq n$, et puisque $\tanh(\beta) \leq \beta$,

$$\langle \omega_0 \rangle_{B(n), \beta, 0}^+ \leq \sum_{\ell \geq n} (4d^2 \beta)^\ell \leq e^{-cn},$$

où $c = c(\beta, d) > 0$ quelque soit $\beta < 1/(4d^2)$. En particulier, $\langle \omega_0 \rangle_{\beta,0}^+ = 0$ pour tout $\beta < 1/(4d^2)$, ce qui implique $\beta_c(d) > 0$. \square

On va maintenant voir ce qui se passe en dimension 1 :

PROPOSITION 5.1.3. $\beta_c(1) = \infty$.

Proof. Considérons le modèle d'Ising en dimension 1 dans la boîte $B(n) = \{-n, \dots, n\}$ avec condition au bord $+$. Il existe seulement un petit nombre de graphes $E \subset \mathcal{E}_{B(n)}^b$ qui apparaissent dans l'expression (5.2), et ils sont particulièrement simples. Commençons par le dénominateur. Puisque le nombre d'incidence de chaque sommet i doit être 0 ou 2, l'ensemble $\mathcal{E}_{B(n),\text{even}}^+$ contient seulement deux graphes : celui où l'ensemble des arêtes $E = \emptyset$ est vide, et celui où l'ensemble des arêtes est l'ensemble entier, c'est à dire $E = \mathcal{E}_{B(n)}^b$. D'autre part, l'ensemble $\mathcal{E}_{B(n),\text{odd}}^+$ contient également deux graphes : celui où toutes les valeurs positives (y compris 0) sont reliées, et celui où toutes les valeurs négatives (y compris 0) sont reliées. Par conséquent, (5.2) se réécrit

$$\langle \omega_0 \rangle_{B(n),\beta,0}^+ = \frac{2(\tanh(\beta))^{n+1}}{1 + (\tanh(\beta))^{2(n+1)}}$$

qui tend vers 0 quand $n \rightarrow \infty$, quelque soit $\beta < \infty$. \square

5.2 Lorsque $h \neq 0$

Nous laissons de côté la preuve de l'unicité de l'état de Gibbs pour n'importe quelle valeur de β dès que $h \neq 0$. Elle repose sur des résultats d'analyse complexe appliqués à la fonction de pression. En particulier on admettra le résultat suivant :

THÉORÈME 5.2.1. *Quelque soit $\beta \geq 0$,*

$$h \mapsto \psi(\beta, h) \text{ est différentiable en tout point } h \neq 0.$$

5.3 Résumé

Le résumé des résultats énoncés peut s'effectuer de la manière suivante :

THÉORÈME 5.3.1. Soit $\beta_c(d)$ l'inverse de la température critique pour le modèle d'Ising en dimension d . D'une part :

$$\beta_c(1) = \infty, \quad 0 < \beta_c(d) < \infty, \quad \text{pour tout } d \geq 2.$$

D'autre part,

1. Pour tout $\beta < \beta_c(d)$, la densité de magnétisation moyenne $\bar{m}(\beta, h)$ est bien définie (indépendamment de la suite de conditions au bord et de la suite de réseaux utilisées) pour tout $h \in \mathbb{R}$.

Quelque soit $\beta < \beta_c(d)$, $h \mapsto \bar{m}(\beta, h)$ est une fonction impaire, croissante et continue, et en particulier $\bar{m}(\beta, 0) = 0$.

2. Pour tout $\beta > \beta_c(d)$, la densité de magnétisation moyenne $\bar{m}(\beta, h)$ est bien définie (indépendamment de la suite de conditions au bord et de la suite de réseaux utilisées) pour tout $h \neq 0$.

