ÉCOLE POLYTECHNIQUE

CENTRE DE MATHÉMATIQUES

PLATEAU DE PALAISEAU - 91128 PALAISEAU CEDEX

Téléphone : 941.82.00 - Poste N°

Télex : ECOLEX 691 596 F

SEMINAIRE SUR LES PROCESSUS MARKOVIENS A UNE INFINITE DE PARTICULES

L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE DANS LES SYSTEMES INFINIS DE PARTICULES

Jean MOULIN OLLAGNIER

Didier PINCHON

Février 1978

L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE DANS LES SYSTEMES INFINIS DE PARTICULES

Ces notes sont la rédaction d'une série d'exposés faits au Séminaire sur les processus markoviens à une infinité de particules. Notre but dans ces exposés était de faire le point sur les relations entre certains processus markoviens et la mécanique statistique sur un réseau.

La plupart des questions mathématiques que nous étudions ici ont déjà été abordées ces trois dernières années au séminaire. Notre parti-pris a cependant été de donner à ces exposés un caractère presque introductif. En particulier, une première partie est consacrée à l'évocation des fondements de la thermodynamique. Nous espérons que cette présentation sera utile à la compréhension intuitive des résultats ultérieurs.

Notre seule contribution originale, dans ce papier, consiste en la démonstration générale du principe variationnel en mécanique statistique sur un réseau moyennable. C'est-à-dire à caractériser les mesures d'équilibre comme les mesures de Gibbs invariantes. Nous utilisons pour cela un principe variationnel local et la seule moyennabilité du réseau. Ce résultat est à comparer au principe variationnel en théorie ergodique qui ne peut être obtenu qu'en utilisant les propriétés de pavage du groupe. On ne sait d'autre part pas caractériser les mesures d'équilibre éventuelles.

P L A N

UN PEU DE THERMODYNAMIQUE...

Etats d'un système.

Soit $\mathcal{S}$ un système. $\mathcal{S}$ est caractérisé par un ensemble d'états. Il convient de distinguer des états particuliers, les états d'équilibre, qui correspondent à la situation dans laquelle $\mathcal{S}$ ne subit aucune modification au cours du temps ; ils seront définis ultérieurement.

Etant donnés deux systèmes $\mathcal{S}_1$ et $\mathcal{S}_2$, la réunion des deux systèmes est un système $\mathcal{S}$. Si l'on connait l'état a_1 de $\mathcal{S}_1$ et l'état a_2 de $\mathcal{S}_2$ l'état a de $\mathcal{S}$ est obtenu à partir de a_1 et a_2 et on note $a = a_1 + a_2$.

Entropie - Variables extensives.

On précise la notion d'état de la manière suivante : il existe un ensemble de fonctions S et X_i, $i \in I$ sur $\mathcal{S}$, vérifiant

$$X_i(a_1+a_2) = X_i(a_1) + X_i(a_2) \quad \text{pour } i \in I$$

$$S(a_1+a_2) = S(a_1) + S(a_2) \quad \text{si } a_1 \text{ et } a_2 \text{ sont des états d'équilibre}$$

S s'appelle l'entropie et les X_i les paramètres extensifs à cause de la relation d'additivité précédente.

On suppose qu'un état d'équilibre a du système est entièrement déterminé dès que l'on connait la valeur des $X_i(a)$, ce qui revient à identifier l'ensemble des états d'équilibre à un sous-ensemble de $\mathbb{R}^I$, supposé être un ouvert.

S est donc une fonction des paramètres extensifs dans le domaine $\mathcal{E}$ des états d'équilibre : $S = S(X_i, i \in I)$ et on appelle cette relation représentation entropique du système.

La plus importante des variables extensives est l'énergie, notée U. Sont également des variables extensives le volume, le nombre de particules, la magnétisation dans unsystème de spins, etc...

Variables intensives.

On suppose dans la suite que S est une fonction continue et même différentiable des X_i dans l'ouvert $\mathcal{E}$ des états d'équilibre.

Définition. On appelle paramètre intensif entropique conjugué de X_i par rapport à S la fonction Y_i définie par $Y_i = \partial S/\partial X_i$.

Exemple. La température thermodynamique T est définie par $\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U}$

Pour la description des systèmes en équilibre, on utilise également la représentation énergétique obtenue à partir de la représentation entropique $S = S(U, X_i)$ en supposant qu'il est loisible d'appliquer le théorème des fonctions implicites : $U = U(S, X_i, i \in I)$

Définition. On appelle paramètre intensif énergétique conjugué de X_i par rapport à U la fonction Z_i définie par $Z_i = \partial U/\partial X_i$.

Exemples.
- La température $T = \partial U/\partial S$.
- La pression est définie par $P = - \partial U/\partial V$, où V est le volume , le signe moins étant dû à ce qu'en physique, la pression est positive.
- Le potentiel chimique $\mu = \partial U/\partial N$, N nombre de particules ;
- Le champ magnétique $h = \partial U/\partial m$, où m est la magnétisation.

Les relations que l'on obtient à partir des relations $U = U(S, X_i)$ et $Z_i = \partial U/\partial X_i(S, X_i)$, par exemple en éliminant l'une des variables X_i s'appellent <u>équations d'état</u> du système. Rappelons que de telles équations ne sont valides que pour des états d'équilibre. Pour obtenir de telles équations , il est nécessaire de faire des hypothèses physiques sur le système. Par exemple , la loi des gaz parfaits $P.V/N.T = Cte$

La transformation de Legendre.

L'état d'un système est déterminé dès que l'on connait la valeur de ses paramètres extensifs. Cependant, la nature de la plupart des instruments de mesure fait qu'il est plus facile demesurer la valeur des paramètres intensifs. Par exemple, on sait mesurer la température, pas l'entropie. Dans la description de l'état, on va donc remplacer des paramètres extensifs par leurs paramètres intensifs conjugués. Nous verrons de plus que la description a un sens dans certaines situations physiques.

Pour obtenir la nouvelle représentation, on effectue une transformation de Legendre :

Soit $f(x, y) = 0$ une courbe du plan. Les nouvelles variables sont alors $z = dy/dx$ et $t = y - x.dy/dx$ et l'équation de la courbe devient $F(z, t) = 0$

Par exemple, pour avoir la température comme variable descriptive du système, on élimine S d'entre les relations

$$T = \partial U/\partial S(S, X)$$

$$F = U(S, X) - T.S$$

et la fonction $F = F(T, X)$ ainsi obtenue s'appelle énergie libre du système.

Plus généralement, on appelle potentiels thermodynamiques les fonctions obtenues par élimination de variables extensives.

La situation physique qualitative d'un système est décrite par ses interactions avec d'autres systèmes. L'interaction entre deux systèmes est caractérisée par l'ensemble des variables extensives faisant l'objet d'échanges entre eux. On parle alors de la nature de la paroi qui les sépare. On dit qu'une paroi est diatherme, poreuse, déformable, si les systèmes en interaction échangent de l'énergie, des particules, du volume.

Un système est dit isolé s'il n'a aucune interaction avec aucun autre système (avec l'extérieur).

Le premier principe de la thermodynamique consiste à mettre en évidence les variables extensives qui ne font pas l'objet d'échanges avec l'extérieur, c'est-à-dire restent constantes au cours de l'évolution.

Ainsi, pour un système isolé, il y a conservation de l'énergie.

Le second principe de la thermodynamique est le suivant : au cours de l'évolution d'un système isolé, il y a croissance de l'entropie. Les états d'équilibre du système sont définis comme ceux qui ne peuvent pas être les états initiaux d'un processus pendant lequel le système reste isolé.

On en déduit, pour un système isolé, que l'entropie est maximale pour les états d'équilibre.

Si la réunion de deux systèmes séparés par une paroi perméable à la grandeur extensive X, est en état d'équilibre, les paramètres conjugués de X sont égaux pour les deux systèmes.

En effet, puisque les systèmes sont en état d'équilibre, l'entropie est la somme des entropies : $S = S_1 + S_2$. D'après le second principe, S est maximale. Le premier principe impose la conservation de $X = X_1 + X_2$. Donc

$$\partial S/\partial X_1 = 0$$
$$\partial S_1/\partial X_1 = \partial S_2/\partial X_2$$

Si un système $\mathcal{S}_1$ est en interaction par une paroi perméable à X avec un système $\mathcal{S}_2$, tel que X_1 est négligeable devant X_2, on dit que $\mathcal{S}_2$ est un réservoir pour $\mathcal{S}_1$. Toutes les transformations de $\mathcal{S}_1$ ont alors lieu à $Y_1 = Y_2 = Cte$. Par exemple, si le système $\mathcal{S}$ est en interaction avec un réservoir d'énergie, les transformations ont lieu à température constante.

