HAL open science

Vorticité dans des systèmes de spins à symétrie continue

Hicham El-Bouanani

▶ To cite this version:

Hicham El-Bouanani. Vorticité dans des systèmes de spins à symétrie continue. Mathématiques [math]. Université du Sud Toulon Var, 2008. Français. NNT : . tel-00381684v2

HAL Id: tel-00381684

https://theses.hal.science/tel-00381684v2

Submitted on 16 May 2009

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DU SUD TOULON-VAR
Centre de Physique Théorique

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de :

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ DU SUD TOULON-VAR

Spécialité : Mathématiques Appliquées

par

Hicham EL BOUANANI

sous la direction de : Michel ROULEUX

Titre :

Vorticité dans des systèmes de spins à symétrie continue

soutenue publiquement le 17 octobre 2008

JURY

Pierre COLLET	CNRS, Ecole Polytechnique	Rapporteur
Alain MESSAGER	CNRS, Luminy	Examinateur
Pierre PICCO	CNRS, LATP CMI	Examinateur
Claude-Alain PILLET	Université du Sud Toulon-Var	Président de Jury
Michel ROULEUX	Université du Sud Toulon-Var	Directeur de thèse
Valentin ZAGREBNOV	Université Aix-Marseille II	Rapporteur

Vorticité dans des systèmes de spins à symétrie continue

Hicham EL BOUANANI

à la mémoire de mes grands-parents

Remerciements

Je tiens en premier lieu, à adresser mes vifs et sincères remerciements à mon directeur de thèse Michel ROULEUX, qui a été disponible tout au long de cette thèse, et qui a su me faire profiter de ses expériences et qualités scientifiques. Je lui dois mes premiers pas dans le monde de la recherche ; ses encouragements et sa confiance ont été très favorables à l'aboutissement de ce travail. Je lui exprime ma profonde reconnaissance et mon admiration.

Je remercie chaleureusement Pierre COLLET et Valentin ZAGREBNOV qui m'ont fait l'honneur de rapporter sur ma thèse, et m'ont encouragé par leurs précieuses remarques. Je remercie Claude-Alain PILLET et Alain MESSAGER pour avoir accepté de faire partie de mon jury.

Je remercie tous les membres du Centre de Physique Théorique de Marseille qui m'ont accueilli parmi eux ; spécialement Pierre PICCO pour ses conseils et ses explications sur le modèle de Kac, Alain MESSAGER pour des discussions très enrichissantes sur le cas quantique, ainsi que Yvon VIGNAUD pour des discussions sur le recuit simulé. Je remercie également les membres du Département de Mathématiques de l'Université du Sud Toulon-Var avec lesquels j'ai eu l'occasion de goûter aux joies de l'enseignement. Un grand merci à Jean-Michel COMBES pour son accueil et sa disponibilité et à Pierre SEPPECHER pour ses conseils sur la partie numérique. Je remercie aussi l'ensemble du personnel administratif, et spécialement Corinne et Vincent.

Je remercie mes camarades thésards et étudiants (Benjamin, Renaud ...), et tous mes amis pour leurs encouragements.

J'exprime ma gratitude à tous les gens qui ont cru en moi et m'ont facilité la vie :
Mr A.IRAQUI-TANTAOUI et Mr A.ELAMRANI pour leur soutien, Mme A.M.BOUCHER pour sa compréhension, ma famille et en particulier mes parents, pour leur soutien, leurs encouragements, leur confiance, et leur dévouement depuis le tout début de ma scolarité.

Je remercie surtout Sara, ma chère épouse qui me supporte aux moments les plus difficiles. Elle a été pour moi un soutien permanent, je lui souhaite beaucoup de chance pour sa thèse.

Enfin je remercie Dieu pour tout.

Table des matières

Introduction **1**

1 Rappels : interaction entre plus proches voisins et modèle du champ moyen. **7**

1.1 Le modèle XY à 2 dimensions avec interaction entre plus proches voisins. Modèle de Villain. 7

1.1.1 Comportement à haute température. 8

1.1.2 Comportement à basse température, modèle Gaussien ou "ondes de spin". 10

1.1.3 Modèle de Villain, fonction de partition. 12

1.1.4 Modèle de Villain, corrélations. 14

1.1.5 La transition de phase de second ordre. 16

1.2 Le modèle du champ moyen. 18

2 Interaction avec un environnement. Le modèle de Kac à symétrie continue. **20**

2.1 Quelques définitions. 21

2.2 Estimations d'entropie. 24

2.3 Estimations d'énergie libre. 30

2.4 Estimations sur la mesure de Gibbs canonique. 31

3 Vortex et magnétisation dans le modèle de Kac **34**

4 Vorticité quantique à l'équilibre pour le modèle XY. **65**

4.1 Matrices de vorticité. 67

4.2 Holonomie sur le groupe de Lie $\mathrm{SL}(2;\mathbb{R})$. 70

4.3 Simulations numériques 73
4.3.1 Le spectre de H. 74
4.3.2 Champ des directions principales de la matrice de vorticité. 76
4.3.3 Calcul du degré. 78
4.3.4 Passage au cas antiferromagnétique. 82

Références **83**

Liste des tableaux

4.1 *Valeurs de* I_k, $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5), d = 1$ 80
4.2 *Valeurs de* $(I_k - J_k)/2$, $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5), d = 1$ 81
4.3 *Valeurs de* $(I_k - J_k)/2$, $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5), d = 2$ 81

Table des figures

4.1 *Spectre de H,* $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5)$ 74

4.2 *Spectre de H,* $(L, \ell, n, m) = (37, 25, 6, 6)$ 75

4.3 *Directions principales des matrices de vorticité,* $(L, \ell, m, n) = (31, 21, 5, 5), (d, \beta) = (1, 5)$ 76

4.4 *Directions principales des matrices de vorticité,* $(L, \ell, m, n) = (31, 21, 5, 5), (d, \beta) = (2, 5)$ 77

4.5 *Une configuration d'équilibre pour le modèle XY avec potentiel de Kac,* $d = 2$. . 78

4.6 *Directions principales des matrices de vorticité,* $(L, \ell, m, n) = (37, 25, 6, 6), (d, \beta) = (2, 21)$ 79

Introduction

Dans cette Thèse on étudie des systèmes de spins sur le réseau $\mathbb{Z}^d = \Lambda \cup \Lambda^c$, où Λ est une "boîte" de taille finie. La limite thermodynamique, dans laquelle se traduisent les propriétés physiques du système, consiste à faire tendre $|\Lambda|$ vers l'infini. Si l'on ne s'intéresse pas aux conditions limite, il peut être commode de remplacer Λ par un tore en identifiant les côtés opposés, car alors $\Lambda^c = \emptyset$.

Contrairement aux modèles discrets, comme le modèle d'Ising, ou le modèle de Potts, où le spin ne prend qu'un nombre fini de valeurs, on considère ici des systèmes à symétrie continue. L'espace des configurations $\mathcal{X}(\mathbb{Z}^d) = (\mathbf{S}^{q-1})^{\mathbb{Z}^d}$ est l'ensemble de tous les états de spin ; son groupe de symétries interne est donc le groupe des rotations $O^+(q)$, avec $q = 2$ pour le rotateur plan ou modèle XY, $q = 3$ pour le modèle d'Heisenberg.

Dans le cas le plus simple d'une interaction entre plus proches voisins, le système est régi par un hamiltonien du type

$$H_\Lambda(\sigma) = -\frac{J}{2} \sum_{\langle i,j \rangle \subset \Lambda} \langle \sigma(i), \sigma(j) \rangle \tag{1}$$

Ici $J = \pm 1$ dans des unités convenables, est une constante de couplage, $J = 1$ pour un système ferromagnétique, où les spins tendent à s'aligner pour minimiser l'énergie, et $J = -1$ pour un système antiferromagnétique où les spins optent au contraire pour une configuration antiparallèle.

On est amené à considérer aussi des interactions à longue portée. Un cas important est celui du modèle de Kac, associé au hamiltonien

$$H_\Lambda(\sigma|\sigma^c) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} J_\gamma(i-j) \langle \sigma(i), \sigma(j) \rangle - \sum_{(i,j) \in \Lambda \times \Lambda^c} J_\gamma(i-j) \langle \sigma(i), \sigma(j) \rangle \tag{2}$$

Ici $J_\gamma \geq 0$ désigne une fonction à support compact, de la forme $J_\gamma(i) = \gamma^d J(\gamma i)$, J normalisée d'intégrale 1, et $\gamma > 0$ un petit paramètre. La configuration $\sigma^c = \sigma|_{\Lambda^c}$ est donnée sur Λ^c.

Un des principaux objets de la Physique Statistique classique est la mesure de Gibbs en volume fini à température inverse β, de densité

$$\mu_{\Lambda,\beta}(\sigma|\sigma^c) = \frac{1}{Z(\Lambda,\beta)} \exp\big[-\beta H_\Lambda(\sigma|\sigma^c)\big] \tag{3}$$

Le facteur de normalisation $Z(\Lambda,\beta)$ s'appelle "fonction de partition".

Par compacité, il existe des points limite

$$\lim_{|\Lambda|\to\infty} \mu_{\Lambda,\beta}(\sigma|\sigma^c) \tag{4}$$

qui sont des mesures de probabilité sur $\mathcal{X}(\mathbb{Z}^d)$ (états ou distributions limite de Gibbs). Si l'on compare avec des modèles purement "cinématiques" comme ceux des marches aléatoires, ou chaînes de Markov, et aussi les modèles gaussiens, pour lesquels la distribution de probabilité conjointe du processus est limite (projective) de lois de variables indépendantes et identiquement distribuées, la difficulté tient ici au fait des interactions décrites par le hamiltonien. Notons que le hamiltonien sur tout $\mathbb{Z}^d$ n'est pas bien défini en général, mais seulement en volume fini. L'existence de la limite dans (4) , comme probabilité conditionnelle, est garantie toutefois par la cohérence des conditions limites $\sigma^c = \sigma|_{\Lambda^c}$ (équations DLR).

On se pose généralement les questions suivantes relatives à la limite thermodynamique :

1. Quelles sont les configurations d'énergie minimale (état fondamental) du hamiltonien $H(\sigma_\Lambda|\sigma_{\Lambda^c})$, $|\Lambda| \to \infty$?
2. Quelle est la structure des distributions limite de Gibbs ?
3. Quelle est la nature des transitions de phase ?

La question de la stabilité de l'état fondamental (infiniment dégénéré, à cause de la symétrie interne) est plus délicate que dans le cas discret $q = 1$ [Sin,p.74]. Nous ne l'aborderons pas directement, et étudierons plutôt la densité de la mesure de Gibbs dont le support, dans la limite $\beta \to \infty$, se concentre sur les configurations d'énergie minimale.

Les distributions limite de Gibbs forment en général un ensemble compact dépendant de la température inverse β. La coexistence de plusieurs états de Gibbs pour une température critique est appelée "transition de phase". Un exemple de transition de phase dans la théorie cinétique des gaz est celui de l'"équilibre liquide-vapeur" (notons que le modèle de Kac, dans une forme convenablement adaptée de (2), a servi initialement à étudier les transitions de phase dans la théorie de Van der Waals, correspondant à la limite de Lebowitz-Penrose $|\Lambda| \to \infty$, puis $\gamma \to 0$.) Au voisinage d'une température critique, les quantités thermodynamiques (énergie libre, pression, ...) varient de façon discontinue. Pour les systèmes de spins, les transitions de phase correspondent à une "aimantation spontanée", quand le système se divise en une ou plusieurs régions où tous les spins pointent dans la même direction (comme dans un aimant), séparées par des "interfaces". Il en est ainsi des modèles de spins discrets, par exemple du modèle d'Ising.

Dans le cas de modèles de spins à symétrie continue en 2-D, on sait [DoSh] que toute distribution limite de Gibbs est elle-même invariante par rotations, quel que soit $\beta > 0$. On dit alors qu'il n'y a pas de brisure de la symétrie continue. De plus pour une large classe de hamiltoniens, et en particulier pour les exemples (1) et (2), l'état de Gibbs est unique [BrFoLa], [MeMiPf]. Il n'y a donc pas de transition de phase au sens ci-dessus, appelées aussi "transition de phase de première espèce". Ceci n'est plus vrai cependant pour $d \geq 3$, pour des raisons liées à la "rigidité de l'interface".

Pour le modèle d'interaction entre plus proches voisins il y a par contre des transitions de phase dites de deuxième ordre : en effet, il existe une température inverse β_c telle que les fonctions de corrélations sont à décroissance exponentielle pour $\beta < \beta_c$, et polynômiale pour $\beta > \beta_c$. Ces transitions de phase ont été interprétées par Berezinskii [Be] puis Kosterlitz et Thouless [KoTh], en termes de "vortex" dans l'état de Gibbs (pour $q = 3$, il s'agit plutôt d'"instantons").

Nous allons maintenant présenter les quatre parties de cette Thèse, où l'on tente de répondre à ces quelques questions.

Chapître 1. Rappels : interaction entre plus proches voisins et modèle du champ moyen.

Nous décrivons ici, sans souci de rigueur mais en choisissant plutôt une démarche intuitive, les transitions de phase à la Kosterlitz-Thouless pour les modèles d'interaction entre plus proches voisins régis par (1). L'étude de la mesure de Gibbs pour ce système conduit naturellement au modèle de Villain qui donne une bonne description du système à basse température, montrant notamment comment on peut factoriser la fonction de partition en produit de deux termes, l'un correspondant à un modèle gaussien, l'autre à celui d'un gaz de Coulomb, ou modèle de vortex.

On rappelle aussi les principaux résultats (rigoureux) [McBSp], [FrSp] sur les bornes supérieures et inférieures de l'asymptotique des fonctions de corrélation, liée aux transitions de phase à la Kosterlitz-Thouless.

On étudie enfin les propriétés du modèle du champ moyen, ingrédient essentiel du modèle de Kac, pour lequel chaque site interagit au contraire avec tous les autres de façon uniforme.

Chapître 2. Modèle de Kac : renormalisation.

On se consacre ici à la preuve un peu technique d'un résultat énoncé dans le Chapître 3 (Proposition 1.1). Il s'agit en effet de renormaliser le hamiltonien pour l'étudier sur une plus grande échelle en intégrant le désordre (ou entropie) du système. On obtient ainsi un modèle qui tient compte à la fois du champ moyen et de la diffusion due aux interactions de portée finie.

Nous remplaçons la limite de Lebowitz-Penrose $|\Lambda| \to \infty$, puis $\gamma \to 0$ par le compromis : diam $\Lambda = L = L_0\gamma^{-1}$, $\gamma \to 0$.

On effectue une transformation de bloc-spins $\pi^{(n_\gamma)}\sigma$, qui est la moyenne empirique des spins sur des cellules $C^{(n_\gamma)(x)}$ de diamètre $\approx \gamma^{-1/2}$, centrées en $x \in \mathbb{Z}^d = \Lambda^* \cup \Lambda^{*c}$ (réseau "gros-grain")

$$m(x) = \pi^{(n_\gamma)}\sigma = \frac{1}{|C^{(n_\gamma)}(x)|}\int_{C^{(n_\gamma)}(x)} dr\sigma(r) \quad \text{(magnétisation)}$$

$m|_{\Lambda^*} \in \mathcal{X}(\Lambda^*) = (\mathbf{S}^{q-1})^{\Lambda^*}$ a encore la symétrie continue (variable vectorielle, ou complexe), et σ s'interprète comme une fonction en escalier.

On prend ensuite l'image de $\mu_{\Lambda,\beta}(\sigma|\sigma^c)$ par la transformation de bloc-spins : on obtient ainsi une mesure sur $\mathcal{X}(\Lambda^*)$ avec pour dérivée de Radon-Nykodym :

$$\frac{dM^{\Lambda^*}_{\beta,\gamma}}{dm}(m) = \frac{1}{Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma)}\int_{\mathcal{X}(\Lambda)} \exp\big[-\beta\gamma^{-d}H_\gamma(\sigma_\gamma|\sigma^c_\gamma)\big]\prod_{i\in\Lambda}\nu\big(d\sigma_\Lambda(i)\big)\delta(\pi^{(n_\gamma)}\sigma - m)$$

Définissons alors l'énergie libre, ou "fonctionnelle de Kac", renormalisée dans Λ à température inverse β par :

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_\beta(m|m^c) = &\frac{1}{4}\int_{\widetilde{\Lambda}^*} dr \int_{\widetilde{\Lambda}^*} dr' J(r-r')|m(r)-m(r')|^2 \\ &+ \frac{1}{2}\int_{\widetilde{\Lambda}^*} dr \int_{\widetilde{\Lambda}^{*c}} dr' J(r-r')|m(r)-m(r')|^2 \\ &+ \int_{\widetilde{\Lambda}^*} dr\big(f_\beta(m(r)) - f_\beta(m_\beta)\big)\end{aligned} \tag{5}$$

où $f_\beta(m) = -\frac{1}{2}|m|^2 + \frac{1}{\beta}I(m)$ désigne la (densité d')énergie libre pour le champ moyen, et $I(m) = \widehat{I}(|m|)$ la (densité d')entropie pour le champ moyen, $m_\beta \in]0,1[$ son point critique. Ici $\widetilde{\Lambda}^*$ est un volume de taille fixe. On a le résultat suivant (cf. Théorème 2.6 pour un énoncé précis)

Théorème 1 : Au sens de l'approximation logarithmique $\log \frac{dM^{\Lambda^*}_{\beta,\gamma}(m)}{dm}(m) \approx -\beta\gamma^{-d}\mathcal{F}_\beta(m|m^c)$ (pour des magnétisations $|m(x)| < 1$ sur tout le réseau Λ^*).

Chapître 3. Vortex et magnétisation dans le modèle de Kac.

La renormalisation précédente ne fait pas d'hypothèse sur la nature des conditions limite. Ici on étudie plus particulièrement des configurations d'énergie libre minimale dans le cas d'une condition limite favorisant l'émergence de vortex. Cette partie est développée dans l'article [El-BoRo] (Magnetization and vortices in Kac's model. J. Stat. Physics. Vol.28, No.3, p.741-770, 2007).

On applique ici des méthodes variationnelles : ainsi qu'en Mécanique classique (les extrema de l'intégrale d'action sont solution du système), et en Mécanique Quantique (représen tation des fonctions d'ondes par des intégrales de Feynman-Kac, etc...) les extrema de (5) (appelés "paramètres d'ordre") sont censés bien décrire le "support essentiel" de l'état de Gibbs.

Une caractéristique de (5) est d'être une fonctionnelle non convexe, on cherchera donc ses extrema par la méthode de Lyapunov, en s'inspirant de [Pr] dans le cadre des modèles de spins discrets. L'équation d'Euler-Lagrange de la forme

$$-J * m + \frac{1}{\beta}\widehat{I}'(|m|)\frac{m}{|m|} = 0 \tag{6}$$

présente une certaine analogie avec l'équation de Ginzburg-Landau

$$-\Delta u + \frac{1}{\epsilon^2}(1 - |u|^2)u = 0 \tag{7}$$

à la différence près qu'il s'agit d'une équation non locale. Notre principal résultat, résumant les Propositions 3.4 et 3.5 de [El-BoRo] peut s'énoncer ainsi :

Théorème 2 : $d = 2$. En volume fini, il existe toujours des minima locaux pour $\mathcal{F}(m|m^c)$, vérifiant $|m| < 1$. Si $\beta \leq 2$, $m \equiv 0$.

Par des simulations numériques, nous montrons alors qu'une condition de vorticité sur le bord (degré topologique $n \in \mathbb{Z}$) induit une configuration de vortex sur le paramètre d'ordre à l'intérieur du réseau, avec conservation du degré. Les résultats sont tout-à-fait concordants avec ceux qu'on obtient dans le cadre de l'équation de Ginzburg-Landau (7).

Enfin, nous étendons ces considérations au cas du modèle d'Heisenberg, pour un modèle d'ondes de spins inspiré de celui Belavin et Polyakov.

Chapître 4. Modèle quantique XY avec interaction entre plus proches voisins.

On termine cette Thèse par le cas quantique en essayant de répondre à la question : Que faut-il entendre par *vorticité quantique* ? On considère à nouveau le hamiltonien (1) où les σ désignent les matrices de Pauli, et on complète le réseau Λ par un environnement $\partial\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ ("bord" de Λ dans $\mathbb{Z}^2$, constitué d'une ou plusieurs enceintes) sur lequel les matrices de Pauli du Hamiltonien sont "compressées" dans les directions $(\theta_j)_{j\in\partial\Lambda}$: $\sigma_i(\theta_i) = \Pi_{\theta_i}\sigma_i\Pi_{\theta_i}$.

La mesure de la variable "direction du spin" sur un site extérieur est déterministe (son signe étant une variable libre), ce qui rend compte de l'aspect classique de l'environnement.

L'analogue quantique en dimension finie de l'état de Gibbs à température inverse β est donné par la forme linéaire (état KMS) sur "l'algèbre des observables locales" $\mathcal{O} = \mathcal{L}((\mathbb{C}^2)^{\otimes N})$,

avec $N = |\Lambda \cup \partial\Lambda|$ par

$$\omega_\beta : \mathcal{O} \to \mathbb{C}, \quad \omega_\beta(A) = \frac{\operatorname{Tr} e^{-\beta H} A}{\operatorname{Tr} e^{-\beta H}}$$

On va définir les matrices de vorticité comme décomposition de ω_β sur l'algèbre duale des "fonctions à un point" $o \subset \mathcal{O}$ sur Λ, dont une base "élémentaire" est la base δ :

$$\delta_{11} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta_{21} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta_{22} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

pour $1 \leq j, k \leq 2$, et $1 \leq i \leq N$. On considère la matrice $2N \times 2N$: $A^i_{jk} = 0 \otimes \cdots 0 \otimes \delta_{jk} \otimes 0 \cdots \otimes 0$. ($N$ facteurs), et la matrice $4N \times 4N$: $\widetilde{A}^i_{jk} = \Delta(A^i_{jk})$ (où Δ désigne le coproduit).