Quelque soit $\beta > \beta_c(d)$, $h \mapsto \bar{m}(\beta, h)$ est une fonction impaire, croissante, continue partout sauf en $h = 0$:

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h > 0}} \bar{m}(\beta, h) = \bar{m}^+(\beta, 0) > 0, \quad \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h < 0}} \bar{m}(\beta, h) = \bar{m}^-(\beta, 0) < 0.$$

Enfin, la magnétisation spontanée vérifie :

$$m^*(\beta) \begin{cases} = 0 & \text{si } \beta < \beta_c(d), \\ > 0 & \text{si } \beta > \beta_c(d). \end{cases}$$

Proof. On a vu :

- pour tout $\beta \geq 0$, la fonction $h \mapsto \psi(\beta, h)$ est différentiable en tout $h \neq 0$ (Théorème 5.2.1)
- pour tout $\beta < \beta_c(d)$, la fonction $h \mapsto \psi(\beta, h)$ est différentiable en $h = 0$
- pour tout $\beta > \beta_c(d)$, la fonction $h \mapsto \psi(\beta, h)$ n'est pas différentiable en $h = 0$.

Ceci implique :

$$\mathfrak{D}_\beta = \begin{cases} \emptyset & \text{si } h \neq 0 \text{ ou } \beta < \beta_c(d) \\ \{0\} & \text{si } h = 0 \text{ et } \beta > \beta_c(d). \end{cases}$$

D'après la Proposition 2.3.2, ceci implique que $\bar{m}(\beta, h)$ est bien définie et indépendante de la condition de bord dès que $h \neq 0$ ou $\beta < \beta_c(d)$. Ceci montre en particulier :

$$\bar{m}(\beta, h) = \bar{m}^+(\beta, h), \quad \text{pour tout } h > 0.$$

□

Chapter 6

Modèle de Curie-Weiss

6.1 Approximation de champs moyen

Nous allons considérer dans ce chapitre une *approximation* du modèle d'Ising, où les interactions d'un spin avec ses voisins seront remplacées par une *moyenne* de toutes les interactions. Plus précisément, dans le modèle d'Ising le terme d'interaction qui apparaît dans l'Hamiltonien s'écrit :

$$-\beta \sum_{x \sim y} \omega_x \omega_y = -\beta \sum_{x \in \Lambda} \omega_x \left(\sum_{y : y \sim x} \omega_y \right).$$

Supposons que le réseau $\Lambda_N \subset \mathbb{Z}^d$ contienne exactement N sites. L'approximation de champs moyen consiste à remplacer chaque ω_y par la moyenne

$$\frac{1}{N} \sum_{z \in \Lambda_N} \omega_z$$

Le terme d'interaction devient donc

$$-\beta(2d) \frac{1}{N} \sum_{x, z \in \Lambda_N} \omega_x \omega_z.$$

On donne donc la définition suivante :

DÉFINITION 6.1.1. *L'Hamiltonien de Curie-Weiss pour une suite de spins $\{\omega_x\}_{x \in \Lambda_N}$ sur un réseau Λ_N en dimension d et de cardinal N est donné par*

$$H_{N, \beta, h}^{\text{CW}}(\omega) = -\frac{d\beta}{N} \sum_{x, y \in \Lambda_N} \omega_x \omega_y - h \sum_{x \in \Lambda_N} \omega_x.$$

On définit de la même manière que dans les chapitres précédents la mesure de Gibbs pour le modèle de Curie–Weiss : pour tout $\omega \in \Omega_N := \{-1, 1\}^{\Lambda_N}$,

$$\mu_{N,\beta,h}^{\text{CW}}(\omega) = \frac{e^{-H_{N,\beta,h}^{\text{CW}}(\omega)}}{Z_{N,\beta,h}^{\text{CW}}}, \quad \text{avec } Z_{N,\beta,h}^{\text{CW}} = \sum_{\omega \in \{-1,1\}^{\Lambda_N}} e^{-H_{N,\beta,h}^{\text{CW}}(\omega)}.$$

On note $\langle \cdot \rangle_{N,\beta,h}^{\text{CW}}$ l'espérance selon la mesure $\mu_{N,\beta,h}^{\text{CW}}$.