Cette situation justifie, d'ailleurs, de choisir la température comme variable indépendante, plutôt que l'énergie.

En particulier, les appareils de mesure pour les variables intensives sont des systèmes pour lesquels on peut considérer le système étudié comme un réservoir.

Au cours d'un processus, un système non isolé échange de l'énergie avec l'extérieur. Si tous les états intermédiaires du système sont des états d'équilibre (transformation réversible), on a

$$dU = T.dS + \sum_i \partial U/\partial X_i \, dX_i$$

La quantité d'énergie reçue par le système se présente donc sous la forme d'une somme ; le premier terme, noté dQ, est la quantité de chaleur reçue par le système ; le second, noté dW, est la quantité de travail. Attention, ni dQ, ni dW, ne sont des différentielles totales.

Une façon classique d'introduire la température et l'entropie est de présenter $1/T$ comme facteur intégrant de dQ et de poser $dS = dQ/T$.

L'interprétation statistique.

On suppose maintenant que le système étudié est composé d'un grand nombre d'éléments, et on l'appelle micro-système. Dans cette représentation, un état du système correspond alors à une probabilité sur l'ensemble des configurations du micro- système.

On cherche alors une fonction d'un vecteur de probabilité $(p_1, \ldots, p_n)$ sous la forme $\sum f(p_i)$, susceptible de représenter l'entropie de l 'état.

On pose alors, comme principe de la thermodynamique statistique, que l'équilibre entre deux systèmes se traduit par l'indépendence statistique des micro-systèmes. Comme l'entropie est additive dans ce cas, la détermination de f résulte du lemme suivant.

Lemme. Soit f une fonction continue sur $[0, 1]$ vérifiant, pour tout couple de vecteurs de probabilité $p = (p_1, \ldots, p_m)$ $q = (q_1, \ldots, q_n)$,

$$\sum_{i,j} f(p_i q_j) = \sum_i f(p_i) + \sum_j f(q_j)$$

alors il existe une constante k avec $f(x) = -k\,x \operatorname{Log} x$.

Démonstration. On a $f(0) = 0$ et, avec $p_1 = 1$, $q_1 = 1$, on obtient $f(1) = 0$. En choisissant les vecteurs $(1/n, \ldots, 1/n)$ et $(1/m, \ldots, 1/m)$, il vient

$$mn f\left(\frac{1}{mn}\right) = m f\left(\frac{1}{m}\right) + n f\left(\frac{1}{n}\right)$$

Prenant ensuite, si $p < q$, les vecteurs $(p/q, 1/q, \ldots, 1/q)$ et $(1/p, \ldots, 1/p)$, il vient

$$\frac{q}{p} f\left(\frac{p}{q}\right) = q f\left(\frac{1}{q}\right) - p f\left(\frac{1}{p}\right)$$

D'où ensuite, pour x et y rationnels de $]0, 1[$

$$\frac{1}{xy} f(xy) = \frac{1}{x} f(x) + \frac{1}{y} f(y)$$

Si f est supposée continue et positive sur $[0,1]$, il existe une constante positive k telle que $1/x\, f(x) = -k \operatorname{Log} x$ et $f(x) = -kx \operatorname{Log} x$.

La constante k dépend des unités choisies pour mesurer les grandeurs macroscopiques ; par exemple, $k = 1{,}384 . 10^{-16}$ erg/degK (Constante de Boltzmann)

Soit $\mathcal{S}$ un système isolé d'énergie interne U et soit $\Omega(U)$ l'ensemble des configurations du micro-système d'énergie U. Le deuxième principe énonce qu'un état d'équilibre correspond à un maximum de l'entropie.

Le maximum de $\sum p_i \operatorname{Log} p_i$ est atteint lorsque tous les p_i sont égaux et a pour valeur $S = k \operatorname{Log} |\Omega(U)|$. La distribution ainsi obtenue, de support $\Omega(U)$ s'appelle distribution microcanonique ou ensemble microcanonique.

Soit $\mathcal{S}$ un système en interaction avec un réservoir R d'énergie (thermostat). La réunion des deux systèmes est un système isolé et on peut donc lui appliquer le résultat précédent.

Soit i un état du système $\mathcal{S}$ d'énergie $U(i)$; puisque l'énergie totale U est constante, l'énergie du réservoir est $U - U(i)$ et $p_i = \frac{1}{|\Omega(U)|} |\Omega_R(U - U(i))|$
Si l'on écrit alors

$$\operatorname{Log} |\Omega_R(U - U(i))| = \operatorname{Log} |\Omega_R(U)| - \beta U(i) + \ldots$$

où $\beta = \partial/\partial U \; (\operatorname{Log} |\Omega_R(U)|) = \frac{1}{k T_R}$

on obtient, en négligeant les autres termes du développement,

$$p_i = \frac{|\Omega_R(U)|}{|\Omega(U)|} \exp -\beta U(i)$$

et $|\Omega_R(U)| / |\Omega(U)|$ est une constante de normalisation égale à $\sum_i \exp -\beta U(i)$.

Puisque les systèmes sont en équilibre, on a $T_R = T_{\mathcal{S}}$. La distribution ainsi obtenue s'appelle distribution canonique ou ensemble canonique.

Lorsque le système est, de plus en interaction avec des réservoirs pour d'autres grandeurs extensives, on obtient de la même façon des distributions appelées grand-canoniques.

L'énergie libre $F = U - T.S$ est égale à $F = \Sigma_i \, p_i \, (U(i) + kT \operatorname{Log} p_i)$

Déterminons ses extremums, compte-tenu de la relation $p_1 + \ldots + p_n = 1.$

$$0 = \partial F / \partial p_i = U(i) + kT \operatorname{Log} p_i + kT - U(n) - kT \operatorname{Log} p_n - kT$$

D'où $U(i) + kT \operatorname{Log} p_i = K$

$kT \operatorname{Log} p_i = K - U(i)$

$\operatorname{Log} p_i = K' - \beta U(i)$

$p_i = Z^{-1} . \exp - \beta U(i)$ avec $Z = \Sigma_i \exp - \beta U(i).$

On obtient la distribution canonique et un minimum pour F égal à $-\frac{1}{\beta} \operatorname{Log} Z$

EXEMPLE : UN MODELE SIMPLIFIE POUR LE CAOUTCHOUC.

Le système considéré est un élastique en caoutchouc, dont l'une des extrémités est fixée et l'autre soumise à une force constante. On adopte pour le micro-système la description suivante .

> L'élastique est constitué de N maillons qui peuvent chacun prendre deux positions qui correspondent à des longueurs $a - b$ (contracté) ou $a + b$ (en extension) avec $b < a$. L'énergie d'un chainon i est $u_i = -\alpha \varepsilon_i$ α constante positive, $\varepsilon_i = +1$ si le chaînon est en extension, $\varepsilon_i = -1$ s'il est contracté. On suppose d'autre part qu'il n'y a aucune interaction entre les chaînons, de sorte que l'énergie totale de la chaîne, si n chaînons sont en position contractée, est
>
> $$U(n) = -\alpha(N - 2n)$$

Ensemble microcanonique.

On suppose que le système est isolé. Le nombre des configurations correspondant à l'énergie $U(n)$ est C_N^n d'où l'entropie $S_n = k \operatorname{Log} C_N^n$. L'entropie moyenne par site est $S_n/N = k/N \operatorname{Log} C_N^n$.

Pour calculer la température microcanonique, il est nécessaire de passer à la limite. On suppose donc que N tend vers l'infini et que l'énergie moyenne par site a une limite $\bar{u}$, c'est-à-dire que n/N a une limite θ avec $\bar{u} = -\alpha(1 - 2\theta)$.

On a alors

$$\lim \frac{S_n}{N} = k.\ \lim \frac{1}{N} \operatorname{Log} C_N^{N\theta} \quad \text{avec} \quad \theta \in [0,1]$$

En utilisant la formule de Stirling $n! \sim \sqrt{2\pi}.\ n^{n+1/2}.\ e^{-n}$, on vérifie

$$\bar{s} = \lim \frac{S_n}{N} = k(-\theta \operatorname{Log} \theta - (1-\theta) \operatorname{Log}(1-\theta))$$

La température microcanonique est donnée par

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial \bar{s}}{\partial u} = \frac{\partial \bar{s}}{\partial \theta} \cdot \frac{1}{2\alpha} = \frac{k}{2\alpha}\ (-\operatorname{Log}\theta + \operatorname{Log}(1-\theta)) = \frac{k}{2\alpha} \operatorname{Log}\frac{1-\theta}{\theta}$$

La longueur moyenne par chaînon est $\bar{l} = a + b(1-2\theta)$

Ensemble canonique.