Définition 3 : On appelle *matrice de vorticité* au site i, relative à la base δ, et à température inverse β, la matrice :

$$\Omega^i_\beta(\delta) = \begin{pmatrix} \omega_\beta(\widetilde{A}^i_{11}) & \omega_\beta(\widetilde{A}^i_{12}) \\ \omega_\beta(\widetilde{A}^i_{21}) & \omega_\beta(\widetilde{A}^i_{22}) \end{pmatrix}$$

La matrice $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\delta) = \Omega^i_\beta(\delta) - \frac{1}{2}\operatorname{Tr}\big(\Omega^i_\beta(\delta)\big)\operatorname{Id} \in \mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$ est appelée *matrice de vorticité réduite* au site i.

On s'intéresse alors à l'holonomie des matrices de vorticité réduites comme éléments du groupe de Lie $\mathrm{SL}(2;\mathbb{R})$. Soit en effet $\rho \in \Lambda^1(\mathbb{R}^2; \mathrm{sl}(2;\mathbb{R}))$ la 1-forme définie par

$$\rho(x) = \frac{1}{2}(M^{-1}(x)dM(x) - dM(x)M^{-1}(x))$$

Sous certaines conditions (en particulier si M est symétrique), ρ vérifie l'équation de structure

$$d\rho + [\rho, \rho] = 0$$

Le lemme de Poincaré lui associe une primitive locale, i.e. une application

$$f \in C^1(D; \mathrm{SL}(2;\mathbb{R}))$$

dont ρ est la différentielle de Darboux ("logarithme" de ρ). Sous l'hypothese naturelle de l'existence d'une "limite continue", on applique ceci à $M(x) = \widetilde{\Omega}^x_\beta(\delta)$.

Les simulations numériques permettent alors de répondre à la question posée avec une bonne précision. La structure des vortex est tout-à-fait comparable à celle obtenue dans le cas classique.

Chapitre 1

Rappels : interaction entre plus proches voisins et modèle du champ moyen.

Dans ce Chapitre on traite du cas d'une interaction sans condition limite (ou environnement). Le réseau Λ considéré est donc un sous-ensemble ("boîte") de $\mathbb{Z}^d$ de grandes dimensions, ou encore, ce qui permet de simplifier certains calculs, le tore $(\mathbb{Z}/L\mathbb{Z})^d$ pour lequel l'interaction est invariante par translations ; on ne justifiera pas les passages $|\Lambda| \to \infty$. On se propose de calculer les fonctions de corrélation pour certains modèles on mettant en évidence leur structure simultanée d'ondes de spin et de vortex, et de déterminer les transitions de phase de seconde espèce.

1.1 Le modèle XY à 2 dimensions avec interaction entre plus proches voisins. Modèle de Villain.

Ici $d = 2$. On commence par rappeler, tels qu'ils sont résumés dans le livre de C.Itzykson & J.M.Drouffe [ItDr], les résultats classiques sur le modèle XY et le modèle de Villain en 2-D, dus essentiellement à J.José, L.Kadanov, S.Kirkpatrick & D.Nelson [JoKaKiNe], formalisés par B.Simon [Si, Sect III], et expliquant les transitions de phase à la Kosterlitz-Thouless. Le modèle de Villain décrit de façon satisfaisante les transitions de phase de second espèce, et en particulier le rôle des vortex ainsi que des "ondes de spin".

A cause de la symétrie interne de $\mathcal{X}(\mathbb{Z}^2)$, la distribution de probabilité ν pour les états de spin est définie comme la mesure de surface normalisée sur $\mathbf{S}^{q-1}$, i.e. $\nu(d\sigma_i) = \omega_q^{-1}\delta(|\sigma_i|-1)d\sigma_i$, ou ω_q est le volume de $\mathbf{S}^{q-1}$. Rappelons que $q = 2$ dans le modèle XY, et donc si θ_i désigne l'angle polaire du vecteur σ_i, cette mesure de surface est simplement $\nu(d\sigma_i) = \frac{d\theta_i}{2\pi}$. Le réseau Λ est un tore qui contient N sites et $2N$ liens. La limite thermodynamique consiste donc à

faire tendre N vers l'infini. Le hamiltonien s'écrit

$$H = -\sum_{\langle i,j\rangle} \langle \sigma(i), \sigma(j)\rangle = -\sum_{\langle i,j\rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \tag{1.1}$$

(rappelons que $\langle .,. \rangle$ désigne les plus proches voisins $\|i-j\|_1 = 1$; on notera par $\|\cdot\|_p$ la norme ℓ^p, et si Λ est un tore, $\|j\|_p$ désigne $\inf_{\widetilde{j}\in\pi_\Lambda^{-1}(j)} \|\widetilde{j}\|_p$, où $\pi_\Lambda : \mathbb{Z}^2 \to \Lambda$ est la projection naturelle.) La fonction de partition s'obtient en sommant la densité de la mesure de Gibbs $e^{-\beta H}$ sur toutes les configurations possibles, i.e.

$$Z(\beta) = \int_{\Omega_0} \prod_{i\in\Lambda} \frac{d\theta_i}{2\pi} \exp\big[\beta \sum_{\langle i,j\rangle} \cos(\theta_i - \theta_j)\big], \quad \Omega_0 = \big(\mathbf{S}^1\big)^\Lambda \tag{1.2}$$

Le travail principal consiste à évaluer de telles intégrales, et étudier leur convergence quand $|\Lambda| \to \infty$. A cause du couplage entre les différents sites, on ne peut qu'étudier leur asymptotique à haute, resp. basse température ($\beta \to 0$, resp. $\beta \to \infty$) de façon à mettre en évidence le comportement désordonné, resp. ordonné du système. Pour les développements à basse température, on utilisera ici les renormalisations et passages à la limite $|\Lambda| \to \infty$ généralement admis dans la littérature, renvoyant à [FrSp] pour un traitement rigoureux mais moins intuitif.

1.1.1 Comportement à haute température.

On rappelle que Λ est un tore, et on pose $N = |\Lambda|$.

A haute température, l'invariance par rotations, donc la périodicité en θ, joue un rôle prépondérant, et l'on développe en série de Fourier

$$e^{\beta\cos\theta} = I_0(\beta)\big(1 + \sum_{n\neq 0} t_n(\beta) e^{in\theta}\big)$$

Les coefficients s'expriment en termes de fonctions de Bessel modifiées

$$t_n(\beta) = t_{-n}(\beta) = \frac{I_n(\beta)}{I_0(\beta)} \in [0,1]$$

On a donc

$$\frac{Z(\beta)}{I_0^{2N}(\beta)} = \int_{\Omega_0} \prod_{\ell\in\Lambda} \frac{d\theta_\ell}{2\pi} \prod_{\langle i,j\rangle} \big(1 + \sum_{n_{ij}\neq 0} t_{n_{ij}}(\beta) e^{in_{ij}(\theta_i - \theta_j)}\big) \tag{1.3}$$

soit après intégration

$$\frac{Z(\beta)}{I_0^{2N}(\beta)} = \sum_{n_{ij};(\partial n)_i = 0} \prod_{\langle i,j\rangle} t_{n_{ij}}(\beta) = 1 + \sum_{n_{ij}\neq 0;(\partial n)_i=0} \prod_{\langle i,j\rangle} t_{n_{ij}}(\beta) \tag{1.4}$$

où l'on somme sur tous les entiers relatifs $n_{ij} = -n_{ji}$ indexés par le lien $\langle i,j\rangle$, avec $t_0 = 1$ et $(\partial n)_i = \sum_j n_{ij} = 0$ (somme sur la "plaquette" de centre i) ; cette condition dite de "divergence nulle" traduit le fait que $\int_0^{2\pi} e^{in\theta}\frac{d\theta}{2\pi} = \delta_{n,0}$.

Comme $t_n(\beta) \sim \frac{\beta^n}{2^n n!}$ quand $\beta \to 0$, (1.4) permet d'obtenir un développement de $Z(\beta)$ à haute température. A l'ordre 0 en β, on retrouve $Z(\beta) = 1$ puisque $I_0(0) = 1$ et $I_n(0) = 0$, $n \neq 0$. Un tel développement s'applique encore au calcul des corrélations, i.e. lorsqu'on introduit le facteur $e^{i(\theta_{x_1}-\theta_{x_2})}$ dans l'intégrale (1.2), entre deux sites x_1 et x_2. On trouve ainsi

$$\langle e^{i(\theta_{x_1}-\theta_{x_2})}\rangle = \frac{\sum\limits_{n_{ij};(\partial n)_i=\delta_{i,x_1}-\delta_{i,x_2}} \prod\limits_{\langle i,j\rangle} t_{n_{ij}}(\beta)}{\sum\limits_{n_{ij};(\partial n)_i=0} \prod\limits_{\langle i,j\rangle} t_{n_{ij}}(\beta)} \tag{1.5}$$

et, comme le développement est convergent près de 0, le terme dominant quand $\beta \to 0$ dans (1.5) correspond à $N(x_1,x_2)t_1(\beta)^{\|x_1-x_2\|_1}$, où $\|x_1-x_2\|_1$ est la distance minimale sur le réseau entre les points x_1 et x_2, et $N(x_1,x_2)$ le nombre de chemins reliant x_1 et x_2 réalisant cette distance. On interprète $N(x_1,x_2)$ comme un terme d'entropie et $t_1(\beta)^{\|x_1-x_2\|_1}$ comme un terme d'énergie. Calculons donc $N(x_1,x_2)$. Pour n entier strictement positif, $p \geq 0$, désignons par

$$E_{p,n} = \{(\alpha_1,\cdots,\alpha_n) \in \mathbb{N}^n, \sum_{j=1}^n \alpha_j = p\}$$

Il est facile de voir que $|E_{p,n}| = \binom{p+n-1}{n-1}$. Un chemin de longueur minimale joignant (0,0) à (n,m), avec $n \geq m$ est de la forme :

$$C_{n,m} = \{\big((i_0,j_0),\cdots,(i_n,j_n)\big)\colon\ (i_0,j_0) = 0, i_1 = \alpha_1,\cdots,i_n = \alpha_1+\cdots+\alpha_n = n,$$
$$j_1 = \beta_1,\cdots,j_n = \beta_1+\cdots+\beta_n = m\}$$

L'ensemble de tels chemins est en bijection sur $E_{n,n} \times E_{m,n}$, et donc de cardinal $\binom{2n-1}{n-1} \times \binom{m+n-1}{n-1}$. On a donc $N(x_1,x_2) = N(0,x_2-x_1) = |E_{n,n} \times E_{n,m}|$ avec $x_2-x_1 = (n,m)$. A $n+m$ donné, ce nombre est maximal lorsque $n = m$. De façon approchée, lorsque $r = \|x_1-x_2\|_1 \to \infty$ la formule de Stirling donne

$$\langle e^{i(\theta_{x_1}-\theta_{x_2})}\rangle \leq e^{r\log 2\beta} \tag{1.6}$$

Ainsi les corrélations décroissent exponentiellement en $-r\log\frac{1}{2\beta}$, à l'ordre le plus bas en β. On démontre que ces approximations sont justifiées par le fait que la série définissant (1.5) a un rayon de convergence non nul autour de $\beta = 0$, et qu'on peut prendre la limite $|\Lambda| \to \infty$. On a donc :

Proposition 1.1 : Pour tout $\beta > 0$ assez petit, les corrélations $\langle\sigma_{x_1}\sigma_{x_2}\rangle$ tendent exponentiellement vite vers 0 comme en (1.6) (dans la limite thermodynamique $|\Lambda| \to \infty$) quand $r = \|x_1-x_2\|_1 \to \infty$.

1.1.2 Comportement à basse température, modèle Gaussien ou "ondes de spin".

Considérons maintenant le développement à basse température. Comme on s'attend à ce que s'établisse un certain ordre, au moins sur de courtes distances, et que les angles varient peu, il devient naturel de substituer à $\cos(\theta_i - \theta_j)$ son développement au voisinage de $\theta_i - \theta_j = 0$, même si l'on perd ainsi la symétrie interne par rotations. On remplace alors le modèle par une approximation dite "d'ondes de spin" . La fonction de partition est celle d'un modèle gaussien

$$Z_{\mathrm{spw}}(\beta) = \int_{\Omega_0} \prod_{i\in\Lambda} \frac{d\theta_i}{(2\pi)^2} \exp\big[-\frac{\beta}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}(\theta_i - \theta_j)^2\big] \tag{1.7}$$

expression dans laquelle on a omis un facteur inessentiel, en remplaçant $\cos(\theta_i - \theta_j)$ par $\cos(\theta_i - \theta_j) - 1$. Le calcul repose sur le résultat suivant :

Lemme 1.2 : L'opérateur sur $\ell^2(\Lambda)$, dans la limite $\Lambda \to \infty$ défini au sens des formes par $\langle \theta, A\theta\rangle = \sum_{\langle i,j\rangle}(\theta_i - \theta_j)^2$ est un opérateur positif de convolution (moins laplacien discret) dont le noyau est donné par

$$A(x) = \int_{[0,2\pi]^2} \frac{dq}{(2\pi)^2} e^{i\langle q,x\rangle}\big(4 - 2(\cos q_1 + \cos q_2)\big) \tag{1.8}$$

L'inverse de A (ou "propagateur") a pour noyau de convolution

$$G(x) = \int_{[0,2\pi]^2} \frac{dq}{(2\pi)^2} e^{i\langle q,x\rangle}\big(4 - 2(\cos q_1 + \cos q_2)\big)^{-1} \tag{1.9}$$

La formule (1.8) résulte simplement de la définition d'une interaction entre plus proches voisins en dimension 2 ; une preuve probabiliste de (1.9) utilisant les marches aléatoires est donnée dans [ItDr]. On remarque que $A(x)$ et $G(x)$ sont positifs, mais l'intégrale définissant $G(x)$ est divergente (divergence infra-rouge logarithmique), ce qui requiert une régularisation de la forme $\widetilde{G}(x) = 2\pi(G(x) - G(0))$, soit

$$\widetilde{G}(x) = \int_{[0,2\pi]^2} \frac{dq}{2\pi} \frac{\cos\langle q,x\rangle - 1}{\big(4 - 2(\cos q_1 + \cos q_2)\big)}$$

Comme on n'a fait que retrancher une constante (infinie) à $G(x)$, la fonction de Green soustraite $\widetilde{G}(x)$ est toujours le noyau du propagateur, mais n'est plus nécessairement positive, comme le montre le cas $d = 1$ où $\widetilde{G}(x) = -2\pi|x|$. Ceci pose un problème pour le calcul de

certaines intégrales gaussiennes, nous ferons néanmoins comme si elles étaient parfaitement définies (cf. [Si,p.330] pour plus de détails.) On a consigné les propriétés les plus utiles de la fonction $\widetilde{G}$ dans le Lemme suivant, pour la démonstration duquel on renvoie à [ItDr,p.195], ou [Si,p.332] :

Lemme 1.3 : La fonction de Green régularisée (ou soustraite) $\widetilde{G}(x) = 2\pi(G(x) - G(0))$ vérifie $\widetilde{G}(0) = 0, \widetilde{G}(1) = -\pi/2$, et

$$\widetilde{G}(x) = -\log(|x|/r_0) + \mathcal{O}(|x|^{-1}),\ r_0 = 2^{-3/2}e^{-\gamma} \approx e^{-\pi/2}$$

lorsque $|x| \to \infty$, γ étant la constante d'Euler.

Rappelons aussi la formule des intégrales gaussiennes, valable pour une matrice symétrique A de partie réelle positive, et J un vecteur de $\mathbb{R}^N$:

$$\int_{\mathbb{R}^N} dX \exp\big[-\frac{1}{2}{}^tXAX + {}^tJX\big] = \big(\det \frac{A}{2\pi}\big)^{-1/2} \exp\big[\frac{1}{2}{}^tJA^{-1}J\big] \tag{1.10}$$

ainsi que la formule de sommation de Poisson

$$\sum_{p\in\mathbb{Z}^N} g(p) = \sum_{q\in\mathbb{Z}^N} \int_{\mathbb{R}^N} d\varphi g(\varphi) e^{2i\pi q\varphi} \tag{1.11}$$

valable si g décroit suffisamment vite à l'infini.

Revenons maintenant au calcul des corrélations $\langle\sigma_{x_1}\sigma_{x_2}\rangle_{\mathrm{spw}} = \langle\exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})]\rangle_{\mathrm{spw}}$ pour le modèle d'ondes de spin. Comme en (1.7) on a

$$\langle\exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})]\rangle_{\mathrm{spw}} = \frac{1}{Z_{\mathrm{spw}}(\beta)} \int_{\Omega_0} \prod_{\ell\in\Lambda} \frac{d\theta_\ell}{2\pi} \exp\big[-\frac{1}{2}\beta\langle\theta, A\theta\rangle + i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})\big] \tag{1.12}$$

Négligeant toutefois le fait que l'on doive remplacer $G(x)$ par la fonction de Green soustraite $\widetilde{G}(x)$, (1.7) et (1.10) donnent

$$\langle\exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})]\rangle_{\mathrm{spw}} = \exp\big[\frac{1}{2\pi\beta}\widetilde{G}(x_1 - x_2)\big] \tag{1.13}$$

et par le Lemme 1.3 :

$$\langle\exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})]\rangle_{\mathrm{spw}} \sim (r_0/\|x_1 - x_2\|_1)^{1/2\pi\beta},\ \|x_1 - x_2\|_1 \to \infty \tag{1.14}$$

On n'obtient en fait rigoureusement de cette façon qu'une majoration [McBrSp,Si], la minoration correspondante est donnée dans [FrSp] (cf. Sect.1.1.5) pour les résultats précis.)

On voit qu'à basse température, l'approximation des ondes de spins prédit une décroissance des corrélations en loi de puissance ; toutefois les corrélations tendent vers 0, ce qui montre qu'il n'y a pas d'aimantation spontanée.

1.1.3 Modèle de Villain, fonction de partition.

Le défaut du modèle gaussien est de ne pouvoir prédire l'existence de vortex, puisqu'il néglige la symétrie interne par rotations. Une meilleure approximation à basse température est fournie par le modèle de Villain [Vi], pour lequel nous allons factoriser la fonction de partition (et la fonction de corrélation) sous la forme de deux termes, l'un relatif au modèle gaussien ci-dessus, l'autre à un modèle d'interaction de type électrostatique entre molécules d'un gaz.

Le modèle de Villain consiste à remplacer dans le développement de $Z(\beta)$ en série de Fourier les coefficients t_n par leur asymptotique $t_n \sim \exp(-n^2/2\beta)$ à β grand. Bien sûr, cette propriété n'est valide que pour n^2 petit devant β, et ne sert qu'à motiver l'introduction du modèle. Le résultat est de substituer au poids $e^{\beta\cos\theta}$ la fonction

$$z_\beta(\theta) = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \exp\big[-\frac{n^2}{2\beta} + in\theta\big] = \sqrt{2\pi\beta}\sum_{n\in\mathbb{Z}} \exp\big[-\frac{\beta}{2}(\theta - 2\pi n)^2\big]$$

(la 2 :ième égalité résultant de (1.11).) La fonction de partition du modèle de Villain est donc

$$Z_V(\beta) = \int_{\Omega_0} \prod_{\ell\in\Lambda} \frac{d\theta_\ell}{2\pi} \prod_{\langle i,j\rangle} z_\beta(\theta_i - \theta_j)$$

Après intégration sur les angles comme dans (1.4) on trouve

$$Z_V(\beta) = \sum_{n_{ij};(\partial n)_i=0} \exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{\langle i,j\rangle} n_{ij}^2\big] \tag{1.15}$$

avec $n_{ij} = -n_{ji} \in \mathbb{Z}$. On commence par discuter les conditions $(\partial n)_i = 0$ et $(\partial n)_i = \delta_{i,x_1} - \delta_{i,x_2}$ déjà rencontrées dans (1.4) et (1.5).

Comme i et j désignent des plus proches voisins, on peut encore écrire $j = i+\mu$, avec $\mu = e_1 = (1,0)$ ou $\mu = e_2 = (0,1)$, puis regrouper les entiers n_{ij} par paires $n_\mu(i) = (n_1(i), n_2(i))$, si bien que $\sum_{\langle i,j\rangle} n_{ij}^2 = \sum_{i,\mu} n_\mu(i)^2$, avec $\sum_{i,\mu} n_\mu(i)^2 = \sum_i n_1(i)^2 + n_2(i)^2 + n_1(i-e_1)^2 + n_2(i-e_2)^2$. Par ailleurs l'équation $(\partial n)_i = \sum_j n_{ij} = 0$ peut se mettre sous la forme

$$\big(n_1(i) - n_1(i-e_1)\big) + \big(n_2(i) - n_2(i-e_2)\big) = 0$$

($n_\mu(i)$ est à "divergence nulle") et cette relation est vérifiée ssi $n_1(i) = p(i) - p(i-e_2) = \partial_2 p(i)$, $n_2(i) = -p(i) + p(i-e_1) = -\partial_1 p(i)$ avec $p(i) \in \mathbb{Z}$, ce qu'on note par $n_\mu(i) = \partial_\mu p(i)$ (donc $n_\mu(i)$ s'écrit comme un "champ hamiltonien".)

Pour généraliser cette équation, il est commode d'introduire, selon [JoKaKiNe] et de manière plus systématique, le réseau dual de Λ : au lien $\langle i,j\rangle$, $i,j\in\Lambda$, on associe les plaquettes adjacentes, de centres respectifs a et b, qu'on définit de façon univoque en choisissant une orientation sur Λ. Le réseau dual Λ^* est l'ensemble des centres a (c'est donc aussi l'ensemble des liens sur Λ, cf. [Si,p157] pour la notion importante de "contour" d'une configuration.) Maintenant si l'on pose $n_{ij}=m_a-m_b$, $m_a,m_b\in\mathbb{Z}$, on vérifie que $(\partial n)_i=0$, ainsi que $n_{ij}=-n_{ji}$.