6.2 Comportement lorsque $h = 0$

Comme pour le modèle d'Ising, on remarque que, lorsque $h = 0$,

$$\mu_{N,\beta,0}^{\text{CW}}\left(\frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda_N} \omega_x = m\right) = \mu_{N,\beta,0}^{\text{CW}}\left(\frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda_N} \omega_x = -m\right)$$

et par conséquent,

$$\left\langle \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda_N} \omega_x \right\rangle_{N,\beta,h}^{\text{CW}} = 0.$$

On s'attend à ce que : lorsque β est petit, les spins soient essentiellement indépendants (donc la magnétisation moyenne proche de 0), et lorsque β est grand, les spins aient tendance à tous s'aligner, soit sur la valeur $+1$ soit sur la valeur -1 . On note

$$m_N(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{x \in \Lambda_N} \omega_x.$$

On a le théorème suivant :

THÉORÈME 6.2.1. *On suppose $h = 0$. On note $\beta_c = \beta_c(d) = \frac{1}{2d}$.*

1. *Lorsque $\beta \leq \beta_c$, la magnétisation est très proche de 0 : pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $c = c(\beta, \varepsilon) > 0$ tel que, pour tout N suffisamment grand,*

$$\mu_{N,\beta,0}^{\text{CW}}(m_N \in (-\varepsilon, \varepsilon)) \geq 1 - 2e^{-cN}.$$

2. *Lorsque $\beta > \beta_c$, la magnétisation n'approche pas 0 : il existe une magnétisation spontanée $m_{\text{CW}}^*(\beta) > 0$ telle que, pour tout $\varepsilon > 0$, il existe $b = b(\beta, \varepsilon) > 0$ tel que pour tout N suffisamment grand,*

$$\mu_{N,\beta,0}^{\text{CW}}(m_N \in J^*(\varepsilon)) \geq 1 - 2e^{-bN}$$

où

$$J^*(\varepsilon) := (-m_{\text{CW}}^*(\beta) - \varepsilon, -m_{\text{CW}}^*(\beta) + \varepsilon) \cup (m_{\text{CW}}^*(\beta) - \varepsilon, m_{\text{CW}}^*(\beta) + \varepsilon).$$

Autrement dit, pour N suffisamment grand :

pour tout $\beta \leq \beta_c$, $m_N \simeq 0$ avec grande probabilité ,

et

pour tout $\beta > \beta_c$, $m_N \simeq \begin{cases} m_{CW}^*(\beta) & \text{avec probabilité proche de } \frac{1}{2} \\ -m_{CW}^*(\beta) & \text{avec probabilité proche de } \frac{1}{2}. \end{cases}$

Dans les deux cas, ce comportement est compatible avec le fait que

$$\langle m_N \rangle_{N,\beta,h}^{CW} = 0.$$

Proof. Le modèle de Curie–Weiss possède une propriété remarquable par rapport au modèle d’Ising : puisque

$$\sum_{x,y} \omega_x \omega_y = \left(\sum_x \omega_x \right)^2$$

on remarque que l’Hamiltonien peut se réécrire :

$$H_{N,\beta,h}^{CW}(\omega) = -d\beta(m_N)^2 N.$$

On définit trois fonctions qui nous seront utiles par la suite : pour tout $m \in [-1, 1]$:

$$\begin{aligned} e(m) &= -dm^2 \\ s(m) &= -\frac{1-m}{2} \log \left(\frac{1-m}{2} \right) - \frac{1+m}{2} \log \left(\frac{1+m}{2} \right) \\ f_\beta^{CW}(m) &= \beta e(m) - s(m). \end{aligned}$$

La fonction f_β^{CW} est appelée *énergie libre* du modèle de Curie–Weiss. Nous allons montrer l’équivalent du théorème de convergence de la pression (Théorème 2.1.2), qui s’énonce ainsi :

PROPOSITION 6.2.2. *Pour tout $\beta \geq 0$,*

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,0}^{CW} = - \min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(m).$$

De plus, pour tout intervalle $J \subset [-1, 1]$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \mu_{N,\beta,0}^{CW}(m_N \in J) = - \min_{m \in J} \mathcal{I}_\beta^{CW}(m),$$

où

$$\mathcal{I}_\beta^{CW}(m) = f_\beta^{CW}(m) - \min_{m' \in [-1,1]} f_\beta^{CW}(m').$$