La probabilité d'une configuration d'énergie $U(n)$ est proportionnelle à $\exp(+\beta\alpha(N-2n))$. La fonction de partition est $Z = (2\operatorname{ch}\beta\alpha)^N$. L'énergie moyenne par chaînon est égale à $\bar{u} = -\alpha \operatorname{th}\beta\alpha$. L'entropie moyenne par chaînon est égale à $\bar{s} = k(\beta\bar{u} - \operatorname{Log}2\operatorname{ch}\beta\alpha)$. L'énergie libre moyenne est $\bar{f} = \bar{u} - T.\bar{s}$, $\bar{f} = -kT \operatorname{Log}2\operatorname{ch}\alpha/kT$.

Equivalence des ensembles.

Dans le cadre microcanonique, la température est donnée par

$$\frac{1}{kT} = \frac{1}{2\alpha}\operatorname{Log}\frac{1-\theta}{\theta} \qquad \text{avec} \qquad \bar{u} = -\alpha(1-2\theta)$$

d'où

$$\frac{1}{kT} = \frac{1}{2\alpha}\operatorname{Log}\frac{\alpha-\bar{u}}{\alpha+\bar{u}}$$

Dans le cadre canonique, l'énergie $\bar{u}$ est donnée par $\bar{u} = -\alpha \operatorname{th}\frac{\alpha}{kT}$

On peut vérifier que c'est la même équation d'état qui lie α et $\bar{u}$. C'est ce que l'on appelle l'équivalence des grands ensembles.

Remarque. La longueur moyenne est donnée par $\bar{l} = a + b\operatorname{th}\frac{\alpha}{kT}$ et on vérifie que

$$\frac{\partial \bar{l}}{\partial kT} = \frac{b}{\operatorname{ch}^2\alpha/kT} \cdot \frac{-\alpha}{(kT)^2} \leqslant 0$$

D'autre part, lorsque l'on effectue une transformation, indexée par un paramètre λ, variant de λ_0 à λ_1, le travail reçu par le système, qui n'est pas une fonction d'état, est égal à

$$W = \int_{\lambda_0}^{\lambda_1} \frac{dW}{d\lambda}\, d\lambda \qquad \text{où} \quad dW = dU - T\,dS$$

Si β est l'inverse de la température et si, à chaque instant, l'état intermédiaire est un état d'équilibre, c'est-à-dire satisfait à l'équation d'état :

$$\frac{d\bar{u}}{d\beta} = -\alpha^2 / \mathrm{ch}^2 \beta\alpha$$

$$\frac{ds}{d\beta} = k\left(-\beta\alpha^2 / \mathrm{ch}^2 \beta\alpha - 2\alpha\, \mathrm{th}\beta\alpha \right)$$

et donc $$\frac{dW}{d\beta} = \frac{2\alpha}{\beta}\ \mathrm{th}\beta\alpha \geqslant 0$$

Et le système fournit de l'énergie mécanique lorsqu'on augmente la température.

Conclusion.

Les quelques calculs de cette première partie et leurs approximations montrent la nécessité du passage à la limite thermodynamique, qui permet à la fois de traiter statistiquement des ensembles infinis et d'avoir de la régularité sur les variables thermodynamiques. Le cadre grand-canonique qui consiste à fixer le maximum de variables intensives est le plus approprié, tant dans la réalité physique que dans la modélisation mathématique.

Tous les modèles mathématiques sur lesquels nous allons travailler dans la suite, sont ceux pour lesquels on a su mener les calculs assez loin. Ils sont relativement triviaux du point de vue physique mais permettent cependant de mettre en évidence un certain nombre de résultats qualitatifs (transition de phase, décroissance de l'énergie libre).

Bibliographie.

Nino BOCCARA Principes de la thermodynamique classique
P. U. F. Collection "SUP" Le Physicien.

L. LANDAU et E. LIFCHITZ Physique statistique, tome 5 du cours de physique théorique, Editions MIR (MOSCOU)

L'EQUILIBRE THERMODYNAMIQUE DANS LES SYSTEMES INFINIS DE PARTICULES

1-Configurations et états.

Nous nous intéressons à des modèles de mécanique statistique sur un réseau. Ils sont construits de la façon suivante : un ensemble dénombrable S représente l'ensemble des sites du réseau, une configuration est la donnée des configurations de chaque site. Les configurations possibles pour chaque site x forment un ensemble Ω_x de sorte que le système est représenté par $X = \prod_{x \in S} \Omega_x$.

Pour simplifier , nous n'étudions que des modèles où tous les Ω_x sont égaux à un ensemble Ω à deux éléments. Selon l'interprétation qu'on donne d'un tel modèle, on notera Ω de manière différente ; si l'on considère qu'il s'agit d'un réseau de spins, $\Omega = \{-1, +1\}$; si l'on pense à un gaz sur un réseau, $\Omega = \{0, 1\}$.

L'ensemble des configurations du système est donc identifié dans ces modèles à $X = \Omega^S$ qui est muni d'une manière naturelle d'une topologie d'espace compact métrisable.

L'hypothèse statistique conduisant à représenter les états d'un système par des probabilités sur l'ensemble des configurations, un état est ici une probabilité borélienne sur X.

2-Energie

Il n'est pas raisonnable de vouloir définir une fonction sur X représentant l'énergie des configurations d'un système infini. Il est par contre possible de définir l'accroissement d'énergie entre deux configurations ne différant qu'en un nombre fini de points de S .

La donnée de base est alors celle d'un potentiel continu V qui est une famille $\{V_A\}$ de fonctions continues sur X : pour toute partie finie A de S, $V_A(\xi)$ représente l'accroissement d'énergie entre la configuration ξ et la configuration ξ_A obtenue à partir de ξ en renversant tous les spins aux points de A (cette transformation, homéomorphisme de X, est notée τ_A). Il est clair que les fonctions V_A ne sont pas indépendantes mais doivent vérifier les relations de cocycle

$$V_{A\Delta B} = V_A + V_B \circ \tau_A$$

On vérifie qu'un potentiel continu V est entièrement déterminé par la donnée des fonctions $V_{\{x\}} = V_x$ pour tous les points de S, soumises aux relations

$$V_x + V_x \circ \tau_x = 0 \,, \qquad V_x + V_y \circ \tau_x = V_y + V_x \circ \tau_y \quad (x \neq y)$$

<u>Transformation de Fourier sur $\{-1,+1\}^S$.</u> On peut définir sur $X = \{-1,+1\}^S$ d'une manière naturelle un produit qui en fait un groupe abélien compact. On vérifie que les caractères de ce groupe sont les fonctions réelles σ_A pour A fini, produits des fonctions coordonnées σ_x aux points x de A. Ces caractères forment un groupe abélien dénombrable , isomorphe au groupe $\{\mathcal{F}(S),\Delta\}$ des parties finies de S muni de la différence symétrique.

Soit h la mesure de Haar sur X ; on note $\hat{f}(A) = \int f.\sigma_A dh$ les coefficients de Fourier d'une fonction continue f sur X. On écrit alors symboliquement

$$f = \text{"}\sum_{A\in\mathcal{F}(S)} \hat{f}(A).\sigma_A\text{"}$$

Signalons que cette écriture aun sens car on peut vérifier que la fonction continue f est la limite uniforme des sommes partielles particulières des $\hat{f}(A).\sigma_A$ sur toutes les parties A d'une partie finie Λ quand Λ tend vers S (au sens de la convergence simple). (34)

Les relations de cocycle entre les fonctions V_x qui définissent un potentiel continu V permettent de vérifier qu'il existe une famille J(A), $A \neq \emptyset$ de nombres tels que

$$V_x = \sum_{A \ni x}'' -2J(A).\sigma_A ''$$

Heuristiquement parlant, l'énergie aurait pour coefficients de Fourier J(A) pour $A \neq \emptyset$. Remarquons que l'on peut attribuer à $J(\emptyset)$ une valeur quelconque et posons $J(\emptyset) = 0$.

3- Etats de Gibbs.

On cherche des probabilités sur X qui soient l'équivalent de l'ensemble canonique de Gibbs tel qu'il est défini pour un système ayant un nombre fini de configurations possibles. Nous avons intégré le facteur $-\beta$ à la définition de l'énergie de sorte que l'on cherche des probabilités qui pondèrent les configurations proportionnellement à l'exponentielle de l'énergie, ce qui conduit à la définition suivante.