Considérons maintenant l'équation avec un terme source $\delta_{i,x_1}-\delta_{i,x_2}$. Dans une expression comme (1.5) ou (1.15) on est conduit à sommer sur tous les chemins joignant x_1 à x_2, puis à garder ceux qui donnent la plus grande contribution (en d'autres termes, ceux qui minimisent une certaine action.) Soit donc $C\subset\Lambda$ un tel chemin orienté, désignons par η_{ab} l'indice d'intersection qui vaut 0 si C ne coupe pas le lien $\langle a,b\rangle$ (en d'autres termes, C ne passe pas par i et j), et ±1 dans le cas contraire (i.e. le signe de l'angle orienté entre C et (a,b).) Dans ces conditions, si l'on pose $n_{ij}=m_a-m_b+\eta_{ab}$, $m_a,m_b\in\mathbb{Z}$, on vérifie que $(\partial n)_i=\delta_{i,x_1}-\delta_{i,x_2}$, ainsi que $n_{ij}=-n_{ji}$.

Revenons à (1.15) qu'on peut donc récrire, avec la première méthode (à une constante près) sous la forme

$$Z_V(\beta)=\sum_{p\in\mathbb{Z}}\exp\big[-\frac{1}{\beta}\sum_{i\in\Lambda,\mu\in\{e_1,e_2\}}(\partial_\mu p(i))^2\big]$$

(voir aussi [Si,p.169].) Utilisons maintenant la formule de sommation de Poisson avec : $g(\varphi)=\exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{i,\mu}(\partial_\mu\varphi(i))^2\big]$ on trouve donc

$$Z_V(\beta)=\int_{\Omega_0}\prod_{i\in\Lambda}d\varphi_i\sum_{p(i)\in\mathbb{Z}}\exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{i,\mu}(\partial_\mu\varphi(i))^2+2i\pi\sum_i p(i)\varphi(i)\big]\tag{1.16}$$

ou $p(i)$, rappelons-le, est un champ scalaire à valeurs entières. Il est maintenant possible d'intégrer sur $\varphi(i)$ le membre de droite en utilisant (1.10), avec

$$\langle\varphi,A\varphi\rangle=\frac{1}{2\beta}\sum_{i,\mu}(\partial_\mu\varphi(i))^2$$

où l'on considère φ comme un vecteur de $\mathbb{R}^N$, et J le vecteur de composantes $2i\pi p(i)$. On reconnaît dans $\sum_{i,\mu}(\partial_\mu\varphi(i))^2$ l'expression $\sum_{\langle i,j\rangle}(\varphi_i-\varphi_j)^2$ déjà rencontrée dans (1.7), si bien que (1.11) permet d'écrire

$$Z_V(\beta)=\big(\det\frac{A}{2\pi}\big)^{-1/2}\sum_{p(i)\in\mathbb{Z}}\exp\big[-2\pi\beta\sum_{i,i'}p(i)\widetilde{G}(i-i')p(i')\big]\tag{1.17}$$

où $\widetilde{G}$ est la fonction de Green soustraite définie plus haut, que l'on a substituée au propagateur $G(i)$ du Lemme 1.2. Par ailleurs $\big(\det \frac{A}{2\pi}\big)^{-1/2}$ est analogue à la fonction de patrition $Z_{\rm spw}(\beta)$ calculée en (1.13) pour le modèle gaussien, où l'on aurait changé d'échelle en posant (formellement) $\varphi = \beta\theta$.

Notons $Z'(\beta) = \sum_{p(i)\in\mathbb{Z}}{}' \exp\big[-2\pi\beta \sum_{i,i'} p(i)\widetilde{G}(i-i')p(i')\big]$ le second facteur dans (1.17), où $\sum_{p(i)\in\mathbb{Z}}{}'$ indique que l'on doit sommer uniquement sur les configurations de vorticité totale nulle : $\sum_{i\in\Lambda} p(i) = 0$ (condition dite de "neutralité"), les autres ne contribuant pas à la somme dans la limite $|\Lambda| \to \infty$. On a donc

$$Z_V(\beta) = Z_{\rm spw}(\beta) Z'(\beta) \tag{1.18}$$

On va maintenant identifier $Z'(\beta)$ à la fonction de partition d'un certain modèle de vortex, dit coulombien (voir aussi [Si,p.166].). Pour cela on utilise le développement asymptotique du Lemme 1.3 qui s'avère valide avec une précision excellente même pour de petites valeurs entières $|x| \geq 1$. Ecrivons donc $\widetilde{G}(i-i') = -\frac{\pi}{2} - \log|i-i'| + \mathcal{O}(|i-i'|^{-1})$ pour $i \neq i'$, tandis que $\widetilde{G}(i-i') = 0$ pour $i = i'$. La condition de neutralité entraîne que $\sum_{i\neq i'} p(i)p(i') = -\sum_i p(i)^2$ et donc

$$Z_V(\beta) \approx Z_{\rm spw}(\beta) \sum_{p(i)\in\mathbb{Z}}{}' \exp\big[-2\pi\beta \sum_{i,i'} p(i)p(i') \log|i-i'| - \pi^2\beta \sum_i p(i)^2\big] \tag{1.19}$$

ce qui montre qu'au facteur $Z_{\rm spw}(\beta)$ près la fonction de partition s'identifie à celle d'un gaz de particules chargées en interaction coulombienne, globalement neutre. Chaque particule est affectée d'une charge $p(i) \in \mathbb{Z}$ et les sites i du réseau s'interprètent comme des vortex. La situation est alors comparable à celle des équations de Ginzburg-Landau [BetBrHe], [Co], [OvSi],....

1.1.4 Modèle de Villain, corrélations.

On peut aussi selon les mêmes lignes calculer les corrélations entre deux spins pour le modèle de Villain. Comme dans (1.5) on écrit

$$\langle \exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})]\rangle_V = \frac{\displaystyle\sum_{n_{ij};(\partial n)_i = \delta_{i,x_1} - \delta_{i,x_2}} \exp\big[-\frac{1}{2\beta} n_{ij}^2\big]}{\displaystyle\sum_{n_{ij};(\partial n)_i = 0} \exp\big[-\frac{1}{2\beta} n_{ij}^2\big]} \tag{1.20}$$

et l'on procède de la façon dont on a obtenu (1.17). Soit $\widetilde{Z}_V(x_1,x_2,\beta)$ le numérateur de (1.20). Substituant $n_{ij}=m_a-m_b+\eta_{ab}$ comme plus haut, on exprime $\widetilde{Z}_V(x_1,x_2,\beta)$ au moyen du réseau dual et on utilise (1.11) ce qui donne

$$\widetilde{Z}_V(x_1,x_2,\beta)=\sum_{q_a}\int_{\Omega_0^*}\prod_{a\in\Lambda^*}d\varphi_a\exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{\langle a,b\rangle}(\varphi_a-\varphi_b+\eta_{ab})^2+2i\pi\sum_a q_a\varphi_a\big]$$

puis développant le carré

$$\begin{aligned}\widetilde{Z}_V(x_1,x_2,\beta)&=\exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{\langle a,b\rangle}(\eta_{ab})^2\big]\\ &\times\sum_{q_a}\int_{\Omega_0^*}\prod_{a\in\Lambda^*}d\varphi_a\exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{\langle a,b\rangle}(\varphi_a-\varphi_b)^2-\frac{1}{\beta}\sum_{\langle a,b\rangle}\eta_{ab}(\varphi_a-\varphi_b)+2i\pi\sum_a q_a\varphi_a\big]\end{aligned}$$

On reconnaît encore une intégrale gaussienne de la forme (1.16) où le terme linéaire en φ est : $-\frac{1}{\beta}\sum_{\langle a,b\rangle}\eta_{ab}(\varphi_a-\varphi_b)+2i\pi\sum_a q_a\varphi_a$. Elle se calcule au moyen de (1.11) et (1.8). On trouve aisément

$$\widetilde{Z}_V(x_1,x_2,\beta)=Z_{\rm spw}(\beta)\exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{\langle a,b\rangle}(\eta_{ab})^2\big]\sum_{q_a}\exp\big[-2\pi\beta\sum_{a,b}(q_a+q'_a)\widetilde{G}(x_a-x_b)(q_b+q'_b)\big] \tag{1.21}$$

où l'on a posé $q'_a=-(2i\pi\beta)^{-1}\eta_a$, $\eta_a=\sum_b\eta_{a,b}$, et on remplace de nouveau $\big(\det\frac{A}{2\pi}\big)^{-1/2}$ par $Z_{\rm spw}(\beta)$. Pour déterminer $\langle\exp[i(\theta_{x_1}-\theta_{x_2})]\rangle_V$ il faut encore diviser (1.21) par $Z_V(\beta)$. On développe d'abord $(q_a+q'_a)\widetilde{G}(x_a-x_b)(q_b+q'_b)$ pour factoriser la contribution indépendante des "charges" q_a, ce qui donne

$$\widetilde{Z}_V(x_1,x_2,\beta)=H_1(x_1,x_2,\beta)H_2(x_1,x_2,\beta) \tag{1.22}$$

avec

$$\begin{aligned}H_1(x_1,x_2,\beta)&=\exp\big[-\frac{1}{2\beta}\sum_{\langle a,b\rangle}\eta_{ab}^2+\frac{1}{2\pi\beta}\sum_{a,b}\eta_a\widetilde{G}(x_a-x_b)\eta_b\big]\\ H_2(x_1,x_2,\beta)&=\sum_{q_a}\exp\big[-2\pi\beta\sum_{\langle a,b\rangle}q_a\widetilde{G}(x_a-x_b)q_b\big]\exp\big[-2i\sum_{\langle a,b\rangle}q_a\widetilde{G}(x_a-x_b)\eta_b\big]\end{aligned}$$

en ne comptant qu'une seule fois a,b dans $\sum_{a,b}\eta_a\widetilde{G}(x_a-x_b)\eta_b$. On remarque alors que

$$\frac{H_2(x_1,x_2,\beta)}{Z_V(\beta)}=\langle\exp\big[2i\sum_a q_a\sum_b\widetilde{G}(x_a-x_b)\eta_b\big]\rangle_{\rm Coul} \tag{1.23}$$

où la moyenne s'effectue par rapport aux poids intervenant dans (1.19) (espérance conditionnelle), et l'indice "Coul" réfère à un modèle d'interaction Coulombien. Reste à identifier $H_1(x_1, x_2, \beta)$ avec $\langle \exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})] \rangle_{\text{spw}}$ calculée en (1.11) ce qu'on fait de la façon suivante. L'exposant dans $H_1(x_1, x_2, \beta)$ peut s'écrire $-\frac{1}{2\beta}\gamma(x_a - x_b)$ où

$$\gamma(x_a, x_b) = \sum_{\langle a,b \rangle} \eta_{ab}^2 - \sum_{a,b} \eta_a G(x_a - x_b) \eta_b$$

On rappelle que $\widetilde{G}(x) = -2\pi(G(x) - G(0))$ désigne la fonction de Green régularisée, mais ici la condition de neutralité $\sum_a \eta_a = 0$ assure l'élimination de la divergence infra-rouge.

Le point essentiel pour calculer $\gamma(a, b)$ est de remarquer que la fonction η_a, calculée le long d'un chemin quelconque C joignant x_1 à x_2 représente une version discrète d'un potentiel de double couche sur C. Pour simplifier, on considère le cas où x_1 et x_2 sont situés sur un axe principal du réseau. Alors C est le segment $[x_2, x_1]$, et posant $r = |x_1 - x_2|$, on trouve que $\gamma(x_a, x_b) = \widehat{\gamma}(x_a - x_b)$ et

$$\gamma(r) = r - \sum_{1 \leq x, x' \leq r-1} \big[2G(x - x', 0) - G(x - x', 1) - G(x - x', -1)\big]$$

Comme

$$4G(x, y) - \big[G(x+1, y) + G(x-1, y) + G(x, y+1) + G(x, y-1)\big] = \delta_{x,0} \otimes \delta_{y,0}$$

on trouve facilement $\gamma(r) = 2(G(0) - G(r)) = -\widetilde{G}(r)/\pi$, et donc

$$H_1(x_1, x_2, \beta) = \exp\big[\frac{1}{2\pi\beta}\widetilde{G}(x_1 - x_2)\big]$$

Substituant cette expression ainsi que (1.23) dans (1.22), et (1.20) à l'aide de (1.11) on trouve

$$\langle \exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})] \rangle_V = \langle \exp[i(\theta_{x_1} - \theta_{x_2})] \rangle_{\text{spw}} \langle \exp\big[-2i \sum_a q_a \sum_b \widetilde{G}(x_a - x_b)\eta_b\big] \rangle_{\text{Coul}} \qquad (1.24)$$

ce qui est la décomposition annoncée. Bien sûr cette expression est formelle car on a ignoré toutes les difficultés dues à la renormalisation de G.

1.1.5 La transition de phase de second ordre.

On peut tirer de (1.24) quelques informations sur la décroissance des fonctions de corrélations pour le modèle de Villain à basse température [ItDr], sans pouvoir toutefois les généraliser facilement au modèle XY qui avait motivé son introduction. On rappellera donc

plutôt sans aucune démonstration, les résultats de la théorie due à J.Fröhlich et T.Spencer [FrSp] sur l'asymptotique des fonctions de corrélations, justifiant de façon rigoureuse les arguments de [Be], [Ko], [KoTh] sur la transition de phase de second ordre pour le modèle de Villain et celle du modèle XY avec interaction entre plus proches voisins.

Dans le modèle XY, interaction entre plus proches voisins, pour β petit, nous avons vu (Proposition 1.1) que les corrélations sont à décroissance exponentielle

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \leq \exp[-|i-j|/\xi(\beta)]$$

quand la distance $|i-j|$ tend vers l'infini, avec une *longueur de corrélation* $\xi(\beta) = 1/\log \frac{1}{2\beta}$. Dans l'approximation par le modèle gaussien, en revanche, $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \to 0$ polynomialement en $|i-j|$. Kosterlitz et Thouless ont interprété ce schéma de la façon suivante :

A la fois pour les petites et grandes valeurs de β, les fluctuations autour de $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ sont à courte portée. Cependant une transition du second ordre apparait au voisinage d'une certaine température inverse critique β_c, la longueur de corrélation $\xi(\beta)$ tendant vers l'infini quand $\beta \to \beta_c$. En ce point les fonctions de corrélation décroissent polynomialement avec $|i-j|$:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \sim (1+|i-j|)^{-\eta}, \ \beta = \beta_c$$

Dans le modèle d'Ising (spins à valeurs dans ± 1,) on sait que $\eta = 1/4$. On peut décrire ces transitions en termes d'excitations topologiques, appellées vortex. A basse température, les vortex s'organisent en dipôles (paires vortex/antivortex), puis un état désordonné émerge à la transition. Toutefois, l'expression "transition du second ordre" traduit le fait que les quantités thermodynamiques, telles que pression, énergie libre, sont continues au point de transition.

On présente alors les principaux résultats rigoureux pour les modèles XY (interaction entre plus proches voisins) et le modèle de Villain.

A cause des inégalités de corrélation [Gi], et de la propriété d'existence et d'unicité de l'état de Gibbs [DoSh], [BrLaFo], la limite thermodynamique $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle$ des corrélations $\langle \sigma_i \sigma_j \rangle_\Lambda$, lorsque $|\Lambda| \to \infty$, est bien définie. On connait aussi une majoration des corrélations à toute température :

Théorème 1.4 [McBSp] : Pour tout $\beta > 0$ et tout $\varepsilon > 0$, il existe $K(\beta, \varepsilon) > 0$, tels que :

$$0 \leq \langle \sigma_i \sigma_j \rangle \leq K(\beta, \varepsilon)(1+|i-j|)^{-1/(2\pi+\varepsilon)\beta}$$

Enfin, le comportement des corrélations à basse température est donné par le :

Théorème 1.5 [FrSp] : Pour tout $\beta > 0$ suffisamment grand :

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle \geq \text{Const.}(1+|i-j|)^{-1/2\pi\beta'}$$

pour un $\beta' = \beta'(\beta) > 1/4\pi$, avec $\beta'(\beta) \to \infty$ quand $\beta \to \infty$.

Notons qu'il existe aussi de telles inégalités [FrSp] pour les gaz de Coulomb étudiés ci-dessus. Les transitions de phase de seconde espèce pour d'autres modèles avec groupe continu de symétries ont été considérées depuis [Ch], [vEntSh], [vEntRoZa], ...La littérature sur les fonctions de corrélations dans des systèmes de spins est bien sur très vaste, citons par exemple [Sj2] pour l'asymptotique des corrélations à décroissance exponentielle.

1.2 Le modèle du champ moyen.

Pour les modèles que nous avons considérés, l'interaction à courte portée ne met en jeu que les plus proches voisins. Au contraire, dans le modèle du champ moyen, chaque site interagit avec tous les autres, considérés comme un environnement "uniforme".

On va rappeler brièvement les propriétés du champ moyen [ItDr], [Pr], qui donne le point de départ pour construire le modèle de Kac, et permettra de calculer l'entropie du système dans le cas d'une symétrie continue, pourvu que les paramètres, comme la magnétisation, varient dans certaines limites.

Commençons par le cas de spins à valeurs discrètes $\sigma = \pm 1$. L'ensemble des configurations $\sigma = \sigma_\Lambda$ dans le réseau Λ de volume $N = |\Lambda|$, est noté $\mathcal{X}_\Lambda$. La magnétisation de $\sigma_\Lambda \in \mathcal{X}_\Lambda$ est définie par $m(\sigma_\Lambda) = \frac{1}{N}\sum_{i\in\Lambda} \sigma_\Lambda(i)$, et pour $m \in [0,1]$, l'ensemble canonique $\mathcal{X}_{m,\Lambda} = \{\sigma_\Lambda \in \mathcal{X}_\Lambda : m(\sigma_\Lambda) = m\}$. Le hamiltonien est donné simplement par $H_0(\sigma_\Lambda) = -Nm^2/2$, la fonction de partition multicanonique par

$$Z_{\beta,m,\Lambda} = \sum_{\sigma_\Lambda \in \mathcal{X}_{\Lambda,m}} e^{-\beta H_0(\sigma_\Lambda)}$$

On peut alors définir les variables thermodynamiques intensives $I(m) = \frac{1}{N}\log|\mathcal{X}_{m,\Lambda}|$ (entropie) et

$$\mathcal{F}_{\beta,m,\Lambda} = -\frac{1}{\beta N}\log Z_{\beta,m,\Lambda}$$

(énergie libre). On a $\mathcal{F}_{\beta,m,\Lambda} = -m^2/2 - I(m)/\beta$, et un simple calcul combinatoire donne $|\mathcal{X}_{m,\Lambda}| = \binom{N}{n}$, $n = N\left[\frac{m+1}{2}\right]$ (partie entière). La fonctionnelle énergie libre met clairement en évidence la balance entre les termes d'énergie $m^2/2$ (diffusion) et d'entropie $I(m)$. De plus il existe une transition de phase, au sens où si $\beta > \beta_c$, alors $m \mapsto \mathcal{F}_{\beta,m,\Lambda}$ admet un point critique, dans la limite $N = |\Lambda| \to \infty$.

Passons maintenant au cas de la symétrie continue $q = 2, 3$. L'idée est de remplacer le terme d'entropie $I(m) = \frac{1}{N}\log|\mathcal{X}_{m,\Lambda}|$ par son analogue dans le continu.

Considérons la fonction génératrice $\phi(h) = \int_{\mathbf{S}^{q-1}} \nu(d\sigma)e^{\langle h,\sigma\rangle}$, $h \in \mathbb{R}^q$, sa transformation de Legendre

$$I(m) = \sup_{h\in\mathbb{R}^q}\big(\langle h, m\rangle - \log\phi(h)\big)$$

Pour $q = 2$, on a $\phi(h) = \widehat{\phi}(|h|) = I_0(|h|)$ (fonction de Bessel modifiée d'ordre 0). La fonction $\rho \mapsto \widehat{I}(\rho)$ est convexe, strictement croissante sur $[0,\ 1]$, $\widehat{I}(\rho) \sim \rho^2$ quand $\rho \to 0$, $\widehat{I}(\rho) \sim -\frac{1}{2}\log(1-\rho)$, quand $\rho \to 1$, et ces relations peuvent être différenciées. On a aussi $\widehat{I}' = \left((\log\widehat{\phi})'\right)^{-1}$, et $(\log\widehat{\phi})'(t) = I_1(t)/I_0(t)$ (I_1 fonction de Bessel modifiée d'ordre 1).

Pour $q = 3$ (modèle d'Heisenberg) on calculerait de même $\phi(h) = \sinh(|h|)/|h|$, mais pour simplifier on se limitera à $q = 2$.

L'énergie libre du champ moyen (intensive) est donnée par

$$f_\beta(m) = -\frac{1}{2}|m|^2 + \frac{1}{\beta}\widehat{I}(|m|)$$

La transition de phase dans le modèle du champ moyen a lieu au point critique de f_β, i.e. la racine de l'équation $\beta m_\beta = \widehat{I}'(m_\beta)$, qui existe ssi $\beta > \widehat{I}''(0) = q = 2$, et verifiée $0 < m_\beta < 1$. Ainsi la variété critique jouit encore de l'invariance par $O^+(2)$. Le graphe de f_β présente un maximum relatif en 0 et un point d'inflexion $0 < m_\beta^* < m_\beta$. La région $[0, m_\beta^*]$ où le graphe est concave est appelé région spinodale, $[m_\beta^*, m_\beta]$ région métastable, et $[m_\beta, 1[$ région stable. On remarque qu'un défaut du modèle du champ moyen est que f_β n'est pas convexe, tout comme le diagramme de Van der Waals pour la transition de phase liquide-vapeur. Un autre défaut est d'être formulé dans un cadre intensif, i.e. de ne pas prendre en compte la dimension du réseau. Le modèle de Kac permet de remédier à de tels défauts.