Dans le langage des grandes déviations, la fonction $\mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}$ est appelée une *fonction de taux*. On voit facilement que : $\mathcal{I}_\beta^{\text{CW}} \geq 0$ et que

$$\min_{m \in [-1, 1]} \mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}(m) = 0.$$

Par conséquent, si $J \subset [-1, 1]$ est un intervalle sur lequel on sait que $\mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}$ est strictement positive, alors

$$\min_{m \in J} \mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}(m) > 0$$

et la proposition nous dit que

$$\mu_{N, \beta, 0}^{\text{CW}}(m_N \in J)$$

converge exponentiellement vite vers 0 lorsque $N \rightarrow \infty$, ce qui signifie que la magnétisation m_N prendra très probablement ses valeurs en dehors de J . En particulier, les valeurs *typiques* de la magnétisation se trouvent dans des régions où la fonction de taux $\mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}$ s'annule.

On démontre maintenant la Proposition. On remarque qu'à N fixé, m_N prend ses valeurs dans l'ensemble

$$\mathcal{A}_N = \left\{ -1 + \frac{2k}{N} ; k = 0, \dots, N \right\} \subset [-1, 1].$$

Soit $J \subset [-1, 1]$ un intervalle. Alors

$$\mu_{N, \beta, 0}^{\text{CW}}(m_N \in J) = \sum_{m \in J \cap \mathcal{A}_N} \mu_{N, \beta, 0}^{\text{CW}}(m_N = m).$$

Or, il y a exactement

$$\binom{N}{\frac{1+m}{2}N}$$

configurations ω telles que $m_N(\omega) = m$. Donc on calcule directement

$$\mu_{N, \beta, 0}^{\text{CW}}(m_N = m) = \sum_{\substack{\omega \in \{-1, 1\}^N \\ m_N(\omega) = m}} \frac{e^{-H_{N, \beta, 0}^{\text{CW}}(\omega)}}{Z_{N, \beta, 0}^{\text{CW}}} = \frac{1}{Z_{N, \beta, 0}^{\text{CW}}} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N}.$$

De la même façon,

$$Z_{N, \beta, 0}^{\text{CW}} = \sum_{m \in \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N}.$$

Cette somme comporte $N + 1$ termes positifs. On garde uniquement le terme dominant, et on encadre :

$$\max_{m \in \mathcal{A}_N} \left\{ \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N} \right\} \leq Z_{N, \beta, 0}^{\text{CW}} \leq (N + 1) \max_{m \in \mathcal{A}_N} \left\{ \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N} \right\}.$$

Un raffinement de la formule de Stirling s'écrit de la manière suivante : pour tout $n \geq 1$,

$$e^{\frac{1}{12n+1}} \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n} \leq n! \leq e^{\frac{1}{12n}} \sqrt{2\pi n} n^n e^{-n}.$$

Ceci implique qu'il existe deux constantes c_- et c_+ positives telles que, pour tout $m \in \mathcal{A}_N$,

$$c_- N^{-1/2} e^{Ns(m)} \leq \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} \leq c_+ N^{-1/2} e^{Ns(m)}.$$

Ainsi,

$$\begin{aligned} Z_{N,\beta,0}^{\text{CW}} &\leq c_+ (N+1) N^{-1/2} \exp\left(N \max_{m \in \mathcal{A}_N} \{d\beta m^2 + s(m)\}\right) \\ &\leq c_+ (N+1) N^{-1/2} \exp\left(-N \min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{\text{CW}}(m)\right), \end{aligned}$$

ce qui implique la borne supérieure :

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,0}^{\text{CW}} \leq - \min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{\text{CW}}(m).$$