On appelle mesure de Gibbs pour un potentiel continu V, une probabilité sur X, quasi-invariante sous l'action du groupe des modifications finies, ayant pour dérivée le cocycle V. Une telle mesure vérifie pour tout x de S $d(m \circ \tau_x)/dm = \exp V_x$, ce qui s'écrit également

$$\forall x \in S \;\; \forall f \in C(X) \qquad \int f.\exp V_x \, dm = \int f \circ \tau_x \, dm$$

Les théorèmes généraux d'existence des mesures quasi-invariantes montrent que pour tout potentiel continu V, l'ensemble G(V) des probabilités de Gibbs est non vide. ( ) C'est alors un convexe compact pour la topologie faible.

Lorsqu'il y a plusieurs mesures de Gibbs, on convient que cela décrit le phénomène de transition de phase et que les propriétés statistiques des diverses phases sont décrites par les mesures de Gibbs extrémales.

Déterminer pour un potentiel V s'il y a ou non transition de phase est un problème très difficile. On ne sait, par exemple, pas encore résoudre ce problème pour le modèle d'Anderson :

$$X = \{-1, +1\}^{\mathbb{Z}} \quad J(A) = 0 \text{ sauf si } A = \{x, y\} \quad \text{et } J(x, y) = \frac{\beta}{|x-y|^{\cancel{2}}}$$

Voir Dyson (4), (5).

4- Mesures de Gibbs canoniques.

Si l'on interprète les configurations +1 et -1 comme l'absence ou la présence d'une particule au site considéré, on a permis, dans la description précédente au "nombre de particules" de fluctuer. La modélisation de l'ensemble canonique conduit alors à ne définir les fonctions "accroissement d'énergie" que pour des transformations "conservant le nombre de particules".

On considère le groupe des permutations finies, engendré par les transpositions τ_{xy} et on se donne un cocycle pour ce groupe, entièrement déterminé par les fonctions V_{xy} (accroissement d'énergie dans la transposition)

On vérifie l'existence d'une famille $J(A)$ de coefficients tels que :

$$V_{xy} = "\sum \sigma_A (J(A_{xy}) - J(a))" \quad \text{où } A_{xy} = \tau_{xy}(A)$$

On appelle mesures de Gibbs canoniques les probabilités sur X, quasi-invariantes, ayant pour dérivée le cocycle précédent. Des théorèmes généraux assurent leur existence.

5 - Equivalence des ensembles.

Soit V un potentiel continu et $J(A)$ la famille de coefficients associée. Les fonctions

$$V_{xy} = \frac{1-\sigma_x\sigma_y}{2}\,(V_x + V_y \circ \tau_x)$$

sont continues et admettent pour transformée de Fourier :

$$\hat{V}_{xy}(A) = J(A_{xy}) - J(A)$$

On a donc ainsi associé à un potentiel continu un cocycle continu canonique. On appelle potentiel canonique et on note $\overline{V}$ ce cocycle.

L'application précédente est linéaire ; déterminons son noyau. Soit V un potentiel continu tel que $\overline{V}$ soit nul. On voit que $J(A) = J(A_{xy})$ et donc que J ne dépend que du cardinal de A car le groupe des permutations finies de S agit transitivement sur l'ensemble des parties finies de S de cardinal donné. Pour que V soit continu, il est alors nécessaire que $J(A) = 0$ si $|A| > 1$.

Le noyau de l'application $V \longrightarrow \overline{V}$ est donc l'ensemble des multiples du potentiel N défini par $N_x = -2\sigma_x$ auquel est associée la famille :

$$J_N(A) = 0 \quad \text{si } |A| > 1, \quad J_N(x) = 1 \quad \text{pour tout } x.$$

Le problème de l'équivalence des grands ensembles est résolu dans ce cadre par le théorème suivant.

Théorème. Soit $\overline{V}$ un potentiel canonique. Les mesures de Gibbs canoniques extrémales pour $\overline{V}$ sont :

- les mesures de Gibbs extrémales pour tous les potentiels $V + \mu N$
- les masses de Dirac sur les deux configurations constantes $(\mu = \pm\infty)$

La seule condition technique nécessaire à la démonstration est l'existence d'une borne uniforme pour les $\|V_x\|$, $x \in S$.

Voir, par exemple, Georgii (11), Logan (30), Shiga (39), et (33).

6- Invariance.

Les coefficients $J(A)$ qui caractérisent un potentiel continu en mesurant l'interaction entre les divers sites de A ne dépendent habituellement que des distances mutuelles entre ces points. On est donc conduit à des situations où les $J(A)$ sont invariants sous l'action d'un groupe de bijections de S (les isométries) et on s'interesse aux mesures de Gibbs invariantes sous l'action de ce groupe.

Une propriété géométrique utile à l'étude des mesures invariantes est la moyennabilité, que nous définissons ainsi :

Définition. Soit S un ensemble dénombrable et B un groupe de bijections de S. On dit que S est un espace ou réseau B-moyennable, ou que l'action de B sur S est moyennable si :

- le groupe agit transitivement
- pour tout élément a de S, pour toute partie finie F de S, l'ensemble $M(a, F, \varepsilon)$ des parties finies Λ telles que

$$|\Lambda|^{-1}.\left|\{x \in \Lambda, \exists b \in B \ \ b(a) = x \text{ et } b(F) \subset \Lambda\}\right| > 1 - \varepsilon$$

  est non-vide. Les ensembles $M(a, F, \varepsilon)$ forment alors une base d'un filtre sur $\mathcal{F}(S)$, appelé filtre moyennant.

Dans le cas où B est un groupe de translations, cette définition se ramène à celle de groupe moyennable. Néanmoins, elle a l'avantage de ne pas particulariser d'origine dans un problème "affine". Pour des réseaux relativement naturels qui ne sont pas des groupes, cette propriété est vérifiée ; c'est le cas, par exemple, de tous les réseaux usuels où le groupe des isométries est moyennable, comme extension finie du groupe abélien des translations du réseau, et où le groupe d'isotropie de chaque point est fini.

C'est aussi le cas de tout ensemble S pour l'action du groupe B de toutes ses bijections. Les mesures B-invariantes sont alors les mesures échangeables.

Mesures de Gibbs invariantes.

Le potentiel continu V est dit B-invariant, si pour tout $b \in B$ et pour tout $x \in S$

$$V_{b(x)} = V_x \circ b^{-1}$$

ce qui correspond à $J(A) = J(bA)$ pour tout b, pour tout A.

L'ensemble des mesures de Gibbs pour V qui sont de plus B-invariantes, est un convexe compact de $G(V)$. Sous l'hypothèse abstraite de B-moyennabilité, il n'est pas évident qu'il existe toujours des mesures de Gibbs invariantes. Mais, dans les deux cas de moyennabilité cités plus haut, on peut démontrer cette existence. En effet, on vérifie que l'action de B conserve G(V) et si B est moyennable, on peut appliquer un théorème de point fixe. Dans le cas de (S, B) où B est le groupe des bijections de S, on remarque que le sous-groupe B_f des bijections finies a les mêmes mesures invariantes que B et qu'il est moyennable.

7- Entropie des systèmes dynamiques en théorie ergodique.

Soit $(X, \mathcal{A}, m)$ un espace probabilisé et G un groupe dénombrable de transformations bi-mesurables préservant la mesure m.

On appelle entropie de la partition mesurable $A = (A_1, \ldots, A_n)$ le nombre

$$H_m(A) = \Sigma_1^n \eta(m(A_i))$$

où η est la fonction positive, continue, concave sur $[0,1]$ définie par

$$\eta(x) = -x \operatorname{Log} x \quad \text{pour } x \neq 0$$

Soit Λ une partie finie de G ; on pose $A^\Lambda = \bigvee_{k \in \Lambda} k^{-1}(A)$. Pour une partition A fixée, l'application de $\mathcal{F}(S)$ dans $\mathbb{R}^+$, $\Lambda \longrightarrow H_m(A^\Lambda)$ est invariante par les translations à droite et fortement sous-additive :

$$H_m(A^{\Lambda \cup \Lambda'}) + H_m(A^{\Lambda \cap \Lambda'}) \leqslant H_m(A^\Lambda) + H_m(A^{\Lambda'})$$

Si le groupe G est moyennable, $|\Lambda|^{-1} H_m(A^\Lambda)$ admet une limite selon le filtre moyennant $\mathcal{M}_G$, limite qui est égale à la borne inférieure sur toutes les parties finies de cette même expression. Voir (36). Cette limite $h_G(A, m)$ est l'entropie moyenne de la partition A.

Enfin, on appelle entropie du système dynamique $(X, \mathcal{A}, m, G)$ la borne supérieure $h_G(m)$ sur toutes les partitions mesurables finies A de $h_G(A, m)$. Kolmogorov a le premier introduit l'entropie comme invariant des systèmes dynamiques. Le théorème suivant permet dans certains cas le calcul de l'entropie.