Chapitre 2

Interaction avec un environnement. Le modèle de Kac à symétrie continue.

Dans cette Section, nous prendrons aussi la limite continue (ou homogénéisation), consistant à travailler sur le réseau $\delta\mathbb{Z}^d$, $\delta \to 0$ plutôt que simplement sur $\mathbb{Z}^d$. Ceci est une illustration de "phénomènes critiques" où certains degrés de liberté ont des longueurs de corrélation si grandes par rapport à l'échelle atomique, que la structure discrète n'est plus perceptible.

En conséquence, nous changeons légèrement les notations par rapport à la Section précédente, en désignant par $\widetilde{\Lambda}$ la région intérieure, et par $\widetilde{\Lambda}^c$ son complémentaire. Plus généralement, les symboles avec un tilda dénoteront toujours des objets discrets sur $\mathbb{Z}^d$. Etant donnée la partition $\mathbb{Z}^d = \widetilde{\Lambda} \cup \widetilde{\Lambda}^c$, on définit par restriction les espaces de configuration intérieure $\mathcal{X}(\widetilde{\Lambda})$ (resp. extérieure $\mathcal{X}(\widetilde{\Lambda}^c)$,) et les configurations restreintes par $\sigma_{\widetilde{\Lambda}}$ (resp. $\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c}$.) La configuration $\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c}$ est obtenue comme restriction à $\widetilde{\Lambda}^c$ d'une configuration fixée une fois pour toutes, étendue à tout $\mathbb{Z}^d$. Soit aussi ν la mesure de surface normalisée sur $\mathbf{S}^{q-1}$.

Dans la suite nous présentons des techniques de renormalisation relatives au modèle de Kac, consistant à ramener l'étude du système sur une plus grande échelle, au moyen des transformations de bloc-spins.

L'interaction entre les sites est décrite à l'aide d'un hamiltonien de la forme :

$$H_\gamma(\sigma_{\widetilde{\Lambda}}|\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c}) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j\in\widetilde{\Lambda}} J_\gamma(i-j)\langle\sigma(i),\sigma(j)\rangle - \sum_{(i,j)\in\widetilde{\Lambda}\times\widetilde{\Lambda}^c} J_\gamma(i-j)\langle\sigma(i),\sigma(j)\rangle \tag{2.1}$$

où $J_\gamma(i) = \gamma^2 J(\gamma i)$ est un potentiel d'interaction à deux corps, appelé potentiel de Kac, avec $J \geq 0$, $\int J = 1$ (selon les cas, l'intégrale désignera soit une intégrale continue sur $\mathbb{R}^d$, soit une somme sur $\mathbb{Z}^d$.) Pour $\gamma > 0$ petit, l'interaction présente des caractères analogues à ceux du champ moyen :

a) longue portée $\approx \gamma^{-1}$

b) large connectivité : chaque site interagit avec $\approx \gamma^{-d}$ de ses voisins.

c) faible couplage γ^d.

d) intensité totale constante $\int J_\gamma = 1$.

Si $\widetilde{L} = \mathrm{diam}(\widetilde{\Lambda}) << \gamma^{-1}$, les spins sont essentiellement indépendants. Si $\widetilde{L} \approx \gamma^{-1}$, le système se comporte comme celui du champ moyen. Enfin si $\widetilde{L} >> \gamma^{-1}$, il ressemble au modèle XY avec interaction entre plus proches voisins que nous avons décrit dans la première partie. La limite de Lebowitz-Penrose consiste à prendre d'abord la limite thermodynamique, puis $\gamma \to 0$. Bien sur, les deux limites ne commutent pas. Un compromis, que nous adopterons ici, consiste à considérer simultanément les paramètres $\widetilde{L}$ et γ. L'introduction d'une troisième échelle, dite mésoscopique, celle de la taille des blocs-spin, s'avère nécessaire.

On définit la distribution conditionnelle de Gibbs en volume fini par

$$\mu_{\beta,\gamma,\widetilde{\Lambda}}(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}|\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c}) = \frac{1}{Z_{\beta,\gamma,\widetilde{\Lambda}}(\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c})} \exp\big[-\beta \widetilde{H}_\gamma(\sigma_{\widetilde{\Lambda}}|\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c})\big] \prod_{i\in\widetilde{\Lambda}} \nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big) \tag{2.2}$$

où

$$Z_{\beta,\gamma,\widetilde{\Lambda}}(\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c}) = \int_{\Omega_0} \prod_{i\in\widetilde{\Lambda}} \nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big) \exp\big[-\beta \widetilde{H}_\gamma(\sigma_{\widetilde{\Lambda}}|\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c})\big], \quad \Omega_0 = \big(\mathbf{S}^{q-1}\big)^{\widetilde{\Lambda}} \tag{2.3}$$

est la fonction de partition, qui fait de $\mu_{\beta,\gamma,\widetilde{\Lambda}}$ une mesure de probabilité. Par compacité (théorème de Prokhorov) il existe en général des points limite (mesures DLR) pour les mesures $\mu_{\beta,\gamma,\widetilde{\Lambda}}$ quand $|\Lambda| \to \infty$.

Dans la suite, on va préciser la renormalisation du Hamiltonien de Kac, qui consiste à remplacer les spins par leur moyenne (magnétisation) dans des régions macroscopiques.

Cette procédure est utilisée par [AlBeCaPr], [Pr] en dimension d pour des spins à valeurs dans $\{-1, +1\}$, et étendue au modèle XY par [BuPi] dans le cas d'un réseau unidimensionnel. On travaillera sur un réseau de dimension d, pour des spins à valeurs dans $\mathbf{S}^{q-1}$, bien que pour les estimations d'entropie, on se limitera, pour simplifier, à $q = 2$.

2.1 Quelques définitions.

La façon la plus simple de prendre la limite thermodynamique est de doubler indéfiniment le côté de l'hypercube unité, de sorte que le côté $\widetilde{L}$ de $\widetilde{\Lambda} = \widetilde{\Lambda}_{\widetilde{\ell}}$ est de la forme $2^{\widetilde{\ell}}, \widetilde{\ell} \in \mathbb{N}$.

Soit maintenant $\gamma > 0$ de la forme $\gamma = 2^{-k_\gamma}$, $k_\gamma \in \mathbb{N}$, qui sera l'inverse de la longueur d'interaction dans le potentiel de Kac. On va prendre une limite simultanée $\widetilde{\Lambda} \to \infty$, $\gamma \to 0$,

avec le côté de $\widetilde{\Lambda}$ de l'ordre de γ^{-1}, plutôt que la limite de Lebowitz-Penrose, $\widetilde{\Lambda} \to \infty$ suivie de $\gamma \to 0$.

Il est commode d'étalonner $\widetilde{\Lambda}$ aux dimensions d'un domaine $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$, de taille fixe L à l'aide d'un facteur d'échelle $2^{-\widetilde{\ell}}$; il n'y a pas d'inconvénient ici à prendre pour Λ le carré unité mais on peut aussi varier Λ et même le faire tendre vers l'infini (limite continue en volume infini).

Le choix le plus naturel de limite simultanée est donné par :

$$\widetilde{L} = L\gamma^{-1} \tag{2.4}$$

Suivant la terminologie de [Pr], pour $k \in \mathbb{N}$, on note par $\mathcal{Q}^{(k)}$ la partition de $\mathbb{R}^d$ en petits cubes $C_x^{(k)} = \{r = (r_1, \cdots, r_d) \in \mathbb{R}^d, 2^{-k}x_i \leq r_i < 2^{-k}(x_i + 1)\}$, de côté 2^{-k}, et indexés par $x = (x_1, \cdots, x_d) \in \mathbb{Z}^d$, qu'on appellera $\mathcal{Q}^{(k)}$-atomes. L'atome $C^{(k)}(r)$ est l'unique atome de $\mathcal{Q}^{(k)}$ qui contient r. Ainsi $r \in C_x^{(k)}$ ssi $x \in \widetilde{C}^{(k)}(r) = 2^k C^{(k)}(r)$. On dit aussi qu'une fonction sur $\mathbb{R}^d$ est $\mathcal{Q}^{(k)}$-mesurable si elle est constante sur chaque atome de $\mathcal{Q}^{(k)}$, et qu'un ensemble $A \subset \mathbb{R}^d$ est $\mathcal{Q}^{(k)}$-mesurable si sa fonction indicatrice est $\mathcal{Q}^{(k)}$-mesurable. Ceci permet d'identifier de façon naturelle une fonction σ sur le réseau avec une fonction $\mathcal{Q}^{(k)}$-mesurable $\sigma^{(k)}$ sur $\mathbb{R}^d$, en posant $\sigma^{(k)}(r) = \sigma(x)$ avec $x = (x_1, \cdots, x_d)$ et $r = (r_1, \cdots, r_d)$ comme ci-dessus.

Etant donné un état $\sigma \in \mathcal{X}(\mathbb{Z}^d)$, on définit σ_γ comme la fonction $\mathcal{Q}^{(k_\gamma)}$-mesurable $\sigma^{(k_\gamma)}$. Au vu de (2.4) il peut être commode d'indexer les configurations par γ, plutôt que par Λ. On appelle aussi σ_γ une configuration *à grain fin* ("smooth-grained configuration.")

Etant donnés σ_γ comme ci-dessus, et un entier $n_\gamma \leq k_\gamma$, on leur associe la fonction $\mathcal{Q}^{(n_\gamma)}$-mesurable (magnétisation empirique)

$$m_\gamma(r) = \pi^{(n_\gamma)}\sigma_\gamma(r) = \frac{1}{|C^{(n_\gamma)}|}\int_{C^{(n_\gamma)}(r)} dr'\sigma_\gamma(r') \tag{2.5}$$

Ces moyennes de σ_γ sur les boites "macroscopiques" (ou "blocs -spins") $C^{(n_\gamma)}(r)$ de volume 2^{-dn_γ} définissent les configurations dites *"gros grain"* ("coarse-grained configurations"). On note $\mathcal{M}^{(n_\gamma)} = \{m : m\ \mathcal{Q}^{(n_\gamma)}\text{-mesurable}, |m| < 1\}$

Les blocs-spin peuvent s'interpréter comme le résultat d'une renormalisation qui induit une transformation sur le hamiltonien de départ en un "hamiltonien effectif" décrivant l'interaction entre les blocs-spin. Ceci revient à changer β en $2^{dn_\gamma}\beta$. Intuitivement la nouvelle température inverse tend vers l'infini avec n_γ et à la limite la seule configuration qui joue un rôle pour la mesure de Gibbs ("support essentiel") sera l'état fondamental.

Soit $B'_q(0,1)$ la boule unité fermée de $\mathbb{R}^q$. L'application $\pi^{(n_\gamma)} : \Omega \to B'_q(0,1)$, $\Omega = \left(\mathbf{S}^{q-1}\right)^{\widetilde{C}^{(n_\gamma)}}$, est appelée *transformation de blocs-spin*. On peut la considérer comme un vecteur aléatoire $\Omega \to B'_q(0,1)$, où chaque facteur constituant Ω est muni de la probabilité $\nu(d\sigma)$.

Pour alléger un moment les notations, N désignant un nombre de sites arbitraire, on va considérer l'application

$$\pi_N : \left(\mathbf{S}^{q-1}\right)^N \to B'_q(0,1), \sigma = (\sigma_1, \cdots, \sigma_N) \mapsto \pi_N(\sigma) = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \sigma_i$$

Il est facile de voir que π_N est une application régulière et surjective, et que sa restriction $\widetilde{\pi}_N : \left(\mathbf{S}^{q-1}\right)^N \backslash \Delta \to B_q(0,1)$ où Δ désigne la diagonale $\sigma_1 = \cdots = \sigma_N$ de $\left(\mathbf{S}^{q-1}\right)^N$, et $B_q(0,1)$ la boule unité ouverte de $\mathbb{R}^q$, admet une différentielle surjective, i.e. $\widetilde{\pi}_N$ est une submersion. Par suite la mesure de probabilité $\nu_N = (\pi_N)_*(\nu \otimes \cdots \otimes \nu)$ admet une dérivée de Radon-Nikodym par rapport à la mesure de Lebesgue (normalisée) sur $B_q(0,1)$, donnée formellement par

$$\frac{d\nu_N}{dm}(m) = \int_{\left(\mathbf{S}^{q-1}\right)^N} \prod_{i=1}^N \nu(d\sigma(i))\delta\big(\pi_N(\sigma) - m\big) \tag{2.6}$$

Comme dans [BuPi,formula (5.1)] on vérifie le

Lemme 2.1 : Sous les conditions ci-dessus on a, au sens des intégrales oscillantes

$$\frac{d\nu_N}{dm}(m) = \big(\frac{N}{2\pi}\big)^q \int_{\mathbb{R}^q} dv e^{-iN\langle v,m\rangle} \big(\int_{\mathbf{S}^{q-1}} \nu(d\sigma) e^{i\langle v,\sigma\rangle}\big)^N$$

(ici $\langle\cdot,\cdot\rangle$ désigne le produit scalaire standard dans $\mathbb{R}^q$.)

Preuve : Ecrivons $\delta(x) = (2\pi)^{-q} \lim_{\varepsilon\to 0} \int_{\mathbb{R}^q} dv e^{i\langle v,x\rangle} e^{-\varepsilon v^2/2}$ au sens des intégrales oscillantes. Après le changement de variables $\lambda \to N\lambda$ et l'interversion de l'ordre des intégrations, on obtient le Lemme. Notons que la transformation de Fourier de ν tend vers 0 quand $v \to \infty$ (par exemple pour $q = 2$ elle s'exprime au moyen de la fonction de Bessel $J_0(|v|)$) mais pas assez vite pour assurer la convergence absolue. ♣

Suivant [Pr] on choisit maintenant n_γ tel que $\gamma^\eta = 2^{-n_\gamma}$, pour un $0 < \eta < 1$, et $\eta = 1/2$ fera l'affaire. (Donc $n_\gamma = k_\gamma/2$). Du point de vue du schéma discret, une configuration gros grain est définie sur un réseau "gros grain" $\widetilde{\Lambda}^*$ que l'on "raffine" par le facteur $2^{k_\gamma - n_\gamma}$ en un réseau à "grain fin" $\widetilde{\Lambda}$. Les propriétés thermodynamiques du système sont plus significatives sur le réseau gros grain, même si on perd de l'information en prenant les moyennes.

Pour $k \in \mathbb{N}$, soit donc $\widetilde{C}^{(k)} = 2^k C^{(k)} \cap \mathbb{Z}^d$ l'atome $C^{(k)}$ à l'échelle des unités du réseau ; ainsi, $\widetilde{C}^{(k)}$ contient 2^{dk} points à coordonnées entières. La distribution de probabilité $\nu^{(n_\gamma)}$ de la moyenne empirique $\pi^{(n_\gamma)}$ au point $x \in \widetilde{\Lambda}^*$ a pour densité de Radon-Nikodym

$$\frac{d\nu^{(n_\gamma)}}{dm}(x;m) = \int_{\Omega_x} \prod_{i\in\widetilde{C}_x^{(n_\gamma)}} \nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big)\delta\big(\pi^{(n_\gamma)}\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(x) - m\big), \quad \Omega_x = \left(\mathbf{S}^{q-1}\right)^{\widetilde{C}_x^{(n_\gamma)}} \tag{2.7}$$

On écrira quelquefois $\sigma_\gamma(i)$ à la place de $\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)$, et ici on posera $N = |\widetilde{C}^{(n_\gamma)}| = \gamma^{(\eta-1)d}$, $\nu^{(n_\gamma)} = \nu_N$. En faisant varier x dans $\widetilde{\Lambda}^* \approx \widetilde{\Lambda}/\widetilde{C}^{(n_\gamma)}$, on voit que les $\pi^{(n_\gamma)}(x)$ forment une famille de vecteurs aléatoires i.i.d. à valeurs dans $B_q(0,1)$. La distribution conjointe de cette famille admet comme densité par rapport à la mesure de Lebesgue normalisée $|\widetilde{\Lambda}^*|^{-1}\prod_{x\in\widetilde{\Lambda}^*} dm(x)$, le produit des $\frac{d\nu^{(n_\gamma)}}{dm}(x;m)$.

Le Hamiltonian de Kac version continue (ou Hamiltonien effectif sur Λ) est défini comme suit. Soit $J \geq 0$ le potentiel d'interaction, et

$$\Lambda = \bigcup_{i\in\widetilde{\Lambda}} C_i^{(k_\gamma)} = \bigcup_{x\in\widetilde{\Lambda}^*} C_x^{(n_\gamma)}$$

comme ci-dessus. Etant donnée une configuration extérieure $\sigma^c \in \mathcal{X}(\widetilde{\Lambda}^c)$, on définit l'énergie de la configuration intérieure $\sigma \in \mathcal{X}(\widetilde{\Lambda})$ par

$$H(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c) = -\frac{1}{2}\int_\Lambda dr \int_\Lambda dr' J(r-r')\langle\sigma_\gamma(r),\sigma_\gamma(r')\rangle - \int_\Lambda dr \int_{\Lambda^c} dr' J(r-r')\langle\sigma_\gamma(r),\sigma_\gamma^c(r')\rangle \quad (2.8)$$

Encore une fois, du point de vue du schéma discret, puisque $\sigma_\gamma(\gamma i) = \sigma(i)$, pour $i \in \mathbb{Z}^d$, il correspond à $H(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c)$ un Hamiltonien sur $\mathbb{Z}^d$ défini par

$$\widetilde{H}_\gamma(\sigma_{\widetilde{\Lambda}}|\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c}) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j\in\widetilde{\Lambda}} J_\gamma(i,j)\langle\sigma(i),\sigma(j)\rangle - \sum_{(i,j)\in\widetilde{\Lambda}\times\widetilde{\Lambda}^c} J_\gamma(i,j)\langle\sigma(i),\sigma(j)\rangle \quad (2.9)$$

où

$$J_\gamma(i,j) = \gamma^{-d}\int_{C^{(n_\gamma)}(\gamma i)} dr \int_{C^{(n_\gamma)}(\gamma j)} dr' J(r-r') \quad (2.10)$$

A cause de (2.4) les deux Hamiltoniens sont reliés simplement par :

$$\widetilde{H}_\gamma(\sigma_{\widetilde{\Lambda}}|\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c}) = \gamma^{-d} H(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c) \quad (2.11)$$

si bien que le hamiltonien effectif H apparaît comme une variable thermodynamique intensive. Comme il a été remarqué dans [AlBeCaPr], en négligeant les variations de J dans l'intégrale, on obtient

$$J_\gamma(i,j) \approx \gamma^d J(\gamma|i-j|) \quad (2.12)$$

qui jouit des propriétés du potentiel de Kac original, et les résultats de cette Section restent valides quand l'énergie est donnée par (2.8) avec (2.12) pris comme une égalité.