Pour la borne inférieure, on utilise la continuité de la fonction $m \mapsto d\beta m^2 + s(m)$ sur $[-1, 1]$ et on considère $m' \in [-1, 1]$ tel que $f_\beta^{\text{CW}}(m') = \min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{\text{CW}}(m)$. Soit $\varepsilon > 0$ et soit $m \in \mathcal{A}_N$ tel que

$$|f_\beta^{\text{CW}}(m) - f_\beta^{\text{CW}}(m')| \leq \varepsilon$$

(ceci est toujours possible pour N suffisamment grand). On a alors

$$Z_{N,\beta,0}^{\text{CW}} \geq c_- N^{-1/2} \exp(-N(f_\beta^{\text{CW}}(m') + \varepsilon)).$$

Ceci implique

$$\liminf_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,0}^{\text{CW}} \geq - \min_{m \in [-1,1]} f_\beta^{\text{CW}}(m) - \varepsilon.$$

Comme $\varepsilon > 0$ est arbitraire, ceci montre la première assertion de la Proposition. Les mêmes calculs sur la somme sur $m \in \mathcal{J} \cap \mathcal{A}_N$ montrent la convergence

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \sum_{m \in \mathcal{J} \cap \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{d\beta m^2 N} = - \min_{m \in \mathcal{J}} f_\beta^{\text{CW}}(m).$$

On passe maintenant à la preuve du théorème. Comme nous l'avons vu, nous devons trouver les zéros de la fonction $\mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}$, qui sont aussi ses minima car $\mathcal{I}_\beta^{\text{CW}} \geq 0$, ce qui équivaut à résoudre

$$\frac{\partial \mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}}{\partial m}(m) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \tanh(2d\beta m) = m.$$

Cette équation admet toujours au moins une solution, et une analyse complète de la fonction $m \mapsto \tanh(2d\beta m)$ nous permet de dire que le nombre de solutions dépend de la position de $2d\beta$ par rapport à 1 : plus précisément, si $\beta \leq \beta_c$ alors l'équation ci-dessus a une unique solution $m = 0$; si $\beta > \beta_c$, alors il y a deux autres solutions non triviales $m_{\text{CW}}^*(\beta)$ et $-m_{\text{CW}}^*(\beta)$. De plus, la solution $m = 0$ est un maximum *local* pour $\mathcal{I}_\beta^{\text{CW}}$ alors que les valeurs $m_{\text{CW}}^*(\beta)$ et $-m_{\text{CW}}^*(\beta)$ sont des minima *globaux*. \square

REMARQUE 6.2.1. On retrouve une propriété générale de la physique statistique que nous avons évoquée au premier chapitre : les valeurs *typiques* de la magnétisation sont celles qui *minimisent* l'énergie libre.

REMARQUE 6.2.2. Le changement de comportement a lieu au moment où deux nouveaux minima apparaissent pour la fonction d'énergie libre. La fonction $e(m)$, la *densité d'énergie*, est concave et est minimale en $m = \pm 1$. D'autre part, la fonction $s(m)$, la *densité d'entropie* est concave et maximale en $m = 0$. La compétition entre les deux donne la *transition de phase* : si β est petit, alors l'entropie domine et $f_\beta^{\text{CW}}(m)$ est strictement convexe. Si β est grand, alors l'énergie joue un rôle plus important : f_β^{CW} n'est plus convexe et possède deux minima.

6.3 Comportement en $h \neq 0$ lorsque N est suffisamment grand

En présence d'un champ extérieur h , on a besoin de considérer la *pression*.

THÉORÈME 6.3.1. *La pression*

$$\psi_\beta^{\text{CW}}(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log Z_{N,\beta,h}^{\text{CW}}$$

existe, et est convexe. De plus, elle est égale à la transformée de Legendre de l'énergie libre :

$$\psi_\beta^{\text{CW}}(h) = \max_{m \in [-1,1]} \{hm - f_\beta^{\text{CW}}(m)\}.$$

Proof. La preuve est simple car elle repose sur les calculs précédents :

$$Z_{N,\beta,h}^{\text{CW}} = \sum_{m \in \mathcal{A}_N} \sum_{\substack{\omega \in \{-1,1\}^{\wedge N} \\ m_N(\omega) = m}} e^{-H_{N,\beta,h}^{\text{CW}}(\omega)} = \sum_{m \in \mathcal{A}_N} \binom{N}{\frac{1+m}{2}N} e^{(hm + d\beta m^2)N}.$$