Théorème. (Kolmogorov - Sinaï)

Soit A une partition génératrice du système dynamique $(X, \mathcal{a}, m, G)$, c'est-à-dire telle que les tribus $\mathcal{a}$ et $\bigvee_{g \in G} g^{-1}(A)$ coïncident aux ensembles de mesure nulle près. L'entropie $h_G(m)$ du système dynamique est égale à l'entropie moyenne $h_G(A, m)$ de cette partition génératrice A.

La démonstration de ce théorème utilise les étapes suivantes :

- si l'on munit l'ensemble des partitions finies de la distance

$$d(A,B) = 2 H_m(A \vee B) - H_m(A) - H_m(B)$$

l'entropie moyenne est une fonction 1-Lipschitzienne :

$$|h_G(A,m) - h_G(A,m)| \leqslant d(A,B)$$

- pour la distance d, les sous- partitions de $A^\wedge$, où A est génératrice, sont denses
- enfin, l'entropie moyenne croit lorsque l'on rafine une partition et, par moyennabilité, $h_G(A,m) = h_G(A^\wedge, m)$.

8 - Entropie moyenne en mécanique statistique sur un réseau.

Soit $X = \{-1, +1\}^S$ et B un groupe de bijections de S agissant de façon moyennable ; soit m une probabilité sur X et Λ une partie finie de S. On appelle entropie de m dans Λ le nombre

$$H(\Lambda, m) = \sum_{A \subset \Lambda} \eta(m(A, \Lambda))$$

où le cylindre (A, Λ) est l'ouvert-fermé de X défini par les équations

$$\sigma_x = -1 \quad \text{si } x \in A \qquad \sigma_y = +1 \quad \text{si } y \in \Lambda - A$$

La probabilité m étant fixée, $H(\Lambda, m)$ est une fonction B-invariante, fortement sous-additive de la partie finie Λ de S. L'entropie moyenne dans admet donc une limite $h(m)$ selon le filtre B-moyennant de S. Voir (34).

Cette limite est, par définition, l'entropie moyenne par site de la probabilité B-invariante m. Le théorème suivant montre la cohérence de cette définition avec celle de l'entropie des systèmes dynamiques en théorie ergodique.

Théorème.

Soit S un ensemble dénombrable et G un groupe de bijections de S, agissant de façon moyennable ; on suppose de plus que les groupes d'isotropie des points de S, qui sont conjugués, sont finis. On vérifie alors que G est moyennable. Soit $X = \{-1, +1\}^S$ et m une probabilité G-invariante sur X. On peut alors calculer l'entropie du système dynamique $(X, \mathcal{a}, m, G)$, où $\mathcal{a}$ est la complétée pour m de la tribu borélienne de X. On a

$$h_G(m) = n^{-1} . h(m)$$

où n est le cardinal commun des groupes d'isotropie des points.

Démonstration. Soit a un point quelconque de S. On vérifie que les éléments de $\mathcal{F}(G)$ de la forme $F = F(\Lambda)$ sont arbitrairement moyennants, donc que G est moyennable ; $F(\Lambda)$ est défini par

$$F(\Lambda) = \{g \in G, \; g^{-1}(a) \in \Lambda\}$$

La partition $A_a = (\sigma_a = +1, \sigma_a = -1)$ est génératrice pour le système dynamique $(X, \mathcal{A}, m, G)$ et il résulte du théorème de Kolmogorov-Sinaï que

$$h_G(m) = h_G(A_a, m)$$

Or

$$h_G(A_a, m) = \lim_{\mathcal{M}_G} |F|^{-1} . H(A_a^F, m) = \lim_{\mathcal{M}_G} |F|^{-1} . H(F^{-1}(a), m)$$

$$h_G(A_a, m) = \lim_{\mathcal{M}_S} |F(\Lambda)|^{-1} . H(\Lambda, m)$$

Puisque

$$h(m) = \lim_{\mathcal{M}_S} |\Lambda|^{-1} . H(\Lambda, m)$$

et que

$$|F(\Lambda)| = |\Lambda| . |St(a)|$$

on en déduit le résultat

$$h(m) = n . h_G(m)$$

9 - Energie moyenne en mécanique statistique sur un réseau.

Soit V un potentiel continu B-invariant. On appelle énergie dans la partie finie Λ de S la fonction continue U_Λ .

$$U_\Lambda = \sum_{A \subset \Lambda} J(A) . \sigma_A$$

De la même façon que l'on peut définir l'entropie moyenne par site pour une mesure B-invariante, on peut définir l'énergie moyenne par site à l'aide du théorème suivant.

Théorème.

Soit m une probabilité B-invariante sur X ; l'énergie moyenne $|\Lambda|^{-1} m(U_\Lambda)$ admet une limite, notée $e(m)$, selon le filtre B-moyennant de S. Cette limite est égale à la valeur commune des $m(\varphi_x)$, $x \in S$, où la fonction continue φ_x représente la contribution du site x à l'énergie.

$$\varphi_x = {}'' \sum_{A \ni x} \frac{J(A)}{|A|} . \sigma_A {}''$$

Pour une démonstration de ce résultat, voir (34) .

10 - Pression en mécanique statistique sur un réseau.

Avec les notations du paragraphe précédent, on note Z_Λ la fonction de partition

$$Z_\Lambda = \sum_{A \subset \Lambda} \exp U_\Lambda(A)$$

où $U_\Lambda(A)$ est la valeur constante de U_Λ sur le cylindre (A, Λ).

On appelle pression le nombre p , limite supérieure selon le filtre B-moyennant de S de

$$|\Lambda|^{-1} . \operatorname{Log} Z_\Lambda$$

Théorème.

Soit m une probabilité B-invariante sur X. On a

$$e(m) + h(m) \leqslant p$$

Démonstration. Puisque e et h sont des limites selon le filtre moyennant, cette inégalité résulte de l'inégalité au rang fini, pour toute mesure de probabilité

$$H(\Lambda, m) + m(U_\Lambda) \leqslant \operatorname{Log} Z_\Lambda$$

qui est une application immédiate de l'inégalité de Jensen.

Ce théorème constitue la première moitié du principe variationnel en mécanique statistique sur un réseau.

II - Principe variationnel en théorie ergodique.

Soit X un espace compact et G un groupe moyennable dénombrable d'homéomorphismes de X. A toute fonction continue f sur X, on associe un nombre $P(f)$, appelé pression de f.

La fonctionnelle P ainsi définie de $C(X)$ dans $\mathbb{R}$ possède les propriétés suivantes

- c'est une fonction convexe
- $P(0)$ est l'entropie topologique du système (X, G)
- P est 1-Lipschitzienne, c'est-à-dire vérifie

$$\left| P(f_1) - P(f_2) \right| \leqslant \left\| f_1 - f_2 \right\|$$

- si c est une fonction constante, $\quad P(f+c) = P(f) + c$
- pour tout $g \in G$, $\quad P(f_1) = P(f_1 + f_2 \circ g - f_2)$

Voir Walters (42) pour des définitions équivalentes de la pression.

Lorsque le groupe moyennable G est de plus pavable, on peut démontrer pour toute fonction continue f le principe variationnel :

$$P\ (f) = \operatorname{Sup}\ (\, h_G(m) + m(f)\,)$$

où le sup est pris sur l'ensemble des probabilités de Radon G-invariantes sur X.

Voir, pour la démonstration, Miziurewicz (32) et (36).

12 - Principe variationnel en mécanique statistique sur un réseau.

Soit S un ensemble dénombrable, B un groupe de bijections de S, agissant de façon moyennable. Soit $X = \{-1, +1\}^S$ et $V = \{V_x, x \in S\}$ un potentiel continu B-invariant.

Soit m une probabilité sur X et ν une mesure de Gibbs pour le potentiel V, non-nécessairement B-invariante. On s'assure facilement qu'une mesure de Gibbs charge les cylindres, ce qui permet de définir le gain d'information $I_\Lambda(m, \nu)$ de m par rapport à ν dans la partie finie Λ par

$$I_\Lambda(m, \nu) = \sum_{A \subset \Lambda} m(A, \Lambda) \operatorname{Log} \frac{m(A, \Lambda)}{\nu(A, \Lambda)}$$

Voir, sur ce sujet, Föllmer (7) et Preston (38).

Proposition. L'expression $\Delta_\Lambda = |\Lambda|^{-1} \left[\operatorname{Log} Z_\Lambda - m(U_\Lambda) - H(\Lambda, m) - I_\Lambda(m, \nu) \right]$ tend vers 0 selon le filtre B-moyennant.