2.2 Estimations d'entropie.

On veut relier $\frac{1}{N}\log\frac{d\nu_N}{dm}(m)$ avec la fonctionnelle d'entropie $I(m)$ de l'approximation du champ moyen. Rappelons que $N = |\widetilde{C}^{n_\gamma}|$ (taille des blocs-spins), $I(m) = \sup_{k\in\mathbb{R}^q}\big(\langle k,m\rangle -$

$\log\phi(k)\big)$, $\phi(k)=\int_{\mathbf{S}^{q-1}}e^{\langle k,v\rangle}\nu(dv)$, et $I(m)=\langle k^*,m\rangle-\log\phi(k^*)$ où $k^*=k^*(m)$ est l'unique point de $\mathbb{R}^q$ qui réalise le maximum. Clairement aussi, par la symétrie sphérique, $I(m)=\widehat{I}(|m|)$, et $\widehat{I}(|m|)=\sup_{t\geq 0}\big(t|m|-\log\widehat{\phi}(t)\big)=t^*|m|-\log\widehat{\phi}(t^*)$, ou $t^*=t^*(|m|)$, $t^*(0)=0, t^*(\rho)\sim(2-2\rho)^{-1}$ quand $\rho\to 1$. De plus, le supremum est atteint lorsque k^* et m sont colinéaires. Pour $|m|<1$ introduisons la mesure de probabilité $P(d\sigma;m)$ sur $\mathbf{S}^{q-1}$ définie par

$$P(d\sigma;m)=\exp(\langle k^*,\sigma\rangle-\log\phi(k^*))\nu(d\sigma) \tag{2.13}$$

Comme dans (2.7), pour $x\in\widetilde{\Lambda}^*$ on introduit la dérivée de Radon-Nikodym

$$\frac{dP^{(n_\gamma)}}{dm}(d\sigma;m)(x)=\int_{\Omega_x}\prod_{i\in\widetilde{C}_x^{(n_\gamma)}}P\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i);m\big)\delta\big(\pi^{(n_\gamma)}\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(x)-m\big)$$

La distribution de probabilité $\frac{dP^{(n_\gamma)}}{dm}(d\sigma;m)(x)$ ne dépend évidemment pas de x (autrement dit, la distribution sur l'espace produit de base $\mathbb{Z}^d$ est invariante par translations). On notera $P_N(d\sigma;m)=P^{(n_\gamma)}(d\sigma;m)$. Par définition de $I(m)$ on a donc $\frac{d\nu_N}{dm}(m)=e^{-NI(m)}\frac{dP_N}{dm}(m)$. Soit aussi φ_m la fonction complexe définie sur $\mathbb{R}^q$

$$\varphi_m(v)=e^{i\langle v,m\rangle}\int_{\mathbf{S}^{q-1}}P(d\sigma;m)e^{-i\langle v,\sigma\rangle}$$

En utilisant de nouveau la représentation intégrale de la masse de Dirac on trouve l'identité [BuPi, formula(5.7)]

$$\frac{1}{N}\log\frac{dP_N}{dm}(m)=\frac{1}{N}\log\frac{d\nu_N}{dm}(m)+I(m)=\frac{1}{N}\log\big[\big(\frac{N}{2\pi}\big)^q\int_{\mathbb{R}^q}dv\big(\varphi_m(v)\big)^N\big] \tag{2.14}$$

La principale observation est que $\frac{1}{N}\log\frac{d\nu_N}{dm}(m)$ est une petite correction à $-I(m)$ (l'entropie pour le champ moyen) quand N devient grand. En fait on a :

Proposition 2.2 : Soit $q=2$ pour simplifier. Avec les notations ci-dessus, il existe $C_0>0, q'\geq 0$ tels que pour tout $N\geq 1$,

$$|\frac{1}{N}\log\frac{d\nu_N}{dm}(m)+I(m)|\leq\frac{1}{N}\log[C_0\big(\frac{N}{2\pi}\big)^q(N^q+N^{q'}(1-|m|)^{-1/2})] \tag{2.15}$$

Preuve : Il faut montrer que l'intégrale au membre de droite de (2.14) croît au plus linéairement comme $(1-|m|)^{-1/2}$, avec des coefficients polynomiaux en N. Remarquons d'abord que $|\varphi_m(v)|\leq\varphi_m(0)=1$ pour tout $v\in\mathbb{R}^q$, donc en intégrant $\varphi_m(v)^N$ sur la boule $\mathbb{R}^q$ de centre 0 et de rayon N on obtient

$$|\int_{|v|\leq N}dv\big(\varphi_m(v)\big)^N|\leq\text{Const.}\,N^q \tag{2.16}$$

On estime l'intégrale au voisinage de l'∞, en utilisant la phase stationnaire complexe. On omettra quelques détails, notamment les estimations précises des restes, pour lesquelles on renvoie par exemple à [Sj1], et il est facile de voir que nos développements au premier ordre sont valides avec l'uniformité requise. En particulier, on montre ainsi que l'intégrale oscillante (2.6) définit une "vraie" fonction de m pourvu que $|m| < 1$

Soit $v = r(\cos\varphi, \sin\varphi)$, $\varphi \in [-\pi, \pi]$, on récrit $\varphi_m(v)$ grâce à la représentation des fonctions de Bessel comme

$$\varphi_m(v) = \left(2\pi\widehat{\phi}(t^*)\right)^{-1} e^{ir|m|\sin\varphi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-ir\Phi(\theta,\varphi)}, \quad \widehat{\phi}(t^*) = I_0(t^*) \tag{2.17}$$

avec $\Phi(\theta, \varphi) = \cos(\theta - \varphi) + i\lambda \sin\theta$, et $\lambda = t^*/r$. Ici on considère $r \geq N$ comme le grand paramètre. Les points critiques en θ sont donnés par l'équation $\sin(\theta - \varphi) - i\lambda\cos\theta = 0$, ainsi $\theta \mapsto \Phi(\theta, \varphi)$ n'a pas de point critique si $\varphi \neq \pm\pi/2$, et deux points critiques réels $\theta = \pm\varphi$ sinon. En fait, $\operatorname{Im}\Phi(\pm\pi/2, \mp\pi/2) < 0$ donc la contribution des points critiques de signe opposé à celui de φ sera exponentiellement petite, et par symétrie il suffit de considérer $(\theta, \varphi) = (\pi/2, \pi/2)$. C'est un point critique non dégénéré, car $\frac{\partial^2\Phi}{\partial\theta^2}(\pi/2, \pi/2) = -1 - i\lambda$. A cause de l'analyticité, il y a un point critique complexe $\theta_c = \theta_c(\varphi)$ pour des valeurs voisines de φ, et un simple calcul fournit

$$\Phi(\theta_c, \varphi) = 1 + i\lambda - \frac{i\lambda}{2(1 + i\lambda)}(\varphi - \pi/2)^2 + \mathcal{O}(\varphi - \pi/2)^3 \tag{2.18}$$

où $\mathcal{O}(\varphi - \pi/2)^3$ est uniforme en λ. Le lemme de Morse complexe montre alors que le difféomorphisme analytique local $\theta \mapsto \widetilde{\theta}$ donné par

$$\widetilde{\theta} = \sqrt{f_1(\theta - \theta_c; \varphi)} e^{-i\pi/4}(\theta - \theta_c), \quad f_1(0; \pi/2) = 1 + i\lambda$$

est tel que $\Phi(\theta, \varphi) = \Phi(\theta_c, \varphi) - i\widetilde{\theta}^2/2$. Alors la phase stationnaire complexe montre que la contribution d'un voisinage fixe de θ_c à l'intégrale dans (2.17) est donné au premier ordre par $\left(\frac{2\pi}{rf_1(0;\varphi)}\right)^{1/2} e^{i\pi/4} e^{-ir\Phi(\theta_c,\varphi)}$. En dehors de ce voisinage, des arguments de phase non stationnaire montrent que l'intégrale est exponentiellement plus petite que $e^{-ir\Phi(\theta_c,\varphi)}$, en tant que fonction de r, et on obtient finalement, pour φ dans un voisinage (réel) $V_\pm$ de $\pm\pi/2$:

$$\int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{-ir\Phi(\theta,\varphi)} = \left(\frac{2\pi}{rf_1(0;\varphi)}\right)^{1/2} e^{i\pi/4} e^{-ir\Phi(\theta_c,\varphi)}(1 + R_1(\varphi, \lambda, r)/r) \tag{2.19}$$

avec $|R_1(\varphi, \lambda, r)| \leq$ Const.. Par un argument d'analyticité, on peut garder trace du point critique θ_c pour tout $\varphi \in [-\pi, \pi]$, alors la formula (2.19) a toujours un sens quand $\varphi \notin V_\pm$, mais alors $\operatorname{Im}\Phi(\theta_c, \varphi) < t^*$, et $\varphi \notin V_\pm$ ne contribue pas au résultat final. Puis on élève (2.17) à la puissance N et on intègre sur $r \geq N$, en utilisant (2.19) cela donne (avec le facteur 2,

pour tenir compte de la contribution $\varphi \in V_-$)

$$\int_{|v|\geq r_1} dv\varphi_m(v)^N \sim 2(2\pi\widehat{\phi}(t^*))^{-N}e^{iN\pi/4}(2\pi)^{N/2}\int_{r\geq N} rdr(rf_1(0;\varphi))^{-N/2} \\ \times \int_{V_+} d\varphi e^{-iNr\Phi_1(\varphi)}(1+R_1(\varphi,\lambda,r)/r)^N \tag{2.20}$$

où $\Phi_1(\varphi) = \Phi(\theta_c,\varphi) - |m|\sin\varphi$. Alors (2.18) montre que Φ_1 a un point critique non dégénéré en $\varphi = \pi/2$, et comme avant le lemme de Morse complexe donne un difféomorphisme analytique $\varphi \mapsto \widetilde{\varphi} = f_2(\varphi-\pi/2)(\varphi-\pi/2)$ avec $\frac{d\widetilde{\varphi}}{d\varphi}(\pi/2) = f_2(0) = \big(\frac{\lambda}{1+i\lambda} + i|m|\big)^{1/2}$, tel que $\Phi_1(\varphi) - \Phi_1(\pi/2) = \frac{1}{2}\widetilde{\varphi}^2$, $\Phi_1(\pi/2) = 1-|m|+i\lambda$. Alors par la phase stationnaire complexe, avec cette fois Nr comme grand paramètre, on peut évaluer l'intégrale en $d\varphi$ dans (2.20) :

$$\int_{V_+} d\varphi e^{-iNr\Phi_1(\varphi)}(1+R_1(\varphi,\lambda,r)/r)^N = \\ e^{-iNr(1-|m|)}e^{Nt^*}\sqrt{2\pi/Nr}f_2(0)^{-1}(1+R_1(\pi/2,\lambda,r)/r)^N(1+R_2(\lambda,|m|,r)/Nr) \tag{2.21}$$

avec $R_2(\lambda,|m|,r) \leq$ Const.. Enfin, on estime dans (2.20) l'intégrale en dr. Cette fois-ci on calcule simplement une borne supérieure pour l'intégrand.

Ainsi, on a $(1+R_1(\pi/2,\lambda,r)/r)^N \leq$ Const. uniformément par rapport à N quand $r \geq N$, et la même chose pour $(1+R_2(\lambda,|m|,r)/Nr)$, alors en reportant (2.21) dans (2.20), on obtient

$$\int_{|v|\geq r_1} dv\varphi_m(v)^N \leq \text{Const.}\int_{r\geq N} rdr\big(\frac{e^{t^*}}{\sqrt{2\pi}I_0(t^*)}|r+it^*|^{-1/2}\big)^N\sqrt{2\pi/Nr}|f_2(0)|^{-1} \tag{2.22}$$

On a

$$\big(\frac{e^{t^*}}{\sqrt{2\pi}I_0(t^*)}|r+it^*|^{-1/2}\big)^N = \big(\frac{e^{t^*}}{\sqrt{2\pi}I_0(t^*)}(N^2+t^{*2})^{-1/4}\big)^N\big(\frac{N^2+t^{*2}}{r^2+t^{*2}}\big)^{N/4}$$

et comme $\frac{e^{t^*}}{\sqrt{2\pi t^*}I_0(t^*)} \to 1^-$ quand $t^* \to +\infty$, il est facile de voir que

$$\limsup_{N\to\infty}\big(\frac{e^{t^*}}{\sqrt{2\pi}I_0(t^*)}(N^2+t^{*2})^{-1/4}\big)^N \leq \text{Const.}$$

uniformément en $t^* > 0$. De plus $|f_2(0)|^{-1} = (t^{*2}+r^2)^{1/4}\big(t^{*2}(1-|m|)^2+r^2|m|^2\big)^{-1/4}$, et comme $t^* \sim 2^{-1}(1-|m|)^{-1}$ quand $|m| \to 1$, on a $|f_2(0)|^{-1} \leq \text{Const.}(1-|m|)^{-1/2}$ uniformément pour $r \geq N$. Donc l'intégrale au membre de droite de (2.22) est bornée par une constante fois

$$(1-|m|)^{-1/2}\int_{r\geq N} rdr\sqrt{2\pi/Nr}\big(\frac{N^2+t^{*2}}{r^2+t^{*2}}\big)^{N/4}$$

et il est facile de montrer qu'il existe $q' \geq 0$ tel que $\int_{r \geq N} r dr \sqrt{2\pi/Nr} \left(\frac{N^2+t^{*2}}{r^2+t^{*2}}\right)^{N/4} \leq \text{Const.}\, N^{q'}$ uniformément pour $t^* > 0$. Ceci termine la preuve de la Proposition. ♣

On va aussi rappeler, bien qu'il ne nous sera pas utile dans la suite, un résultat de P.Butta & P.Picco sur la distribution ν_N (avec des notations comme en (2.6)) près de $r = 1$.

Proposition 2.3 [BuPi] : Il existe $b > 0$ tel que $\nu_N(\{|m| > r\}) \leq \text{Const.}(b(1-r))^{N/12}$, $N = 1, 2, \cdots$.

Preuve : Bien qu'il soit possible d'obtenir cette majoration par le développement asymptotique d'une intégrale oscillante comme ci-dessus, on utilisera l'argument probabiliste de [BuPi] qui a l'avantage d'être plus intuitif. Notons $\langle \sigma_i, \sigma_j \rangle$ le produit scalaire dans $\mathbb{R}^q$. Alors

$$\nu_N(\{|m| > r\} = \nu_N(\{|m|^2 > r^2\} = \nu_N(\{\sum_{1 \leq i,j \leq N} \langle \sigma_i, \sigma_j \rangle > N^2 r^2\})$$

Soit l'événement $A_r = \{\sigma \in \mathcal{X}(\Lambda) : \sum_{1 \leq i,j \leq N} \langle \sigma_i, \sigma_j \rangle > N^2 r^2\}$, Λ désignant un réseau à N sites, on va estimer la probabilité $P(A_r)$, où $P = \nu \otimes \cdots \otimes \nu$ (N fois). Pour tout $1 \leq i, j \leq N$, $0 \leq r < 1$, on définit

$$\Omega_r(i,j) = \{\sigma \in \mathcal{X}(\Lambda) : \langle \sigma_i, \sigma_j \rangle > a = r^2 + r - 1\}$$

et la variable aléatoire discrète sur $\mathcal{X}(\Lambda)$

$$N(\sigma) = \text{card}\{(i,j) : \sigma \in \Omega_r(i,j)\}$$

Utilisant $|\langle \sigma_i, \sigma_j \rangle| \leq 1$, on a clairement

$$\sum_{1 \leq i,j \leq N} \langle \sigma_i, \sigma_j \rangle \leq N(\sigma) + a(N^2 - N(\sigma))$$

donc si $\sigma \in A_r$, alors $r^2 N^2 < \sum_{1 \leq i,j \leq N} \langle \sigma_i, \sigma_j \rangle \leq N(\sigma) + a(N^2 - N(\sigma))$, ou encore $N(\sigma) \geq \frac{N^2}{r+2} \geq \frac{N^2}{3}$, et donc

$$A_r \subset \{\sigma : N(\sigma) \geq \frac{N^2}{3}\}$$

Soit $I \subset \Lambda$ et $B_r(I) = \{\sigma \in \Omega_r(i,j), i \in I, j \notin I\}$, on a $A_r = \bigcup_{I \subset \Lambda} B_r(I)$. Posons $\Lambda' = \{(i,j) \in \Lambda \times \Lambda : \Omega_r(i,j) \neq \emptyset\}$, alors $|\Lambda'| \geq N^2/3$. Il est facile de voir qu'il est possible d'extraire au moins $N/6$ paires *disjointes* (i,j) (i.e. dont les projections sont des ensembles disjoints) d'un ensemble de paires de cardinal au moins égal à $N^2/3$, et qu'on peut choisir ainsi $I_1, I_2, \cdots I_\ell \subset \Lambda$ tels que $|I_k| \geq N/6$ et

$$\Lambda' = \bigcup_{k=1}^{\ell} \{(i,j) \in \Lambda \times \Lambda : i \in I_k, j = j(i) \notin I_k, \Omega_r(i,j) \neq \emptyset\}$$

Donc $A_r = \bigcup_{k=1}^{\ell} B_r(I_k)$. Maintenant $B_r(I_k) = \{\sigma : \langle \sigma_i, \sigma_j \rangle \geq a, i \in I_k, j = j(i) \notin I_k\} = \bigcap_{i \in I_k} C_i$ avec $C_i = \{\sigma : \langle \sigma_i, \sigma_{j(i)} \rangle \geq a\}$. Les σ_i étant des variables aléatoires i.i.d. il est clair que les C_i sont des événements indépendants, et donc $P(B_k) = \prod_{i \in I_k} P(C_i) = (P(C_1))^{|I_k|}$, avec $P(C_1) = P(\{\sigma \in \mathcal{X}(\Lambda) : \langle \sigma_1, \sigma_2 \rangle > a\})$. Par ailleurs la probabilité de cet événement est égal à :

$$\begin{aligned} P(\{\sigma \in \mathcal{X}(\Lambda) : \langle \sigma_1, \sigma_2 \rangle > r^2 + r - 1\}) &= \int \nu(d\sigma_1) \int \nu(d\sigma_2) \chi(\langle \sigma_1, \sigma_2 \rangle > r^2 + r - 1) \\ &\leq \text{Const.} \cos^{-1}(r^2 + r - 1) \leq \text{Const.}(1 - r) \end{aligned} \tag{2.23}$$

Pour estimer $P(A_r) \leq \sum_{k=1}^{\ell} (P(C_1))^{|I_k|}$ il suffit de remarquer que le nombre de sous-ensembles $I \subset \Lambda$ de cardinal n, est donné par $\binom{N}{n}$, donc croît au plus comme 2^N. La Proposition en découle facilement pour le choix d'une constante convenable b. ♣

Notons que cette majoration n'est pas en contradiction avec (2.15) car $I(m) = \widehat{I}(|m|)$ admet aussi une divergence logarithmique près de $|m| = r = 1$.

Revenons maintenant au calcul de l'entropie totale sur le réseau, et considérons la famille des variables aléatoires i.i.d. $\left(\pi_x^{(n_\gamma)}\right)_{x \in \Lambda^*}$. Leur distribution de probabilité $\nu^{(\Lambda^*)}(m) = \prod_{x \in \Lambda^*} \nu^{(n_\gamma)}(x; m)$ a pour dérivée de Radon-Nikodym

$$\frac{d\nu^{(\Lambda^*)}}{dm}(m) = \prod_{x \in \widetilde{\Lambda}^*} \frac{d\nu^{(n_\gamma)}}{dm}(x; m) = \int_{\Omega_0^*} \prod_{i \in \widetilde{\Lambda}} \nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big) \delta\big(\pi^{(n_\gamma)} \sigma_{\widetilde{\Lambda}}(x) - m(x)\big) \tag{2.24}$$

où on a noté $\Omega_0^* = \left(\mathbf{S}^1\right)^{\widetilde{\Lambda}^*}$. Le membre de droite de (2.24) peut encore s'écrire

$$\int_{\Omega_0} \prod_{x \in \widetilde{\Lambda}/\widetilde{C}^{(n_\gamma)}} \prod_{i \in \widetilde{C}_x^{(n_\gamma)}} \nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big) \delta\big(\pi^{(n_\gamma)} \sigma_{\widetilde{\Lambda}}(x) - m(x)\big)$$

où $\Lambda/\widetilde{C}^{(n_\gamma)} = \Lambda^*$. Ainsi $\frac{d\nu^{(\Lambda^*)}}{dm}(m)$ est la densité de la distribution conjointe de la famille des moyennes empiriques $\left(\pi_x^{(n_\gamma)}\right)_{x \in \widetilde{\Lambda}^*}$ dans $\widetilde{C}_x^{(n_\gamma)}$. Elle doit s'interpréter comme une fonctionnelle sur l'espace des fonctions $\mathcal{Q}^{n_\gamma}$-mesurables m.

On peut faire la même opération avec les mesures $P^{(n_\gamma)}$, ce qui donne, compte tenu ce que $|\widetilde{\Lambda}/\widetilde{C}^{(n_\gamma)}| = |\Lambda/C^{(n_\gamma)}| = (L\gamma^{-\eta})^d$:

$$\frac{dP^{(\Lambda^*)}}{dm}(m) = \exp[\gamma^{-d} I(m, \Lambda)] \frac{d\nu^{(\Lambda^*)}}{dm}(m) \tag{2.25}$$

De la Proposition 2.2 on déduit le :

Corollaire 2.4 : Avec les notations ci-dessus, il existe $C_1 > 0$ tel que

$$|\log \frac{d\nu^{(\Lambda)}}{dm} + \gamma^{-d} I(m,\Lambda)| \leq C_1 (L\gamma^{-\delta})^d \log \gamma^{-1} + \log \prod_{x \in \widetilde{\Lambda}/\widetilde{C}^{(n_\gamma)}} \big(1 - |m(x)|\big)^{-1/2} \tag{2.26}$$

Preuve : On multiplie (2.15) par N et on fait la somme obtenue sur tous les $x \in \widetilde{\Lambda}^*$. Tous les cubes $\widetilde{C}_x^{(n_\gamma)}$ contenus dans $\widetilde{\Lambda}$ ont même cardinal $N = \gamma^{-\varepsilon d} = 2^{n_\gamma}$. Au membre de gauche on reconnaît ainsi le log de (2.25). Quant au membre de droite, (2.26) résulte facilement de l'inégalité $\log(a+b) \leq \log(1+a) + \log b$ valable pour tous $a > 0, b \geq 1$. ♣

On remarque que ces estimations échouent quand $|m(x)|$ s'approche de 1 pour un $x \in \Lambda$, ce qui reflète le fait que la densité d'entropie $I(m)$ est singulière près de $|m| = 1$.

2.3 Estimations d'énergie libre.

Suivant [Pr], on remplace maintenant dans le hamiltonian les spins $\sigma_\gamma(r)$ par la magnetisation $m_\gamma(r)$ comme dans (2.5). On estime la différence des énergies obtenues :

Proposition 2.5 : Avec les notations ci-dessus, pour un $C_2 > 0$ on a :

$$|H(m_\gamma|m_\gamma^c) - H(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c)| \leq C_2 L^d \gamma^\eta \|\nabla J\|_1 \tag{2.27}$$

(ici $\|\cdot\|_1$ denote la norme L^1-norme sur $\mathbb{R}^d$, et η est comme après le Lemme 2.1.)

Preuve : Par la définition (2.8) de $H(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c)$ et (2.10) on a, en notant pour simplifier $C_\gamma(r)$ à la place de $\widetilde{C}^{(n_\gamma)}(r)$

$$\begin{aligned} H(m_\gamma|m_\gamma^c) - H(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c) &= \big(\frac{1}{2}\int_\Lambda dr_1 \int_\Lambda dr_2 + \int_\Lambda dr_1 \int_{\Lambda^c} dr_2\big) \langle \sigma_\gamma(r_1), \sigma_\gamma(r_2)\rangle \\ &\times \big[\gamma^{-2d\delta} \int_{C_\gamma(r_1)} dr \int_{C_\gamma(r_2)} dr' \big(J(r-r') - J(r_1 - r_2)\big)\big] \end{aligned}$$

où on a utilisé $r_1 \in C_\gamma(r)$ ssi $r \in C_\gamma(r_1)$. On estime $J(r-r') - J(r_1 - r_2)$ par la formule de Taylor, en remarquant que $|(r-r') - (r_1 - r_2)| \leq \text{Const.}\, \gamma^\eta$, si bien que les intégrales en dr_2 sur Λ ou Λ^c sont bornées par une constante fois $\gamma^\eta \|\nabla J\|_1$, alors l'intégrale en dr_1 sur Λ donne un facteur additionnel de L^d, ce qui prouve la Proposition. ♣.