6.3. COMPORTEMENT ENH $\neq 0$ LORSQU'EN EST SUFFISAMMENT GRAND 71

On obtient le même type de bornes, par exemple,

$$Z_{N,\beta,h}^{\text{CW}} \leq c_+(N+1)N^{-1/2} \exp\left(N \max_{m \in [-1,1]} \{hm - f_\beta^{\text{CW}}(m)\}\right).$$

La transformée de Legendre d'une fonction est toujours convexe. \square

Cette fois, pour trouver les maxima de la nouvelle fonction $m \mapsto hm - f_\beta^{\text{CW}}(m)$, on doit résoudre $\partial f_\beta^{\text{CW}} / \partial m = h$, qui équivaut à

$$\tanh(2d\beta m + h) = m. \quad (6.1)$$

Lorsque $\beta < \beta_c$, il existe une unique solution m à (6.1), que l'on note $m_\beta^{\text{CW}}(h)$. Lorsque $\beta > \beta_c$, il peut y avoir plus qu'une solution, en fonction de la valeur de h : si $h > 0$ on choisit la plus grande ; si $h < 0$, on choisit la plus petite (et on la note toujours $m_\beta^{\text{CW}}(h)$). L'étude de fonction nous permet également d'affirmer :

- si $\beta \leq \beta_c$,

$$\lim_{h \rightarrow 0} m_\beta^{\text{CW}}(h) = 0,$$

- si $\beta > \beta_c$,

$$\lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h > 0}} m_\beta^{\text{CW}}(h) = m_{\text{CW}}^*(\beta) > -m_{\text{CW}}^*(\beta) = \lim_{\substack{h \rightarrow 0 \\ h < 0}} m_\beta^{\text{CW}}(h).$$

D'après le théorème des fonctions implicites, la fonction $h \mapsto m_\beta^{\text{CW}}(h)$ est de classe C^∞ sur $(-\infty, 0)$ et sur $(0, +\infty)$. De plus, par définition de la transformée de Legendre,

$$\psi_\beta^{\text{CW}}(h) = -d\beta (m_\beta^{\text{CW}}(h))^2 + \log \cosh(2d\beta m_\beta^{\text{CW}}(h) + h) + \log 2,$$

et ainsi $\psi_\beta^{\text{CW}}(h)$ est aussi de classe C^∞ sur $(-\infty, 0)$ et $(0, +\infty)$. Si on dérive par rapport à h , on obtient

$$\frac{\partial \psi_\beta^{\text{CW}}}{\partial h}(h) = m_\beta^{\text{CW}}(h), \quad \text{pour tout } h \neq 0.$$

Puisque ψ_β^{CW} est convexe, alors on sait que les dérivées à droite et à gauche en 0 existent et de plus :

- si $\beta \leq \beta_c$, on a

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \psi_\beta^{\text{CW}}}{\partial h^-} \right|_{h=0} &= \lim_{h \rightarrow 0^-} \frac{\partial \psi_\beta^{\text{CW}}}{\partial h} = \lim_{h \rightarrow 0^-} m_\beta^{\text{CW}}(h) \\ &= 0 \\ &= \lim_{h \rightarrow 0^+} m_\beta^{\text{CW}}(h) = \lim_{h \rightarrow 0^+} \frac{\partial \psi_\beta^{\text{CW}}}{\partial h} = \left. \frac{\partial \psi_\beta^{\text{CW}}}{\partial h^+} \right|_{h=0} \end{aligned}$$

et donc ψ_β^{CW} est différentiable en 0.

- si $\beta > \beta_c$, le même argument montre que

$$\left. \frac{\partial \psi_\beta^{\text{CW}}}{\partial h^-} \right|_{h=0} = -m_{\text{CW}}^*(\beta) < 0 < m_{\text{CW}}^*(\beta) = \left. \frac{\partial \psi_\beta^{\text{CW}}}{\partial h^+} \right|_{h=0},$$

et donc ψ_β^{CW} n'est pas différentiable en 0.