Démonstration.

$$\Delta_\Lambda = |\Lambda|^{-1} \sum_{A \subset \Lambda} m(A, \Lambda) . \left[- \operatorname{Log} \frac{m(A, \Lambda)}{\nu(A, \Lambda)} + \operatorname{Log} m(A, \Lambda) - \operatorname{Log} \frac{\exp U_\Lambda(A)}{Z_\Lambda} \right]$$

$$\Delta_\Lambda = |\Lambda|^{-1} \sum_{A \subset \Lambda} m(A, \Lambda) . \left[\operatorname{Log} \nu(A, \Lambda) - \operatorname{Log} \frac{\exp U_\Lambda(A)}{Z_\Lambda} \right]$$

$$|\Delta_\Lambda| \leq |\Lambda|^{-1} \sup_{A \subset \Lambda} \left| \operatorname{Log} \nu(A, \Lambda) - \operatorname{Log} \frac{\exp U_\Lambda(A)}{Z_\Lambda} \right|$$

Puisque ν est une mesure de Gibbs

$$\nu(A, \Lambda) = \int d\nu(\xi) \frac{\exp U_\Lambda^\xi(A)}{Z_\Lambda^\xi}$$

où $\exp U_\Lambda^\xi(A) \,/\, Z_\Lambda^\xi$ est une version continue de la probabilité conditionnelle du cylindre (A, Λ) sachant que la configuration est ξ dans $S - \Lambda$.

Cette version continue est liée au cocycle par la relation

$$\frac{\exp U^{\xi}_{\Lambda}(A)}{Z^{\xi}_{\Lambda}} = \frac{1}{\sum_{C\subset\Lambda} \exp V_C(A,\xi)}$$

où (A,ξ) désigne la configuration égale à A dans Λ et à ξ dans $S-\Lambda$.

On a, de même

$$\frac{\exp U_{\Lambda}(A)}{Z_{\Lambda}} = \frac{1}{\sum_{C\subset\Lambda} \exp V^{\Lambda}_C(A)}$$

où V^{Λ}_C est la somme partielle dans Λ de la série de Fourier de V_C.

Il vient alors

$$\left|\Delta_{\Lambda}\right| \leqslant \left|\Lambda\right|^{-1} \operatorname*{Sup}_{A\subset\Lambda} \operatorname*{Sup}_{\xi} \left| \operatorname{Log} \frac{\sum_{C\subset\Lambda} \exp V^{\Lambda}_C(A)}{\sum_{C\subset\Lambda} \exp V_C(A,\xi)} \right|$$

Le rapport des sommes est intermédiaire entre les bornes inférieure et supérieure , pour tout $C\subset\Lambda$, pour tout $A\subset\Lambda$, pour toute configuration ξ dans $S-\Lambda$ du rapport

$$\exp V^{\Lambda}_C(A) \,/\, \exp V_C(A,\xi)$$

D'où

$$\left|\Delta_{\Lambda}\right| \leqslant \left|\Lambda\right|^{-1} \operatorname*{Sup}_{C\subset\Lambda} \operatorname*{Sup}_{\xi\in X} \left| V_C(\xi) - V^{\Lambda}_C(\xi) \right|$$

Utilisant le fait que V^{Λ}_C est une moyenne et les relations de cocycle, il vient

$$\left|\Delta_{\Lambda}\right| \leqslant \left|\Lambda\right|^{-1} \sum_{x\in\Lambda} \operatorname{Sup} \left| V_x(\xi_1) - V_x(\xi_2) \right|$$

où le sup est pris sur les couples d'éléments de X ayant mêmes coordonnées aux points de Λ.

La continuité uniforme des V_x, la B-cohérence et la moyennabilité donnent le résultat.

Si nous appliquons la proposition précédente à une mesure de Gibbs B-invariante μ , en faisant $m = \nu = \mu$, on voit qu'elle satisfait

$$e(\mu) + h(\mu) = p$$

Ceci démontre la seconde moitié du principe variationnel en mécanique statistique

$$\operatorname{Sup}\,(e(m) + h(m)) = p$$

On appelle <u>mesures d'équilibre</u> les probabilités B-invariantes qui satisfont

$$e(m) + h(m) = p$$

Les mesures de Gibbs pour V, B-invariantes, sont des mesures d'équilibre. Le théorème suivant permet de montrer que ce sont les seules et donc, dans le cas de la mécanique statistique sur un réseau, de caractériser les mesures d'équilibre. En appliquant la proposition, on voit en effet qu'une mesure d'équilibre vérifie l'hypothèse du théorème.

<u>Théorème.</u>

Soit m une probabilité B-invariante sur X et ν une mesure de Gibbs B-invariante pour le potentiel V. Si le gain d'information moyen $|\Lambda|^{-1} . I_\Lambda(m, \nu)$ tend vers 0 selon le filtre moyennant, la mesure m est aussi une mesure de Gibbs pour V .

La démonstration résulte des trois lemmes suivants.

<u>Lemme 1 (Principe variationnel local).</u>

Soit m une probabilité sur X et a un point de S. La mesure m est quasi-invariante pour la transformation τ_a, de dérivée V_a si et seulement si

$$m(\operatorname{Log}(1 + \exp V_a)) - H_m(a|S - a) = 0$$

<u>Démonstration.</u> Donnons nous une version m^η de la probabilité conditionnelle par rapport à la tribu des événements ne dépendant pas de a . Il vient

$$m(\operatorname{Log}(1+\exp V_a)) = \int d\bar{m}(\eta).\, m^\eta(\operatorname{Log}(1+\exp V_a))$$

et, de même

$$H_m(a|S-a) = \int d\bar{m}(\eta).\, h(m^\eta)$$

D'où

$$m(\operatorname{Log}(1+\exp V_a)) - H_m(a|S-a) =$$

$$\int d\bar{m}(\eta) \left\{ m^\eta(+) \operatorname{Log}\frac{m^\eta(+)}{\nu^\eta(+)} + m^\eta(-) \operatorname{Log}\frac{m^\eta(-)}{\nu^\eta(-)} \right\}$$

où ν^η est une version continue de l'espérance conditionnelle pour n'importe quelle mesure τ_a, V_a quasi-invariante :

$$\nu^\eta(+) = \frac{1}{1+\exp V_a(\eta,+)} \quad , \quad \nu^\eta(-) = \frac{1}{1+\exp V_a(\eta,-)}$$

On intègre donc une fonction positive ou nulle (gain d'information) . L'intégrale est donc nulle si et seulement si, pour m presque tout η la fonction est nulle, c'est-à-dire si la probabilité m est τ_a, V_a quasi-invariante.

<u>Lemme 2 .</u>

Soit m une probabilité et ν une probabilité τ_a, V_a quasi-invariante chargeant les cylindres. On a

$$m(\operatorname{Log}(1+\exp V_a)) - H_m(a|S-a) = \lim_{\Lambda\to S-a} I_{\Lambda\cup a}(m,\nu) - I_\Lambda(m,\nu)$$

<u>Démonstration.</u>

$$I_{\Lambda\cup a} - I_\Lambda = \sum_{B\subset\Lambda\cup a} m(B,\Lambda\cup a) \operatorname{Log}\frac{\nu(B\cap\Lambda,\Lambda)}{\nu(B,\Lambda\cup a)} - H_m(a|\Lambda)$$

Une propriété classique de l'entropie conditionnelle assure que $H_m(a|\Lambda)$ tend vers $H_m(a|S-a)$. D'autre part, $\operatorname{Log}\nu/\nu$ tend uniformément vers $\operatorname{Log}(1+\exp V_a)$

Soit m une probabilité B-invariante et ν une mesure de Gibbs invariante. $I_\Lambda(m,\nu)$ est une fonction B-invariante, positive, croissante de Λ . Le lemme suivant permet d'appliquer les lemmes 1 et 2 à une mesure m vérifiant l'hypothèse du théorème et de conclure que m est de Gibbs.

Lemme 3.

Soit S un ensemble dénombrable, B un groupe de bijections de S agissant de façon moyennable. Soit f une fonction B-invariante, positive, croissante sur les parties finies non-vides de S telle que $|A|^{-1}. f(A)$ tende vers 0 selon le filtre moyennant de S. On a alors, pour tout élément a de S

$$\liminf_{A \to S-a} f(A \cup a) - f(A) = 0$$

Démonstration.

On pose $f(\emptyset) = 0$, ce qui permet d'écrire, pour toute partie finie A et tout ordre total t sur A

$$f(A) = \sum_{a \in A} f(a \cup a_t^-) - f(a_t^-)$$

où a_t^- désigne le sous-ensemble de A des éléments strictement inférieurs à a pour l'ordre t.

En faisant la moyenne sur les $|A|!$ ordres totaux possibles sur A, il vient

$$f(A) = \sum_{a \in A} \sum_{B \subset A} \frac{|B|!\,|A-B|-1|!}{|A|!} f(a \cup B) - f(B)$$

Posons

$$f_a(A) = \inf_{B \supset A} f(B \cup a) - f(B)$$

nous définissons ainsi une fonction croissante de A que nous prolongeons par monotonie aux parties infinies de S en une fonction croissante borélienne.