Introduisons maintenant l'énergie libre dans Λ à la température inverse β, en y incluant l'interaction on Λ^c, comme la fonctionnelle sur l'espace des fonctions $\mathcal{Q}^{(n_\gamma)}$ mesurables $m(r)$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(m|m^c) &= \frac{1}{4}\int_\Lambda dr \int_\Lambda dr' J(r-r')|m(r) - m(r')|^2 \\ &+ \frac{1}{2}\int_\Lambda dr \int_{\Lambda^c} dr' J(r-r')|m(r) - m(r')|^2 + \int_\Lambda dr \big(f_\beta(m(r)) - f_\beta(m_\beta)\big) \end{aligned} \tag{2.28}$$

où l'on rappelle que $f_\beta(m) = -\frac{1}{2}|m|^2 + \frac{1}{\beta}\widehat{I}(m)$. On a besoin de fonctions-test d'énergie finie. Soit donc $\widehat{e}$ n'importe quel vecteur fixe dans $\mathbb{R}^q$, et $\widehat{m}_\beta$ la fonction constante sur Λ égale à $m_\beta\widehat{e}$, prolongée par m^c sur Λ^c. Les fonctionnelles $I(\cdot,\Lambda)$ et $H(\cdot|m^c)$ sont reliées à $\mathcal{F}(\cdot|m^c)$ de manière simple :

$$\mathcal{F}(m|m^c) - \mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c) = (H(m|m^c) + \frac{1}{\beta}I(m,\Lambda)) - (H(\widehat{m}_\beta|m^c) + \frac{1}{\beta}I(\widehat{m}_\beta,\Lambda)) \tag{2.29}$$

2.4 Estimations sur la mesure de Gibbs canonique.

Comme pour la mesure d'entropie, on va prendre l'image de la mesure de Gibbs (2.2) conditionnée par la configuration externe $\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c} = \sigma_\gamma^c$ par la transformation de blocs-spin. Soit m une fonction $\mathcal{Q}^{(n_\gamma)}$ mesurable, identifiée comme plus haut à une fonction sur le réseau Λ^*. On peut commencer par un seul bloc-spin, en calculant $M_N(x;m) = \big(\pi_N\big)_*\mu_{\beta,\gamma,\Lambda}(d\sigma_\gamma;m|\sigma_\gamma^c)(x)$ au point x, elle a pour dérivée de Radon-Nikodym :

$$\frac{dM_N(x;m)}{dm} = \frac{1}{Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma_\gamma^c)}\int_{\Omega_0}\exp\big[-\beta\gamma^{-d}H_\gamma(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c)\big]\prod_{i\in\widetilde{\Lambda}}\nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big)\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(x)-m) \tag{2.30}$$

où la fonction de partition $Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma_\gamma^c) = Z_{\beta,\gamma,\widetilde{\Lambda}}(\sigma_{\widetilde{\Lambda}^c})$ a été définie en (2.3). On a utilisé de nouveau (2.11) pour travailler sur le réseau normalise Λ, et posé pour simplifier $\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(i) - m) = \delta\big(\pi^{(n_\gamma)}\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i) - m\big)$. La différence avec la mesure d'entropie est que les $M_N(x;m)$, pour $x \in \Lambda^*$, sont corrélées, à cause de l'interaction entre les sites. On va donc calculer plutôt l'image de la mesure de Gibbs (2.2) par la famille des vecteurs aléatoires $(\pi_\gamma^{(x)})_{x\in\Lambda^*}$, soit

$$M_{\beta,\gamma}^{\Lambda^*}(m) = ((\pi_\gamma^{(x)})_*\mu_{\beta,\gamma,\Lambda}(d\sigma_\gamma;m|\sigma_\gamma^c)(x))_{x\in\Lambda^*}$$

Pour déterminer sa dérivée de Radon-Nikodym $\frac{dM_{\beta,\gamma}^{\Lambda^*}(m)}{dm}(m)$, il suffit clairement de remplacer $\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(x)-m)$ dans (2.30) par

$$\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma - m) = \delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(x_1) - m(x_1)) \otimes \cdots \otimes \delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(x_\omega) - m(x_\omega))$$

où $\Lambda^* = \{x_1,\cdots,x_\omega\}$, $\omega = (L\gamma^{-1})^d$. C'est encore une fonctionnelle sur l'espace des fonctions $\mathcal{Q}^{n_\gamma}$-mesurables. On a donc

$$\frac{dM_{\beta,\gamma}^{\Lambda^*}(m)}{dm}(m) = \frac{1}{Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma_\gamma^c)}\int_{\Omega_0}\exp\big[-\beta\gamma^{-d}H_\gamma(\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c)\big]\prod_{i\in\widetilde{\Lambda}}\nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big)\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma - m) \tag{2.31}$$

et puisque par définition $\mu_{\beta,\gamma,\Lambda}(d\sigma_\gamma|\sigma_\gamma^c)$ est de masse totale 1 :

$$\int_{|m|<1} dm\frac{dM_{\beta,\gamma}^{\Lambda^*}(m)}{dm}(m) = 1 \tag{2.32}$$

où dm est la mesure de Lebesgue normalisée Lebesgue sur l'espace produit $\prod_{x\in\Lambda^*} B_q(0,1)$. On va donner un sens précis à l'approximation $\mu_{\beta,\gamma,\Lambda} \approx \exp[-\beta\gamma^{-d}\mathcal{F}(m|m^c)]$, où on a écrit $\mu_{\beta,\gamma,\Lambda}$ par tradition, mais de façon un peu abusive, à la place de $\frac{dM^{\Lambda^*}_{\beta,\gamma}(m)}{dm}(m)$. On va établir l'analogue de [AlBeCaPr,Lemma 3.2] dans le cas de la symétrie continue, et améliorant par la même occasion [BuPi, Lemma 3.1] :

Théorème 2.6 : Sous les conditions ci-dessus, on peut trouver des constantes $C_1, C_2 > 0$ telles que pour toute configuration gros grain m sur Λ^*, on a :

$$\begin{aligned}
&-g(m) - (L\gamma^{-1})^d\big(C_2\beta\gamma^\eta\|\nabla J\|_1 + C_1\gamma^{(1-\eta)d}\log\gamma^{-1}\big)\\
&\quad\le \log\frac{dM^{\Lambda^*}_{\beta,\gamma}(m)}{dm}(m) + \beta\gamma^{-d}\mathcal{F}(m|m^c)\\
&\qquad\le g(m) + \beta\gamma^{-d}\inf_{\widehat{e}\in\mathbf{S}^1}\mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c) + (L\gamma^{-1})^d\big(C_2\beta\gamma^\eta\|\nabla J\|_1 + C_1\gamma^{(1-\eta)d}\log\gamma^{-1}\big)
\end{aligned} \tag{2.33}$$

où $g(m) = \log\prod_{x\in\widetilde{\Lambda}/\widetilde{C}^{(n_\gamma)}}\big(1-|m(x)|\big)^{-1/2}$.

Preuve : D'abord on cherche une borne inférieure sur $Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma)$. A défaut d'estimations d'énergie localisées, soit par rapport à x, soit par rapport à σ, on utilise (2.27) qui donne :

$$\exp[-\beta\gamma^{-d}H(\sigma_\gamma|\sigma^c_\gamma)] \ge \exp[-\beta\gamma^{-d}H(\pi_\gamma\sigma_\gamma|\sigma^c_\gamma)]\exp[-C_2\beta\gamma^{-d}L^d\gamma^\delta\|\nabla J\|_1]$$

(et de façon similaire pour la borne supérieure). Multipliant ces relations par $\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(x)-m)$, on intègre par rapport à $\prod_{i\in\widetilde{\Lambda}}\nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big)$ sur Ω_0 on obtient par le Corollaire 2.4 :

$$\begin{aligned}
&\exp[-\beta\gamma^{-d}(H(m|m^c) + \frac{1}{\beta}I(m,\Lambda))]\exp[-\psi_\gamma(m)]\\
&\le \int_{\Omega_0}\prod_{i\in\widetilde{\Lambda}}\nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big)\exp[-\beta\gamma^{-d}H(\sigma_\gamma|\sigma^c_\gamma)]\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(i)-m)\\
&\le \exp[-\beta\gamma^{-d}(H(m|m^c) + \frac{1}{\beta}I(m,\Lambda))]\exp[\psi_\gamma(m)]
\end{aligned} \tag{2.34}$$

où

$$\psi_\gamma(m) = (L\gamma^{-1})^d\big(C_2\beta\gamma^\delta\|\nabla J\|_1 + C_1\gamma^{(1-\delta)d}\log\gamma^{-1}\big) + g(m) \tag{2.35}$$

Puis on estime la contribution d'un voisinage de $\widehat{m}_\beta$ dans $\mathcal{M}^{(n_\gamma)}$ à la fonction de partition, en utilisant des fonctions test d'énergie finie. Soit $0\le\chi\le 1$ une fonction troncature égale à 1 près de $m=\widehat{m}_\beta$, on multiplie (2.34) par $\chi(m)$, puis on intègre par rapport à m avec la mesure produit $\prod_{x\in\widetilde{\Lambda}/\widetilde{C}^{(n_\gamma)}} dm(x)$, et ensuite on utilise (2.3), (2.29) et (2.32), on obtient finalement

$$\begin{aligned}
Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma) &\ge \exp[-\|\psi_\gamma\|_\chi]\exp[-\beta\gamma^{-d}(H(\widehat{m}_\beta|m^c) + \frac{1}{\beta}I(\widehat{m}_\beta,\Lambda))]\\
&\quad\times\int dm\chi(m)\exp[-\beta\gamma^{-d}(\mathcal{F}(m|m^c) - \mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c)]
\end{aligned}$$

où $\|\psi_\gamma\|_\chi = \sup_{m\in\operatorname{supp}\chi}\psi_\gamma(m) < \infty$. Choisissons supp χ si petit que $|m-\widehat{m}_\beta| \le \gamma^{(1-\delta)d}$ sur supp χ. Utilisant (2.28), la normalisation de J et le développement de Taylor de f_β autour $\widehat{m}_\beta$, on obtient $|\mathcal{F}(m|m^c)-\mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c)| \le C_3L^d\gamma^{(1-\delta)d}$ sur supp χ, alors :

$$Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma) \ge \exp[-\big(\|\psi_\gamma\|_\chi+C_3(L\gamma^{-1})^d\beta\gamma^{(1-\delta)d}\big)]\exp[-\beta\gamma^{-d}(H(\widehat{m}_\beta|m^c)+\frac{1}{\beta}I(\widehat{m}_\beta,\Lambda))] \quad (2.36)$$

En reportant ceci dans (2.31) et (2.34) on trouve

$$\log\frac{dM^{\Lambda^*}_{\beta,\gamma}(m)}{dm}(m) \le -\beta\gamma^{-d}(\mathcal{F}(m|m^c)-\mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c))+\psi_\gamma(m)+\|\psi_\gamma\|_\chi+C_3(L\gamma^{-1})^d\beta\gamma^{(1-\delta)d} \quad (2.37)$$

Pour la borne supérieure sur $Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma)$, on se sert de (2.32) et (2.34) pour écrire

$$\begin{aligned} Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma) &= \int dm\int_{\Omega_0}\exp\big[-\beta\gamma^{-d}H_\gamma(\sigma_\gamma|\sigma^c_\gamma)\big]\prod_{i\in\widetilde{\Lambda}}\nu\big(d\sigma_{\widetilde{\Lambda}}(i)\big)\delta(\pi_\gamma\sigma_\gamma(i)-m)\\ &\le \int dm\exp[-\beta\gamma^{-d}(H(m|m^c)+\frac{1}{\beta}I(m,\Lambda))]\exp\psi_\gamma(m)\end{aligned}$$

Grâce à (2.29) et l'inégalité $\mathcal{F}(m|m^c)\ge 0$, on a

$$\begin{aligned} Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma) &\le \exp[-\beta\gamma^{-d}\big(H(\widehat{m}_\beta|m^c)+\frac{1}{\beta}I(\widehat{m}_\beta,\Lambda))-\mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c)\big)]\\ &\quad\times\int dm\exp\psi_\gamma(m)\end{aligned}$$

donc on est ramené à estimer $\int dm\exp\psi_\gamma(m)$, l'intégrale parcourant tout l'espace produit espace, et $\psi_\gamma(m)$ comme dans (2.35). Comme $\int_0^1(1-\rho)^{-1/2}\rho d\rho<\infty$ on trouve

$$\begin{aligned} Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c_\gamma) &\le \exp[-\beta\gamma^{-d}\big(H(\widehat{m}_\beta|m^c)+\frac{1}{\beta}I(\widehat{m}_\beta,\Lambda)-\mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c)\big)]\\ &\quad\times\exp[(L\gamma^{-1})^d\big(C_2\beta\gamma^\delta\|\nabla J\|_1+C_1\gamma^{(1-\delta)d}\log\gamma^{-1}+C_4\gamma^{(1-\delta)d}\big)]\end{aligned}$$

Insérant ceci et la première inégalité (2.34) dans (2.31), on trouve, absorbant le reste en C_4 par le reste en C_1

$$\begin{aligned}\log\frac{dM^{\Lambda^*}_{\beta,\gamma}(m)}{dm}(m) &\ge -g(m)-\beta\gamma^{-d}\mathcal{F}(m|m^c)\\ &\quad-(L\gamma^{-1})^d\big(2C_2\beta\gamma^\delta\|\nabla J\|_1+2C_1\gamma^{(1-\delta)d}\log\gamma^{-1}\big)\end{aligned} \quad (2.38)$$

Mettant (2.38) ensemble avec (2.37) avec de nouvelles constantes C_1, C_2 on obtient finalement le Théorème. ♣

Remarque : Comparée au résultat pour le spin à valeurs scalaires [Pr], la formule contient le terme $\beta\gamma^{-d}\inf_{\widehat{e}\in\mathbf{S}^1}\mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c)$ qui risque d'être du même ordre de grandeur que $\beta\gamma^{-d}\mathcal{F}(m|m^c)$. De plus, ces estimations ont peu d'intérêt lorsque $|m|$ s'approche de 1 à cause de $g(m)$, mais en pratique on saura montrer que $|m|$ reste borne supérieurement.

Chapitre 3

Vortex et magnétisation dans le modèle de Kac

Journal of Statistical Physics, Vol. 128, No. 3, August 2007 (© 2007)
DOI: 10.1007/s10955-007-9319-8

Vortices and Magnetization in Kac's Model

H. El Bouanani[1] and M. Rouleux[1]

Received September 7, 2006; accepted April 12, 2007
Published Online: May 4, 2007

We consider a 2-dimensional planar rotator on a large, but finite lattice with a ferromagnetic Kac potential $J_\gamma(i) = \gamma^2 J(\gamma i)$, J with compact support. The system is subject to boundary conditions with vorticity. Using a gradient-flow dynamics, we compute minimizers of the free energy functional at low temperature, i.e. in the regime of phase transition. We have the numerical evidence of a vortex structure for minimizers, which present many common features with those of the Ginzburg-Landau functional. We extend the results to spins valued in S^2 and compare with the celebrated Belavin and Polyakov model.

KEY WORDS: Kac's model, gradient-flow dynamics, vortex, Belavin and Polyakov model

INTRODUCTION

Vector spin model with an internal continuous symmetry group, such classical $O^+(q)$ models (XY or "planar rotator" for $q = 2$, and Heisenberg model for $q = 3$,) play an important rôle in Statistical Physics. In one or two dimensions, and for all inverse temperature β, if the range of the translation invariant interaction is finite, then a theorem of Dobrushin and Shlosman shows there is no breaking of the internal symmetry (that is, Gibbs states are invariant under $O^+(q)$) and furthermore, by a theorem of Bricmont, Fontaine and Landau, uniqueness of the Gibbs state holds (see e.g. Ref. 20, Chap. III).

Despite of this, a particular form for phase transition exists, which can be characterized by the change of behavior in the correlation functions. In the low temperature phase they have power law decay, showing that the system is in a long range order state (exhibiting in particular the so-called "spin waves,") but

[1] Centre de Physique Théorique and Université du Sud Toulon Var CPT, Campus de Luminy, Case 907 13288 Marseille cedex 9, France; e-mail: hicham.el-bouanani@cpt.univ-mrs.fr; rouleux@cpt.univ-mrs.fr.

0022-4715/07/0800-0741/0 © 2007 Springer Science+Business Media, LLC

they decay exponentially fast at high temperatures, breaking the long range order, even though thermodynamic quantities remain smooth across the transition. For the XY system, these transitions were described by Kosterlitz and Thouless in term of topological excitations called vortices: while these vortices are organized into dipoles at low temperature, a disordered state emerges at the transition. But the observation of the spatial distribution of defects shows that it is not uniform; rather, defects tend to cluster at temperatures slightly larger than the transition temperature, and there are still large ordered domains where the spins are almost parallel (see e.g. Refs. 7, 13, 14, and references therein).

Here we consider a Kac version of the classical XY or Heisenberg model on a "large" lattice $\Lambda \subset \mathbf{Z}^2$. It was studied in particular by Buttà and Picco.[7] The hamiltonian (except for the interaction with the boundary) is of the form

$$H_\gamma(\sigma_\Lambda) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} \gamma^2 J(\gamma(i-j)) \langle \sigma_\Lambda(i), \sigma_\Lambda(j) \rangle$$

where γ is a small coupling constant and J denotes a cutoff function. Kac potentials for fixed γ have finite interaction, but as we take an appropriate limit $\gamma \to 0$, they can be considered, to this respect, as long range. Thus, they share some features with the mean field model, though exhibiting better mechanisms of phase transitions, which depend in particular on the dimension, as for the short range case. For the mean field model with $O^+(q)$ symmetry, $q = 2, 3$, we know that there is no phase transition for inverse temperature $\beta \leq q$ (Gibbs measure is supported at the absolute minimum of the free energy functional,) while there is a phase transition for $\beta > q$, with internal symmetry group $O^+(q)$.

When the model possesses internal symmetry and common features with the mean field, it is hard to expect vortices at low temperature, unless the symmetry is somehow broken, for instance if the system is subject to boundary conditions. This situation is met in other domains of Condensed Matter Physics, as in supraconductivity, where vorticity is created by an exterior magnetic flux, or for superfluids. In that case, phase transitions of matter are well described by critical points of free energy (Ginzburg-Landau) functionals (Refs. 3, 15, etc. . .)

One of the main process consists in averaging the spins σ_Λ over some mesoscopic boxes, so to define the magnetization $m = m_{\Lambda^*}$ on another "coarser" or "mesoscopic" lattice Λ^*. The free energy (or excess free energy) functional $F_{\beta,\gamma}(m)$ at inverse temperature β in case of Kac models with internal symmetry, can be simply derived from a suitable renormalization of H_γ making use of the entropy $I(m)$ for the mean field that corresponds to Van der Waals free energy $f_\beta(m) = -\frac{1}{2}|m|^2 + \frac{1}{\beta} I(m)$ (see Sec. 1).

To understand the significance of $F_{\beta,\gamma}(m_{\Lambda^*})$, one should think also of the formal "stationary phase" argument, as $\Lambda \to \infty$, which suggests that an important rôle in the averaging with respect to Gibbs measure, is played by configurations close to those which produce the local critical points of $F_{\beta,\gamma}$. This occurs in

computing correlations functions (see e.g. Ref. 21). These critical points consist in ground states, or metastable states.

They will be determined as the attractors of a certain dynamics, similar to this given by the "heat operator," but known in that context as the gradient-flow dynamics[8,9,18] .... Thus, we expect convergence of this dynamics toward a Gibbsian equilibrium, though this will not be rigorously established here.

Let us present our main results.

In Sec. 1, we describe in detail Kac's hamiltonian on the lattice, and recall briefly the renormalization scheme, that makes of the free energy functional a fairly good approximation for the density of Gibbs measure, i.e. $\mu_{\beta,\gamma,\Lambda} \approx \exp[-\beta\gamma^{-2}\mathcal{F}(m \mid m^c)]$. Here $\mathcal{F}(m \mid m^c)$ denotes the free energy functional subject to boundary conditions m^c on Λ^{*c}.

In Sec. 2, we present a simple, combinatorial averaging process, relating Kac's hamiltonian with the free energy functional. While exhibiting the main idea of renormalization, it is more suitable for effective computations on the lattice.

In Sec. 3, we study Euler-Lagrange equations for the free energy functional, and introduce the corresponding gradient-flow dynamics $m(x, t)$ (see Eq. (3.4)). Using that $\mathcal{F}(m \mid m^c)$ is a Lyapunov function, we show that $m(x, t)$ converges towards a critical point of $\mathcal{F}(m \mid m^c)$, generically, a local minimum. Unless $\beta \leq 2$, in which case $m = 0$ is the unique minimizer of $\mathcal{F}(m \mid m^c)$, as expected from the considerations above on the mean field, in general there cannot be uniqueness of the limiting orbits, at least for a finite lattice. Instead, local minimizers might depend on initial conditions $m(0, x)$ inside Λ^*.

Local minimizers however, have the property that their modulus be bounded by m_β, if this is true of the initial condition, and as expected from general results relative to the Gibbs states,(7) $|m|$ has to be close to m_β on large regions of Λ^*. Actually Proposition 3.4 indicates that if no vorticity is induced by the boundary, nor by the initial condition, then all magnetizations of the limiting configuration should point out in the same direction and have length about m_β.