A cause de l'invariance par translation et de la moyennabilité, il vient

$$\int d\nu(A)\, f_a(A) = 0$$

où ν est ici la probabilité image par $t \to a_t^-$ de la probabilité π sur le compact des ordres totaux sur S. Voir (34).

Puisque la masse de chaque cylindre (A, A) est non-nulle et que f_a est croissante

$$\forall A \in \mathcal{F}(S) \quad \inf_{B \supset A} f(B \cup a) - f(B) = 0$$

D'où

$$\liminf_{A \to S-a} f(A \cup a) - f(A) = 0$$

13 - Mécanique statistique et processus markoviens.

On recherche un modèle évolutif décrivant la tendance à l'équilibre. Correspondant à la situation d'un réseau de spins et d'un potentiel continu, un modèle usuel d'évolution est le processus de " spin-flip "

Soit $X = \{-1, +1\}^S$ et c_x, $x \in S$, une famille de fonctions continues sur X. L'opérateur Ω est défini sur les fonctions cylindriques par

$$f \in \mathcal{F}(X) \longrightarrow \Omega(f) = \sum_x c_x \cdot (f \circ \tau_x - f)$$

Sous des conditions assez générales telles que celles de Liggett, la clôture de l'opérateur dissipatif à domaine dense Ω est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe fortement continu de contractions positives de $C(X)$.

On souhaite, au moins, que les mesures de Gibbs pour V soient stationnaires pour ce processus, ce qui conduit aux relations suffisantes :

$$\forall \mu \in G(V)\,,\ \forall f \in C(X),\quad \mu(c_x \cdot (f \circ \tau_x - f)) = 0$$

Or, par quasi-invariance

$$\mu(c_x \cdot f \circ \tau_x) = \mu(c_x \circ \tau_x \cdot f \cdot \exp V_x)$$

D'où la relation entre les fonctions c_x et le potentiel continu V :

$$\forall x \in S, \quad \exp V_x = c_x / c_x \circ \tau_x$$

et, dans ce cas, le semi-groupe est appelé processus de spin-flip.

Dans le cas général, les mesures de Gibbs pour V sont les seules mesures stationnaires pour le processus de spin-flip correspondant qui soient de plus réversibles, c'est-à-dire satisfassent

$$\forall f \in \mathcal{D}(\overline{\Omega})\,,\ \forall g \in \mathcal{D}(\overline{\Omega})\,,\quad \mu(f \cdot \overline{\Omega}(g)) = \mu(g \cdot \overline{\Omega}(f))$$

Voir Ledrappier (44).

Le problème de s'affranchir de l'hypothèse de réversibilité n'est pas encore résolu dans le cas général. Il n'y a que deux réponses partielles.

-(1)- Si S est un réseau B-moyennable, et c_x une famille B-cohérente, le processus conserve l'ensemble des probabilités B-invariantes. On peut alors montrer que les seules mesures stationnaires B-invariantes sont les mesures de Gibbs B-invariantes.

La méthode de démonstration consiste à établir que l'énergie libre moyenne par site est une fonction décroissante du temps. Ce résultat est la traduction du second principe de la thermodynamique dans le cas canonique. Ceci renforce la validité du processus de spin-flip comme modèle évolutif.

Voir Holley (15), Higuchi et Shiga (13), et (35).

-(2)- Si $S = \mathbb{Z}$ ou $\mathbb{Z}^2$, et si les c_x sont uniformément à portée finie, Holley et Stroock ont établi que les seules mesures stationnaires sont les mesures de Gibbs.

Leur méthode consiste à écrire que l'énergie libre dans une partie finie pour une mesure stationnaire est constante et à obtenir une majoration du terme principal de la dérivée par des termes frontières.

Un résultat astucieux sur les suites leur permet de conclure, pour $\mathbb{Z}$ et $\mathbb{Z}^2$ à la nullité du terme principal, résultat équivalent au fait que la mesure est de Gibbs.

Voir pour les détails, leur article (22).

14 - Traitement du spin-flip en perturbations, l^1 - théorie.

On suppose ici que les fonctions continues c_x appartiennent à la sous-algèbre des fonctions dont la série de Fourier est sommable. Cette algèbre, notée $A(X)$ est une algèbre de Banach pour la norme $\| \|_1$.

On montre, dans ce paragraphe, que la même condition sur les séries de Fourier permet le traitement de Ω en perturbations de $\Omega_\circ$, donc la démonstration de l'existence du semi-groupe, et l'établissement d'un théorème ergodique. Cette condition est d'autre part la plus générale connue assurant la non-transition de phases.

$$\exists \alpha < 1 \quad \forall x \in S \quad \sum_{A \neq \emptyset} \left| \hat{c}_x(A) \right| \leqslant \alpha \,.\, \hat{c}_x(\emptyset)$$

Potentiel nul, opérateur $\Omega_\circ$

Considérons l'opérateur $\Omega_\circ$ associé au potentiel nul :

$$f \in \mathcal{F}(X) \longrightarrow \Omega_\circ(f) = \sum_x (f \circ \tau_x - f)$$

Cet opérateur $\Omega_\circ$ est "diagonalisé" par les σ_A

$$\Omega_\circ(\sigma_A) = -2|A|.\sigma_A$$

On pose alors

$$S_t(\sigma_A) = \exp(-2|A|.t).\sigma_A$$

On vérifie que S_t s'étend en une contraction positive de $C(X)$; c'est, en effet, un opérateur de convolution avec la mesure de probabilité γ_t définie par

$$\gamma_t(\sigma_A) = \exp(-2|A|.t)$$

γ_t est la probabilité échangeable

$$\gamma_t = \bigotimes_{x \in S} \left(\frac{1 - \exp(-2t)}{2}, \frac{1 + \exp(-2t)}{2} \right)$$

Théorème ergodique pour le semi-groupe S_t°.

Proposition. La seule forme linéaire sur $\mathcal{F}(X)$, telle que $m(1) = 1$, stationnaire pour S_t° est la mesure de Haar du groupe compact $(1/2, 1/2)^S$.

Démonstration. Soit Λ une partie finie de S. Calculons la dérivée

$$\frac{d}{dt} \sum_{A \subset \Lambda} (m(A, \Lambda))^2$$

Cette dérivée est égale à

$$- \sum_{x \in \Lambda} \sum_{A \subset \Lambda} (m(A, \Lambda) - m(A_x, \Lambda))^2$$

et cette expression n'est nulle que si tous les cylindres dans Λ ont même masse.

Traitement en perturbations, existence du semi-groupe.

Considérons l'opérateur Ω

$$f \in \mathcal{F}(X) \longrightarrow \Omega(f) = \sum_x c_x . (f \circ \tau_x - f)$$

où les fonctions continues c_x satisfont les conditions

$$\forall x \in S \quad \hat{c}_x(\emptyset) = 1$$

$$\forall x \in S \quad \sum_{A \neq \emptyset} |\hat{c}_x(A)| \leqslant \alpha$$

pour une constante α stictement inférieure à 1.

Il vient

$$\Omega(f) = \Omega_\circ(f) + \sum_x \sum_{A \neq \emptyset} \hat{c}_x(A).\, \sigma_A . (f \circ \tau_x - f)$$

$$\Omega(f) = \Omega_\circ(f) + \sum_{A \neq \emptyset} \sum_B \sigma_A . \sigma_B . \sum_{x \in B} -2\, \hat{c}_x(A) . \hat{f}(B)$$

Or $g = \Omega_\circ(f)$ a pour transformée de Fourier

$$\hat{g}(B) = -2|B| . \hat{f}(B)$$

d'où $\Omega = (I + K).\Omega_\circ$

où K est défini par

$$K(\sigma_B) = \sigma_B \cdot \sum_{A \neq \emptyset} \sigma_A \sum_{x \in B} \frac{\hat{c}_x(A)}{|B|}$$

et K est une contraction de $A(X), \| \|_1$ de norme inférieure ou égale à α.

Ω étant dissipatif, c'est le générateur infinitésimal d'un semi-groupe de contractions positives de $C(X)$ si, pour λ assez petit $I - \lambda\Omega$ est d'image dense dans $C(X), \| \|$ d'après le théorème de Hille-Yoshida. Voir, par exemple, Liggett (29) ou Yoshida (43) page 248.