In Sec. 4 we make numerical simulations, introducing a boundary condition with topological degree $d \in \mathbf{Z}$. Then, on the basis on conservation of vorticity, the limiting orbits for the gradient-flow dynamics show a vortex pattern. For $q = 2$, our main observation is the existence of vortices below the temperature of transition of phase for the mean field model, induced by the vorticity at the boundary of the lattice Λ, together with large ordered domains where the magnetizations m_{Λ^*} become parallel. We discuss in detail dependence on the shape of the lattice, and on initial conditions. In particular, the application of the "simulated annealing process" allows the limiting configurations to move away from local minima, and reach lower energies.

We also have some numerical evidence that, as in the case of Ginzburg-Landau functional, Kirchhoff-Onsager hamiltonian for the system of vortices

gives a fairly good approximation of the minimizing free energy, despite of the non-local interactions.

Finally, for $q = 3$, we examine in Sec. 5 the situation of spin-waves in the spirit of Belavin and Polyakov.

1. MEAN FIELD APPROXIMATION AND RENORMALIZED KAC'S HAMILTONIAN

Consider the lattice $\mathbf{Z}^2$, consisting in a bounded, connected domain Λ (the interior region), and its complement (the exterior region) Λ^c. In practice, we think of Λ as a large rectangle with sides parallel to the axis of $\mathbf{Z}^2$, of length of the form $L = 2^n$, $n \in \mathbf{N}$. Physical objects make sense in the thermodynamical limit $\Lambda \to \mathbf{Z}^2$, but in this paper we work in large, but finite domains.

To each site $i \in \mathbf{Z}^2$ is attached a classical spin variable $\sigma_i \in \mathbf{S}^{q-1}$, $q = 2, 3$. The configuration space $\mathcal{X}(\mathbf{Z}^2) = (\mathbf{S}^{q-1})^{\mathbf{Z}^2}$ is the set of all such classical states of spin; it has the natural internal symmetry group $O^+(q)$ acting on $\mathbf{S}^{q-1}$. The state $\sigma \in \mathcal{X}(\mathbf{Z}^2)$ will denote the map $\sigma\colon \mathbf{Z}^2 \to \mathbf{S}^{q-1}$, $i \mapsto \sigma(i)$. Given the partition $\mathbf{Z}^2 = \Lambda \cup \Lambda^c$, we define by restriction the interior and exterior configuration spaces $\mathcal{X}(\Lambda)$ and $\mathcal{X}(\Lambda^c)$, and the restricted configurations by σ_Λ and σ_{Λ^c}. The Hamiltonian in $\mathbf{Z}^2$ describes the interaction between different sites through Kac's potential defined as follows.

Let $0 \le J \le 1$ be a function on $\mathbf{R}^2$ with compact support and normalized by $\int_{\mathbf{R}^2} J = 1$. We can think of J also as a function on the lattice. There is a lot of freedom concerning the choice of J, but for numerical purposes, we take J as 1/2 the indicator function $\widetilde{J}$ of the unit rhombus with center at the origin, in other words $J(x) = J(|x|_1)$ where $|\cdot|_1$ is the ℓ^1 norm in $\mathbf{R}^2$. Thus the support of $\widetilde{J}$ is thought of as a chip of area 2, and considered as a function on the lattice, $\widetilde{J}$ takes the value 1 at the center, and 1/4 at each vertex, so that $\sum_{i\in\Lambda} J(i) = 1$. For γ of the form 2^{-m}, we set $J_\gamma(x) = \gamma^2 J(\gamma x)$, and extend the definition above in the discrete case so that J_γ enjoys good scaling properties, namely the stratum of full dimension (i.e. the set of points interior to the chip) has weight 1, the strata of dimension 1 (the points on the sides on the chip) have weight 1/2, and those of dimension 0 (the vertices of the chip) have weight 1/4. Thus, again $\sum_{i\in\mathbf{Z}^2} J_\gamma(i) = 1$. The discrete convolution on Λ is defined as usual. For instance, $(J_\gamma * \sigma)(i) = \sum_{j\in\mathbf{Z}^2} J_\gamma(i-j)\sigma(j)$ represents, with conventions as above, the mean value of σ over the chip of size γ^{-1} and center i, with a weight that depends on the stratum containing j.

Note that we could replace the lattice $\mathbf{Z}^2$ by the torus $(\mathbf{Z}/L\mathbf{Z})^2$ or the cylinder $(\mathbf{Z}/L\mathbf{Z}) \times \mathbf{Z}$, which amounts to specify periodic boundary conditions in one or both directions. Thermodynamic limit is obtained as $L \to \infty$.

The coupling between spin at site i and spin at site j is given by $J_\gamma(i-j)$; this is known as Kac's potential. From Statistical Physics point of view, Kac's

potential, for small γ, shares locally the main properties of the mean field, i.e. long range $\approx \gamma^{-1}$, large connectivity $\approx \gamma^{-2}$ of each site, small coupling constant $\approx \gamma^2$ of the bonds, and total strength of each site equal to 1.

Given the exterior configuration $\sigma_{\Lambda^c} \in \mathcal{X}(\Lambda^c)$, we define the Hamiltonian on $\mathbf{Z}^2$ as

$$H_\gamma(\sigma_\Lambda \mid \sigma_{\Lambda^c}) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j \in \Lambda} J_\gamma(i-j)\langle \sigma(i), \sigma(j)\rangle - \sum_{(i,j)\in \Lambda \times \Lambda^c} J_\gamma(i-j)\langle \sigma(i), \sigma(j)\rangle \tag{1.1}$$

where $\sigma(i)$, for simplicity, stands for $\sigma_\Lambda(i)$ or $\sigma_{\Lambda^c}(i)$, and $\langle \cdot, \cdot \rangle$ is the standard scalar product in $\mathbf{R}^q$. We note that as $J \geq 0$, the interaction is ferromagnetic, i.e. energy decreases as spins align.

We give here some heuristic derivation of the model we will consider, starting from principles of Statistical Physics. A thermodynamical system at equilibrium is described by Gibbs measure at inverse temperature β. We assume an a priori probability distribution ν for the states of spin, and because of the internal continuous symmetry of $\mathcal{X}(\Lambda)$, we take ν as the normalized surface measure on $\mathbf{S}^{q-1}$, i.e. $\nu(d\sigma_i) = \omega_q^{-1}\delta(|\sigma_i| - 1)d\sigma_i$, where ω_q is the volume of $\mathbf{S}^{q-1}$. Then Gibbs measure on $\mathcal{X}(\Lambda)$ with prescribed boundary condition σ_{Λ^c} is given by

$$\mu_{\beta,\gamma}(d\sigma_\Lambda \mid \sigma_{\Lambda^c}) = \frac{1}{Z^\Lambda_{\beta,\gamma}(\sigma_{\Lambda^c})} \exp[-\beta H_\gamma(\sigma_\Lambda \mid \sigma_{\Lambda^c})] \prod_{i\in\Lambda} \nu(d\sigma_\Lambda(i)) \tag{1.2}$$

where $Z^\Lambda_{\beta,\gamma}(\sigma_{\Lambda^c})$, the partition function, is a normalization factor which makes of $\mu_{\beta,\gamma}$ a probability measure on $\mathcal{X}(\Lambda)$, conditioned by $\sigma_{\Lambda^c} \in \mathcal{X}(\Lambda^c)$. It is obtained by integration of $\mu_{\beta,\gamma}(d\sigma_\Lambda \mid \sigma_{\Lambda^c})$ over $\Omega_0 = (\mathbf{S}^{q-1})^\Lambda$.

Since we are working on $\mathbf{Z}^2$, there exists, for any $\beta > 0, \gamma > 0$, an infinite volume Gibbs state $\mu_{\beta,\gamma}$, i.e. a (unique) probability distribution $\mu_{\beta,\gamma}$ on the space $\mathcal{X}$ of all configurations obtained by taking the thermodynamic limit $\Lambda \to \mathbf{Z}^2$. This measure satisfies suitable coherence conditions, i.e. DLR equations.

Nevertheless, we are faced with various difficulties, indicating that $\mu_{\beta,\gamma}(d\sigma_\Lambda \mid \sigma_{\Lambda^c})$ should not be the object to be directly considered. It is known that (and this goes back to Van Hove for the Ising ferromagnet, i.e. $q = 1$, see [see Ref. 20, p. 31,]) in order to understand thermodynamical properties for spins models, one should instead average spins over mesoscopic regions and consider the image of Gibbs measure through this transformation, the so called "block-spin transformation." So we introduce the empirical magnetization in the finite box $\Delta \subset \mathbf{Z}^2$

$$m_\Delta(\sigma) = \frac{1}{|\Delta|} \sum_{i\in\Delta} \sigma(i) \tag{1.3}$$

and given any $m \in \mathbf{R}^q$, $|m| \leq 1$, we define the canonical partition function in Δ as

$$Z_{\beta,\gamma}^{\Delta,\sigma_{\Delta^c}}(m) = \int_{(\mathbf{S}^{q-1})^\Delta} \exp[-\beta H_\gamma(\sigma_\Delta|\sigma_{\Delta^c})] \prod_{i\in\Delta} \nu(d\sigma(i))\delta(m_\Delta(\sigma) - m) \quad (1.4)$$

see [see Ref. 20, p. 31]. Also for Kac's model, it can be shown, taking the thermodynamical limit $\Delta \to \mathbf{Z}^2$, that the quantity

$$F_\gamma(\beta, m) = -\lim_{\Delta\to\mathbf{Z}^2} \frac{1}{\beta|\Delta|} \log Z_{\beta,\gamma}^{\Delta,\sigma_{\Delta^c}}(m) \quad (1.5)$$

is well defined, and doesn't depend on the boundary condition on Δ^c; it will be interpreted as the thermodynamic free energy density of the system. It is defined for a system with finite interaction of range γ^{-1}, i.e. before taking the mean field limit $\gamma \to 0$.

So far, parameter γ was kept small but constant; the limit $\gamma \to 0$ is called Lebowitz-Penrose limit. Let

$$f_\beta(m) = -\frac{1}{2}|m|^2 + \frac{1}{\beta} I(m) \quad (1.6)$$

be the free energy for the mean field, $I(m)$ denotes the entropy, see (2.2) below.

Lebowitz-Penrose theorem (in this simplified context) states that

$$\lim_{\gamma\to 0} F_\gamma(\beta, m) = \mathrm{CE}(f_\beta(m)) \quad (1.7)$$

See Ref. 7 for the case of a 1-d lattice and continuous symmetry, the proof can be carried over to $\mathbf{Z}^2$. Here CE denotes the convex envelope, to account for Maxwell correction law.

From this we sketch the renormalization procedure that leads to Lebowitz-Penrose theorem, as stated e.g. in Ref. 18, Theorem 3.2.1 for $q = 1$, following earlier results by Ref. 2 (actually, this is the "pressure" version of Lebowitz-Penrose theorem, but the argument can easily be adapted to free energy.) The following result will not be used in the sequel, we just give it for completeness.

Since we will take (in this paragraph) a continuous limit, we do assume that J is a differentiable function, not necessarily of compact support, but with $\|\nabla J\|_1 < \infty$ (the L^1 norm.) The lattice dimension d can be arbitrary. We set, following (1.3), $\Delta = \tilde{\Lambda}(x)$ and $m_\sigma(x) = m_{\tilde{\Lambda}(x)}(\sigma)$. Here $\tilde{\Lambda}(x)$ will be a square "centered" at a variable $x \in \mathbf{Z}^2$, with sides of length $\frac{\delta}{\gamma}$, δ of the form 2^{-p}, $p \in \mathbf{N}$, $\frac{\delta}{\gamma}$ much smaller than the diameter of Λ, but still containing many sites, for instance diam $(\tilde{\Lambda}(x)) = \gamma^{-1/2}$. Actually, we need to replace (1.3) by an integral, which allows to extend $x \mapsto m_\sigma(x)$ on $\mathbf{R}^d$, but for simplicity, we present it as a discrete sum.

The averages $m_\sigma(x)$ are called (empirical) magnetizations. The set of all such magnetizations $m_\sigma \in \mathbf{R}^q$ is the image of $\mathcal{X}(\mathbf{Z}^2)$ by the block-spin transformation $\pi_\gamma : \sigma \to m_\sigma$, and will be denoted by $\tilde{\mathcal{X}}(\mathbf{Z}^2)$. This is the set of "coarsed-grained" configurations.

It has again the continuous symmetry group $O^+(q)$, and this is a subset of the convex set $\mathcal{M}$ of all functions $m : \mathbf{Z}^2 \to \mathbf{R}^q$ such that $|m(x)| \leq 1$ for all x. When considering microscopic interior and exterior regions as above, the partition $\mathbf{Z}^2 = \Lambda \cup \Lambda^c$ induces of course restricted configuration spaces $\tilde{\mathcal{X}}(\Lambda^*)$ and $\tilde{\mathcal{X}}(\Lambda^{*c})$, where $\Lambda^* = \{x \in \mathbf{Z}^2 : \tilde{\Lambda}(x) \subset \Lambda\}$ and $\Lambda^{*c} = \{x \in \mathbf{Z}^2 : \tilde{\Lambda}(x) \subset \Lambda^c\}$. So let $m \in \mathcal{M}$.

We introduce as in (1.4) the canonical Gibbs measure conditioned by the external configuration $\sigma_{\Lambda^c} = \sigma^c$:

$$\begin{aligned}
&\mu_{\beta,\gamma,\Lambda}(d\sigma; m \mid \sigma^c) \\
&\quad = \frac{1}{Z_{\beta,\gamma,\Lambda}(\sigma^c)} \int_{\Omega_0} \prod_{i \in \Lambda} \nu(d\sigma(i)) \exp[-\beta H_\gamma(\sigma(i)|\sigma^c)] \delta(\pi_\gamma \sigma(i) - m) \qquad (1.8)
\end{aligned}$$

where the partition function $Z_{\beta,\gamma,\tilde{\Lambda}}(\sigma_{\tilde{\Lambda}^c})$ was defined in (1.2). For simplicity, we have removed the index Λ from σ. By definition of the image of Gibbs measure through the block-spin transformation, we have

$$\int_{|m|<1} dm \mu_{\beta,\gamma,\Lambda}\left(d\sigma; m \mid \sigma_\gamma^c\right) = 1 \qquad (1.9)$$

where dm is the normalized Lebesgue measure on the product space $\prod_{x \in \Lambda^*} B_q(0, 1)$. ($B_q(0, 1)$ denotes the unit ball of $\mathbf{R}^q$.) Let

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}(m \mid m^c) = &\frac{1}{4} \int_{\Lambda_0} dr \int_{\Lambda_0} dr' J(r - r')|m(r) - m(r')|^2 \\
&+ \frac{1}{2} \int_{\Lambda_0} dr \int_{\Lambda_0^c} dr' J(r - r')|m(r) - m(r')|^2 \\
&+ \int_{\Lambda_0} dr (f_\beta(m(r)) - f_\beta(m_\beta)) \qquad (1.10)
\end{aligned}$$

be the continuous, free energy in a box $\Lambda_0 \subset \mathbf{R}^2$ of fixed size L_0, rescaled from Λ by a factor proportional to γ. Here m_β is the critical value for the mean field f_β, see Sec. 2. Assume, as before, that the diameter of all block spins $\tilde{\Lambda}(x)$ equals $\gamma^{-1/2}$. Then we can give a special meaning to the approximation $\mu_{\beta,\gamma,\Lambda} \approx \exp[-\beta\gamma^{-d}\mathcal{F}(m \mid m^c)]$ (in the logarithmic sense) stated in the Introduction, by establishing the analogue of Ref. 2, Lemma 3.2 in case of continuous symmetry, improving also Ref. 7, Lemma 3.1. Let $\hat{e}$ be any (fixed) unit vector in $\mathbf{R}^q$, and $\widehat{m}_\beta$ the constant function on Λ equal to $m_\beta \widehat{e}$, which we extend to be equal to m^c on Λ^c. We have the following:

Proposition 1.1. *Let $q = 2$. With the notations above, there are constants $C_1, C_2 > 0$ such that for any coarse-grained configuration m on Λ^*:*

$$\begin{aligned}
-g(m) - (L_0\gamma^{-1})^d(C_2\beta\sqrt{\gamma}\|\nabla J\|_1 + C_1\gamma^{d/2}\log\gamma^{-1}) \\
\leq \log[\mu_{\beta,\gamma,\Lambda}(d\sigma; m \mid \sigma^c)] + \beta\gamma^{-d}\mathcal{F}(m \mid m^c) \\
\leq g(m) + \beta\gamma^{-d}\inf_{\widehat{e}\in\mathbf{S}^1}\mathcal{F}(\widehat{m}_\beta|m^c) \\
+ (L_0\gamma^{-1})^d(C_2\beta\sqrt{\gamma}\|\nabla J\|_1 + C_1\gamma^{d/2}\log\gamma^{-1})
\end{aligned}$$

where $g(m) = \log\prod_{x\in\Lambda^*}(1 - |m(x)|)^{-1/2}$.

See Ref. 10 for details. The divergence of $g(m)$ as $|m|$ gets close to 1 reflects the fact that the entropy density $I(m)$ is singular at $|m| = 1$, precisely where the mean field approximation breaks down, see also Ref. 7, Theorem 2.2. So the approximation $\mu_{\beta,\gamma,\Lambda} \approx \exp[-\beta\gamma^{-d}\mathcal{F}(m \mid m^c)]$ holds true when the magnetization stays bounded away from 1, as is the case in most applications.

Having this construction in mind, we shall proceed the other way around, and make a simple renormalization of H_γ (see Proposition 2.1 below). Actually our sole purpose is to give a discrete analogue for the excess free energy functional as in (1.10), most adapted to numerical experiments on the lattice.

2. RENORMALIZED HAMILTONIAN ON THE LATTICE

We restrict here to $q = 2$, in Sec. 5 we show how these considerations easily extend to $q = 3$. Recall from (1.6) the free energy for the mean field, $I(m)$ is the entropy function of the a priori measure ν, which can be computed following.[7] Namely, introduce the moment generating function

$$\phi(h) = \int_{S^{q-1}} e^{\langle h,\sigma\rangle} d\nu(\sigma) \tag{2.1}$$

and define $I(m)$ as Legendre transformation

$$I(m) = \hat{I}(|m|) = \sup_{h\in\mathbf{R}^q}(\langle h, m\rangle - \log\phi(h)) \tag{2.2}$$

We denote by I_n the modified Bessel function of order n. For $q = 2$, we have $\phi(h) = \hat{\phi}(|h|) = I_0(|h|)$. Function $\rho \mapsto \hat{I}(\rho)$ is convex, strictly increasing on [0, 1], $\hat{I}(\rho) \sim \rho^2$ as $\rho \to 0$, $\hat{I}(\rho) \sim -\frac{1}{2}\log(1-\rho)$, as $\rho \to 1$, and these relations can be differentiated. We have also $\hat{I}' = ((\log\hat{\phi})')^{-1}$ and $(\log\hat{\phi})'(t) = I_1(t)/I_0(t)$, this is of course a real valued function. The phase transition of mean field type is given by the critical point of the free energy f_β, i.e. the positive root of equation $\beta m_\beta = \hat{I}'(m_\beta)$, which exists iff $\beta > \hat{I}''(0) = 2$. So the critical manifold has again $O^+(2)$ invariance.