Le résultat étant vrai pour $\Omega_\circ$, et $A(X)$ dense dans $C(X)$ en norme uniforme, nous montrons que $I - \lambda\Omega = I - \lambda(I + K)\Omega_\circ$ est d'image dense dans $A(X), \| \|_1$.
Le calcul donne

$$I - \lambda(I + K)\Omega_\circ = (I - \lambda K \Omega_\circ R_\lambda^\circ)(I - \lambda\Omega_\circ)$$

où R_λ° est la résolvante, inverse de $I - \lambda\Omega_\circ$.
Pour conclure, montrons que $I - \lambda K \Omega_\circ R_\lambda^\circ$ est inversible de $A(X)$ dans $A(X)$ en établissant que $-\lambda K \Omega_\circ R_\lambda^\circ$ est une contraction de $A(X)$.
En effet

$$R_\lambda^\circ(\sigma_A) = \frac{1}{1 + 2\lambda|A|} \sigma_A$$

d'où

$$-\lambda K \Omega_\circ R_\lambda^\circ(\sigma_A) = K\left(\frac{2\lambda|A|}{1 + 2\lambda|A|} \sigma_A\right)$$

et cet opérateur est de norme inférieure ou égale à α, ce qui achève la démonstration.

Théorème ergodique.

Sous la condition précédente, il y a unicité de la mesure stationnaire pour le processus de spin-flip.

En effet, une mesure de probabilité est stationnaire pour le processus de spin-flip ainsi défini si $m.(I+K).\Omega_\circ = 0$, c'est-à-dire si $(I+K)^*(m) = h$ d'après la proposition. Puisque $\|K\| \leqslant \alpha$, il y a unicité de la solution.

Remarque. Equations de Kirkwood-Salsburg.

Si les fonctions V_x définissant le potentiel continu V appartiennent toutes à l'algèbre $A(X)$, on peut choisir $c_x = 1 + \mathrm{th}\, V_x/2$. On appelle équations de Kirkwood-Salsburg le système

$$(I + K^*)(m) = h$$

et $\|K^*\| = \|K\| \leqslant \sup_x \|\mathrm{th}\, V_x/2\|_1$

Ces équations assurent donc qu'il n'y a pas transition de phase si

$$\sup_x \|\mathrm{th}\, V_x/2\|_1 < 1$$

Voir, par exemple (45).

Comme $\|\mathrm{th}\, V_x/2\|_1 \leqslant \mathrm{tg}(\|V_x/2\|_1)$, on en déduit la condition suffisante de non-transition de phase

$$\sup_x \|V_x\|_1 < \pi/2$$

Bibliographie

(1) H. J. BRASCAMPS The Kirkwood-Salsburg equations : solutions and spectral properties. C. M. P. 40 p 235-243 (1975)

(2) J. P. CONZE Entropie d'un groupe abélien de transformations Z. W. 25 11-30 (1972)

(3) R. L. DOBRUSHIN The problem of uniqueness of a Gibbsian random field and the problem of phase transition. Funct. Anal. & Appl. 2 302-312 (1968)

(4) F. J. DYSON Existence of a phase-transition in a one-dimensional Ising ferromagnet. C. M. P. 12 , 91-107 , (1969)

(5) F. J. DYSON Non-existence of spontaneous magnetization in a one-dimensional Ising ferromagnet. C. M. P. 12 , 212-215 , (1969)

(6) F. J. DYSON An Ising ferromagnet with discontinuous long-range order. C. M. P. 21 , 269-283 , (1971)

(7) H. FÖLLMER On entropy and information gain in random fields. Z. W. 26 , 207-217 , (1973)

(8) H. FÖLLMER and J. L. SNELL An "inner" variational principle for Markov fields on a graph. Z. W. 39 , 187-195 , (1977)

(9) G. GALLAVOTTI Instabilities and phase transitions in the Ising model. A review. Rivista del nuovo cimento vol. 2 , n°2 , 133-169 , (1972)

(10) H. O. GEORGII Stochastische Felder und ihre Anwendung auf Interaktionssysteme. Lectures notes , Institut für Angewandte Mathematik der Universität Heidelberg. (1974)

(11) H. O. GEORGII Canonical Gibbs states, their relation to Gibbs states, and applications to two-valued Markov chains. Z. W. 32 , 277-300 , (1975)

(12) H. O. GEORGII On canonical Gibbs states and symmetric and tail events. Z. W. 33 , 331-341 , (1976)

(13) Y. HIGUCHI and T. SHIGA Some results on Markov processes of infinite lattice spin systems. Jour. of Maths of Kyoto Univ. Vol. 15, n°1, 211-229 , (1975)

(14) R. HOLLEY Pressure and Helmholtz free energy in a dynamical model of a lattice gas. Proceedings of the VIth Berkeley symposium on probability.

(15) R. HOLLEY Free energy in a Markovian model of a lattice spin system. C. M. P. 23, 87-99, (1971)

(16) R. HOLLEY An ergodic theorem for interacting systems with attractive interaction. Z. W. 24, 325-334, (1972)

(17) R. HOLLEY A class of interactions in an infinite particle system. Advances in Maths 5, 291-309, (1974)

(18) R. HOLLEY Recent results in the stochastic Ising model. Rocky Mountains Journal of Maths 4, 3, 479-495, (1975)

(19) R. A. HOLLEY and D. W. STOOCK Applications of the stochastic Ising model to Gibbs states. C. M. P. 48, 249-265, (1976)

(20) R. A. HOLLEY and D. W. STOOCK L_2-theory for the stochastic Ising model. Z. W. 35, 87-101, (1976)

(21) R. A. HOLLEY and D. W. STOOCK A martingale approach to infinite systems of interacting processes. Annals of Proba. Vol. 4, n°2, 195-228, (1976)

(22) R. A. HOLLEY and D. W. STOOCK In one and two dimensions, every stationnary measure for a stochastic Ising model is a Gibbs state. C. M. P. 55, (1977)

(23) J. C. KIEFFER A generalized Shannon Mc Millan theorem for the action of an amenable group on a probability space. Ann. Prob. Vol. 4n°6, 1031-1037, (1975)

(24) F. LEDRAPPIER Mesures d'équilibre sur un réseau. C. M. P. 33, 119-128, (1973)

(25) F. LEDRAPPIER Principe variationnel et systèmes dynamiques symboliques. Z. W. 30, 185-202, (1974)

(26) F. LEDRAPPIER Un exemple de transition de phase. Monatshefte für Mathematik 83, 147-153, (1977)

(27) F. LEDRAPPIER and P. WALTERS A relativised variational principle Preprint Warwick 1977

(28) T. M. LIGGETT A characterization of the invariant measures for an infinite particle system with interactions.
(I) T. A. M. S. 179, 433-453 (II) T. A. M. S. 198, 201-213

(29) T. M. LIGGETT Existence theorems for infinite particle systems. T. A. M. S. 165, 471-481, (1972)

(30) K. G. LOGAN Time reversible evolution in statistical mechanics. Ph. D. CornellUniversity (1974)

(31) A. MARTIN-LOF Mixing properties, differentiability of the free energy and the central limit theorem for a pure phase in the Ising model at low temperature. C. M. P. 32 , 75- , (1973)

(32) M. MISIUREWICZ A short proof of the variational principle for a Z_+^n-action on a compact space. Actes du Congrès de Rennes 1975, Astérisques n°40.

(33) J. MOULIN OLLAGNIER et D. PINCHON Mesures de Gibbs et mesures de Gibbs canoniques. Séminaire sur les processus markoviens, X , (1976)

(34) J. MOULIN OLLAGNIER et D. PINCHON Fonctions thermodynamiques locales en méca. stat. Séminaire sur les processus markoviens, X , (1976)

(35) J. MOULIN OLLAGNIER et D. PINCHON Free energy in spin-flip processes is non-increasing. C. M. P. 55 , 29-35 , (1977)

(36) J. MOULIN OLLAGNIER et D. PINCHON Groupes pavables et principe variationnel. A paraître dans Z. W. (1977)

(37) C. J. PRESTON Gibbs states on countable sets. Cambridge University Press n°68

(38) C. J. PRESTON Random fields. Lectures Notes in Maths n° 534

(39) T. SHIGA Some problems related to Gibbs states, canonical Gibbs states and Markovian time evolution. Z. W. 39 , 339-352 , (1977)

(40) F. SPITZER Interactions of Markov processes. Adv. in Maths 5, 246-290 , (1970)

(41) F. SPITZER Random processes defined through the interaction of an infinite particle system. Lectures Notes in Maths n° 89

(42) P. WALTERS A variational principle for the pressure of continuous transformations. American Journal of Maths 97 , 937-971 , (1975)

(43) K. YOSHIDA Functional analysis.

(44) F. LEDRAPPIER Séminaire sur les processus markoviens , X , (1975)

(45) J. MOULIN OLLAGNIER et D. PINCHON Note on non-standard phase transition in classical lattice spin systems. (non publié)