Now we specify the choice of mesoscopic boxes $\tilde{\Lambda}(x)$ and construct the excess free energy functional by the procedure sketched above. When $q = 2$, it is convenient to use the underlying complex structure of $\mathcal{X}(\mathbf{Z}^2)$, so we shall write (1.1), with obvious notations, as

$$H_\gamma(\sigma_\Lambda \mid \sigma_{\Lambda^c}) = -\frac{1}{2}\sum_{i,j\in\Lambda} J_\gamma(i-j)\sigma(i)\overline{\sigma(j)} - \mathrm{Re}\sum_{(i,j)\in\Lambda\times\Lambda^c} J_\gamma(i-j)\sigma(i)\overline{\sigma(j)} \tag{2.3}$$

We introduce in detail the mesoscopic ensemble averages, or coarse graining approximation to renormalize H_γ. Let $\delta > 0$ be small, but still much larger than γ, we take again $\delta = 2^{-m}$, for some $m \in \mathbf{N}$. We take for $\tilde{\Lambda}(x)$, $x \in \mathbf{Z}^2$, a square "centered" at x, of diameter $\frac{\delta}{\gamma}$, and of the form $\tilde{\Lambda}_\delta(x) = \{i = (i_1, i_2) \in \mathbf{Z}^2 : i_k \in \frac{\delta}{\gamma}[x_k, x_k + 1[\}$ where we define as in (1.2), $m_\delta(x) = (\frac{\gamma}{\delta})^2 \sum_{i\in\tilde{\Lambda}(x)} \sigma(i)$. Thus we magnify by a factor δ/γ the "coarse graining" (or mesoscopic ensemble) labelled by $x \in \mathbf{Z}^2$, to the "smooth graining" (or microscopic ensemble) labelled by $i \in \mathbf{Z}^2$. We have:

Proposition 2.1. *There is* $0 < \alpha < \frac{1}{4}$ *such that*

$$\left(\frac{\gamma}{\delta}\right)^2 H_\gamma(\sigma_\Lambda \mid \sigma_{\Lambda^c}) + U_{\mathrm{ext}}(m_\delta) + U_{\mathrm{int}}(m_\delta) - |\Lambda| f_\beta(m_\beta) = \mathcal{F}\big(m_\delta \mid m_\delta^c\big) + |\Lambda|\mathcal{O}(\delta^{2\alpha}) \tag{2.4}$$

where

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}\big(m_\delta \mid m_\delta^c\big) &= \frac{1}{4}\sum_{x,y\in\Lambda^*} J_\delta(x-y)|m_\delta(x) - m_\delta(y)|^2 \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{(x,y)\in\Lambda^*\times\Lambda^{*c}} J_\delta(x-y)|m_\delta(x) - m_\delta(y)|^2 + \sum_{x\in\Lambda^*} f_\beta(m_\delta(x)) - f_\beta(m_\beta) \\
U_{\mathrm{ext}}(m_\delta) &= \frac{1}{2}\sum_{(x,y)\in\Lambda^*\times\Lambda^{*c}} J_\delta(x-y)|m_\delta(y)|^2 \\
U_{\mathrm{int}}(m_\delta) &= \frac{1}{\beta}\sum_{x\in\Lambda^*} I(m_\delta(x))
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Proof: To start with, consider the first term in (1.1)

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\gamma}{\delta}\right)^2 \sum_{i,j\in\Lambda} J_\gamma(i-j)\sigma(i)\overline{\sigma(j)} &= \sum_{x,y\in\Lambda^*} J_\delta(x-y)m_\delta(x)\overline{m_\delta(y)} \\
&\quad + \gamma^2 \sum_{x,y\in\Lambda^*}\sum_{(i,j)\in\tilde{\Lambda}_\delta(x)\times\tilde{\Lambda}_\delta(y)} (J(\gamma(i-j)) - J(\delta(x-y)))\sigma(i)\overline{\sigma(j)}
\end{aligned} \tag{2.6}$$

and denote by $R(\Lambda^*)$ the second sum in the RHS of (2.6). Let $C_0 = B_1(0, \frac{1}{\delta})$ be the rhombus (or ℓ^1-ball in $\mathbf{R}^2$) of center 0 and radius $\frac{1}{\delta}$, corresponding to the shape of the interaction J, and for $x' \in \mathbf{Z}^2$, its translate $C_{x'} = \frac{1}{\delta}x' + C_0$, we denote also by $C^*_{x'} \subset \Lambda^*$ the corresponding lattice obtained from $C_{x'}$ by deleting 2 of its sides, so that $\Lambda^* = \bigcup_{x' \in \mathbf{Z}^2} C^*_{x'}$ (disjoint union), and Λ^* is covered by those $C^*_{x'}$ with $x' = (x'_1, x'_2), x'_j \in \{\pm 1, \dots, \pm\gamma L\}$. Let also $E(x, y) = \{(i, j) \in \tilde{\Lambda}_\delta(x) \times \tilde{\Lambda}_\delta(y) : J(\gamma(i - j)) - J(\delta(x - y)) \neq 0\}$. We can consider $E(x, y)$ as a symmetric relation $E : \Lambda^* \to \Lambda^*$, $E(x) = \{y \in \Lambda^* : E(x, y) \neq \emptyset\}$. By translation invariance of J, for any $x' \in \mathbf{Z}^2$, we have $|E(x, y)| = |E(x - \frac{1}{\delta}x', y - \frac{1}{\delta}x')|$, so that

$$\sum_{x,y \in \Lambda^*} |E(x, y)| \leq 4\left(\frac{\gamma L}{\delta}\right)^2 \sum_{x,y \in C^*_0} |E(x, y)| \tag{2.7}$$

With the choice of ℓ^1 norm, we have $E(x, y) \neq \emptyset$ for all $x, y \in C^*_0$, and $\max_{x \in C^*_0} |E(x)| = (1 + \frac{1}{2\delta})^2$, while $\min_{x \in C^*_0} |E(x)|$ is of order unity. In any case, $|E(x)|$ depends on x and δ, but not on γ, and it is easy to see that for some $0 < \alpha < \frac{1}{4}$, $\sum_{x \in C^*_0} |E(x)| = \mathcal{O}(\delta^{-2(1-\alpha)})$, $\delta \to 0$. [Actually, this kind of estimate is well-known, see e.g. Ref. 6 and references therein for related results, and applies whenever the support of J is a convex set.]

On the other hand, we have the rough estimate $|E(x, y)| \leq |\tilde{\Lambda}_\delta(x) \times \tilde{\Lambda}_\delta(y)| = (\frac{\delta}{\gamma})^4$, and since $|\sigma(i)| = 1$,

$$\left| \sum_{x,y \in C^*_0} \sum_{(i,j) \in \tilde{\Lambda}_\delta(x) \times \tilde{\Lambda}_\delta(y)} (J(\gamma(i - j)) - J(\delta(x - y)))\sigma(i)\overline{\sigma(j)} \right|$$
$$\leq \left(\frac{\delta}{\gamma}\right)^4 \sum_{x \in C^*_0} |E(x)| = \left(\frac{\delta}{\gamma}\right)^4 \mathcal{O}\big(\delta^{-2(1-\alpha)}\big)$$

This, together with (2.7), shows that $R(\Lambda^*) \leq \text{Const.}\, \delta^{2\alpha} L^2$. A similar argument gives an estimate on the remainder $R(\Lambda^* \mid \Lambda^{*c})$ for the second term in (1.1). Once we have replaced $(\frac{\gamma}{\delta})^2 \sum_{i,j} J_\gamma(i - j)\sigma(i)\overline{\sigma(j)}$ by $\sum_{x,y} J_\delta(x - y)m_\delta(x)\overline{m_\delta(y)}$ modulo $R(\Lambda^*)$ and $R(\Lambda^* \mid \Lambda^{*c})$, which verify the estimate given in (2.4), we use the identity

$$-2\,\mathrm{Re}\, m_\delta(x)\overline{m_\delta(y)} = |m_\delta(x) - m_\delta(y)|^2 - |m_\delta(x)|^2 - |m_\delta(y)|^2$$

and express the "density" term $\frac{1}{2}|m|^2$ in term of the mean field free energy $f_\beta(m)$ as in (2.1). Summing over (x, y) and making use of the fact that J_δ is normalized in $\ell^1(\mathbf{Z}^2)$ eventually gives the Proposition. □

Remark. (1) In homogenization problems, one usually associates the discrete configuration $\sigma \in \mathcal{X}(\Lambda)$ with the function σ_γ on $\mathbf{R}^2$ taking the constant value

$\sigma(i)$ on the square "centered" at γi, $i = (i_1, i_2)$, i.e. on $[\gamma i_1, \gamma(i_1 + 1)[\times[\gamma i_2, \gamma(i_2 + 1)[$. Furthermore the size of the domain Λ is normalized, so that taking the thermodynamic limit $\Lambda \to \infty$ is a problem of convergence for piecewise constant functions (or discrete measures) in some suitable functional space. As we have seen in Sec. 1, it is convenient to take a smooth interaction J. Thus a version of Proposition 2.1 was obtained in Ref. 7 by replacing the discrete average $m_\delta(x)$ around $x \in \Lambda$ by an integral, or in Refs. 8, 9, 18, ... by averaging J_γ over boxes of type $C_{x'}$ as above. (For short we refer henceforth to the review article Ref. 18). Since our ultimate purpose here consists in numerical simulations on a lattice, we chose instead to give a discrete renormalization for H_γ.

(2) Our renormalized Hamiltonian is now given by $\mathcal{F}(m_\delta \mid m_\delta^c)$, the quantities we have subtracted are $-U_{\text{ext}}(m_\delta)$, attached to the configuration space $\mathcal{X}(\Lambda^c)$, and $-U_{\text{int}}(m_\delta)$ that can be interpreted as β^{-1} times the entropy of the system in Λ. Note we have also included self-energy terms $i = j$ in the original Hamiltonian. Of course, relevance of this free energy to Gibbs measure (or rather its image through the block-spin transformation) after taking the thermodynamic limit, is a rather subtle question which will not be discussed here, since we content to finite lattices.

3. EULER-LAGRANGE EQUATIONS AND NON LOCAL DYNAMICS

We are interested in the critical points of $\mathcal{F}(m_\delta \mid m_\delta^c)$. Denote as usual resp. by ∂_m and $\overline{\partial}_m$ the holomorphic and anti-holomorphic derivatives, we have for $m = m_\delta$ (for short), and any tangent vector of type (1,0) in the holomorphic sense, $\delta m \in T_m^{(1,0)}\tilde{\mathcal{X}}(\mathbf{Z}^2)$:

$$\begin{aligned}\langle \partial_m \mathcal{F}(m \mid m^c), \delta m\rangle = \frac{1}{2} &\sum_{(x,y)\in\Lambda^*\times\Lambda^{*c}} J_\delta(x-y)(\bar{m}(x) - \bar{m}(y))\delta m(x) \\ &+ \frac{1}{2}\sum_{x,y\in\Lambda^*} J_\delta(x-y)(\bar{m}(x) - \bar{m}(y))\delta m(x) \\ &+ \sum_{x\in\Lambda^*}\left(-\frac{1}{2}\bar{m}(x) + \frac{1}{\beta}\frac{\partial I(m)}{\partial m}(x)\right)\delta m(x)\end{aligned}$$

Using again the normalization of J_δ in $\ell^1(\mathbf{Z}^2)$, the relation $I(m) = \hat{I}(|m|)$, and setting as before $J_\delta * m(x) = \sum_{y\in\mathbf{Z}^2} J_\delta(x-y)m(y)$, we obtain

$$\langle \partial_m \mathcal{F}(m \mid m^c), \delta m\rangle = \frac{1}{2}\sum_{x\in\Lambda^*}\left(-J_\delta * \overline{m}(x) + \frac{1}{\beta}\frac{\hat{I}'(|m|)}{|m|}\overline{m}(x)\right)\delta m(x) \quad (3.1)$$

Since $\mathcal{F}$ is real, this gives Euler-Lagrange equation:

$$-J_\delta * m(x) + \frac{1}{\beta}\frac{\hat{I}'(|m|)}{|m|}m(x) = 0 \tag{3.2}$$

Let $f = (\hat{I}')^{-1} = \frac{\hat{\phi}'}{\hat{\phi}}$ denote the inverse of the function $\hat{I}'$. Thus $f\colon [0, +\infty[\to [0, 1[$ is strictly concave, $f(0) = 0$, $f'(0) = 1/2$, and $f(\rho) \to 1$ as $\rho \to +\infty$. Since the inverse of $m \mapsto \hat{I}'(|m|)\frac{m}{|m|}$ defined on the unit disk is given by $n \mapsto f(|n|)\frac{n}{|n|}$, $n \in \mathbf{C}$, (3.2) takes the form

$$-m + f(\beta|J_\delta * m|)\frac{J_\delta * m}{|J_\delta * m|} = 0 \tag{3.3}$$

Following, Ref. 18 to find the critical points minimizing the excess free energy functional $\mathcal{F}$ we solve the "heat equation"

$$\frac{dm}{dt} = -m + f(\beta|J_\delta * m|)\frac{J_\delta * m}{|J_\delta * m|} \text{ in } \Lambda^* \tag{3.4}$$

with prescribed (time independent) boundary condition on Λ^{*c}, and initial condition $m_{|\Lambda^*} = m_0$. By Cauchy-Lipschitz theorem, Eq. (3.4) has a unique solution, defined for all $t > 0$, valued in $\tilde{\mathcal{X}}(\Lambda^*)$. Monotonicity of $\mathcal{F}$ is given in the following:

Proposition 3.1. *$\mathcal{F}$ is a Lyapunov function for Eq.* (3.4)*, i.e. there exists a free energy dissipation rate function $\mathcal{I} : \tilde{\mathcal{X}}(\Lambda^*) \to \mathbf{R}^+$, $\mathcal{I}(m) = 0$ iff m solves* (3.3)*, and*

$$\frac{d}{dt}\mathcal{F}(m(\cdot, t)|m^c) = -\mathcal{I}(m(\cdot, t))$$

along the integral curves of (3.4).

Proof: We have, using (3.1) and (3.4)

$$\begin{aligned}\mathcal{I}(m(\cdot, t)) = -\frac{d\mathcal{F}}{dt} &= -\left\langle \partial_m \mathcal{F}, \frac{\partial m}{\partial t}\right\rangle - \left\langle \bar{\partial}_m \mathcal{F}, \frac{\partial \bar{m}}{\partial t}\right\rangle \\ &= \frac{1}{\beta}\operatorname{Re}\sum_{x\in\Lambda^*}\left(-\beta J_\delta * \bar{m}(x) + \frac{\hat{I}'(|m|)}{|m|}\bar{m}(x)\right) \\ &\quad \times \left(m(x) - f(\beta|J_\delta * m|)\frac{\beta J_\delta * m}{|\beta J_\delta * m|}(x)\right)\end{aligned} \tag{3.5}$$

Let $m = \rho e^{i\theta}$, $\beta J_\delta * m = \rho' e^{i\theta'}$, $\mathcal{I}(m(\cdot, t))$ equals a sum of terms of the form

$$R = \frac{2}{\beta}(\rho' f(\rho') + \rho\hat{I}'(\rho) - (\rho\rho' + f(\rho')\hat{I}'(\rho))\cos(\theta - \theta'))$$

then using $(\rho - f(\rho'))(\hat{I}'(\rho) - \rho') \geq 0$ for any ρ, ρ' since $\hat{I}'$ is increasing, we obtain the lower bound $R \geq \frac{2}{\beta}(1 - \cos(\theta - \theta'))(\rho\rho' + f(\rho')\hat{I}'(\rho)) \geq 0$. And because $\rho\rho' + f(\rho')\hat{I}'(\rho) = 0$ iff $\rho = 0$ or $\rho' = 0$, this estimate easily implies the Proposition. □

From Proposition 3.1 and a compactness argument as in Ref. 18, follow that in the closure of each orbit of Eq. (3.4) there is a solution of (3.3), or equivalently, of Euler-Lagrange Eq. (3.2), i.e. a critical point for $\mathcal{F}$. As suggested by numerical simulations, this critical point is not unique, and depends on initial conditions (except of course when $\beta \leq 2$.) We expect however some uniqueness in the thermodynamical limit $\Lambda^* \to \infty$, modulo the symmetry group.

Now we give estimates on solutions of (3.4) or (3.3), borrowing some ideas to Ref. 18. Equation (3.4) can be rewritten in the integrated form:

$$m(x,t) = e^{-t}m(x,0) + \int_0^t dt_1 e^{t_1 - t} f(\beta|J_\delta * m|)\frac{J_\delta * m}{|J_\delta * m|}(x, t_1) \tag{3.6}$$

An effective construction of the solution is given by the "time-delayed" approximations. It will also be used, discretizing time, in the numerical simulations below. We define inductively $m_h(x,t)$, $h > 0$, on the intervals $[hk, h(k+1)[$, $k \in \mathbf{N}$, by $m_h(x,t) = e^{-t}m_0(x)$ for $0 \leq t < h$, and for $hk \leq t < h(k+1)$, $k \geq 1$:

$$m_h(x,t) = e^{kh-t}m_h(x,kh) + \int_{hk}^t dt_1 e^{t_1 - t} f(\beta e^{-h}|J_\delta * m_h|)\frac{J_\delta * m_h}{|J_\delta * m_h|}(x, t_1 - h) \tag{3.7}$$

Using Lipschitz properties of the coefficients, it is easy to see that, as $h \to 0$, $m_h(x,t)$ tends to the solution $m(x,t)$ of (3.4) uniformly for $x \in \Lambda^*$ and t in compact sets of $\mathbf{R}_+$. We prove estimates on $m(x,t)$ using sub- and supersolutions of (3.4). We start with:

Lemma 3.2. *Assume $\beta > 2$, and let $\lambda(t)$, $t > 0$ be the solution of*

$$\frac{d\lambda}{dt}(t) + \lambda(t) - f(\beta\lambda(t)) = 0, \quad \lambda(0) = \lambda \in [0, 1[\tag{3.8}$$

If $\lambda \geq m_\beta$, then $\lambda(t) \leq \lambda$ for all $t > 0$.

Proof: Write (3.8) in the integrated form as in (3.6) and consider the approximating sequence $\lambda_h(t)$. Since $\lambda_h(t)$ tends to $\lambda(t)$ uniformly on compact sets of $\mathbf{R}_+$, it suffices to show the property stated in the Lemma for λ_h, and $h > 0$ small enough. For $0 \leq t < h$, $\lambda_h(t) = \lambda e^{-t}$, so the property holds, while for $h \leq t < 2h$, performing the integration in (3.7), we get $\lambda_h(t) = e^{-t}\lambda + \int_h^t dt_1 e^{t_1 - t} f(\beta e^{-t_1}\lambda)$. Since $x > f(\beta x)$ iff $\beta x < \hat{I}'(x)$ (whence iff $x > m_\beta$), if $\lambda > m_\beta$, and $h > 0$ small

enough, then $f(\beta e^{-t_1}\lambda) \leq e^{-t_1}\lambda$, and $\lambda_h(t) \leq \lambda$. By induction, using also that f is increasing, but without changing $h > 0$ anymore, it is easy to see that this property carries over for all $t > 0$. By a continuity argument, this holds true for all $\lambda \geq m_\beta$. □

Then we claim that the modulus of the magnetization doesn't increase beyond m_β. More precisely we have:

Proposition 3.3. *Assume $\beta > 2$, and let $m(x,t)$ be the solution of* (3.4) *such that $m_0(x) = m(x,0)$ satisfies $|m_0(x)| \leq \lambda < 1$, for some $\lambda \geq m_\beta$, and all $x \in \mathbf{Z}^2$ (so including the boundary condition on the exterior region.) Then $|m(x,t)| \leq \lambda$ for all $x \in \mathbf{Z}^2$, and all $t > 0$.*

Proof: Equation (3.6) shows that

$$|m(x,t)| \leq e^{-t}|m_0(x)| + \int_0^t dt_1 e^{t_1 - t} f(\beta|J_\delta * m|)(x,t_1) \tag{3.9}$$

Now by the monotony properties of the convolution and the function f, we have $f(\beta|J_\delta * m|)(x,t_1) \leq f(\beta J_\delta * |m|)(x,t_1)$, so the solution $\lambda(t)$ of (3.8) with $\lambda(0) = \lambda$ is a supersolution for (3.9), and Lemma 3.2 easily implies the Proposition. □

We now look for lower bounds on $m(x,t)$. Since there are in general vortices, one cannot expect a global, positive lower bound on $|m(x,t)|$, unless there is no vorticity on initial and boundary values. On the other hand, we know (at least for a 1-d lattice, see Ref. 7), that the Gibbs measure of the configurations at equilibrium $m_\delta \in \tilde{\mathcal{X}}(\Lambda^* \mid \Lambda^{*c})$ with $|m_\delta(x)|$ arbitrarily close to m_β, has to be large. We have:

Proposition 3.4. *Assume $\beta > 2$, and let $m(x,t)$ be the solution of (3.4) such that $m_0(x) = m(x,0)$ as in Proposition* 3.3 *satisfies* $\mathrm{Re}(\nu m_0(x)) > \mu$, *for some fixed $\nu \in \mathbf{S}^1 \approx \{z \in \mathbf{C}, |z| = 1\}$ and $\mu > 0$ and all $x \in \mathbf{Z}^2$. Assume furthermore that μ satisfies $(\mu^2 + \lambda^2)^{1/2} < \beta f(\beta\lambda)$, where λ is as in Proposition* 3.3. *Then* $\mathrm{Re}(\nu m(x,t)) \geq \mu$ *for all $x \in \Lambda^*$, and all $t > 0$.*

Proof: As in the proof of Proposition 3.3 we make use of a comparison function. So let $\mu(t)$ verify the differential equation

$$\frac{d\mu}{dt}(t) + \mu(t) - \beta f(\beta\lambda)\frac{\mu(t)}{(\mu(t)^2 + \lambda^2)^{1/2}} = 0, \quad \mu(0) > \mu \tag{3.10}$$

Write (3.10) in the integrated form as in (3.6) and consider the approximating sequence $\mu_h(t)$ as in (3.7). We shall show that $\mu_h(t) \geq \mu$ for all $t > 0$ provided $\mu(0) > \mu$ verifies the inequality given in the Proposition. Namely,

this holds for $0 \le t < h$, because then $\mu_h(t) = \mu(0)e^{-t} \ge \mu$ for $h > 0$ small enough, while for $h \le t < 2h$, performing the integration as in (3.7), we get $\mu_h(t) = e^{h-t}\mu(0) + \beta f(\beta\lambda)\int_h^t dt_1 e^{t_1-t}\mu e^{-t_1}((\mu e^{-t_1})^2 + \lambda^2)^{-1/2}$. By hypothesis, $\mu e^{-t_1}\beta f(\beta\lambda)((\mu e^{-t_1})^2 + \lambda^2)^{-1/2} \ge \mu$ for h small enough. So again $\mu_h(t) \ge \mu$. By induction, using that the function $\rho \mapsto \rho(\rho^2 + \lambda^2)^{-1/2}$ is increasing on $\mathbf{R}_+$, it is easy to see that $\mu_h(t) \ge \mu$ holds for all $t > 0$. Because the coefficients of (3.10) are uniformly Lipschitz, $\mu_h(t)$ tends to $\mu(t)$ uniformly on compact sets in $\mathbf{R}_+$, and this property holds again for $\mu(t)$.

Now we turn to the equation for $m(x, t)$. Possibly after rotating the coordinates, we may assume $\nu = 1$, i.e. $\operatorname{Re} m_0(x) \ge \mu$ and all $x \in \Lambda^*$ (again, we have included the boundary condition in the initial configuration.) Write $m(x, t) = u(x, t) + iv(x, t)$, u, v real and take real part of (3.4). The integrating form of the resulting equation writes:

$$u(x, t) = e^{-t}u(x, 0) + \int_0^t dt_1 e^{t_1-t} f(\beta|J_\delta * m|)\frac{\beta J_\delta * u}{\beta|J_\delta * m|}(x, t_1) \tag{3.11}$$

As $\rho' \mapsto \frac{f(\rho')}{\rho'}$ is decreasing on $\mathbf{R}_+$, and by Proposition 3.2, $|J_\delta * m| \le (|J_\delta * u|^2 + \lambda^2)^{1/2}$, we have

$$\frac{f(\beta|J_\delta * m|)}{\beta|J_\delta * m|} \ge \frac{f(\beta(|J_\delta * u|^2 + \lambda^2)^{1/2})}{\beta(|J_\delta * u|^2 + \lambda^2)^{1/2}} \ge \frac{f(\beta\lambda)}{\beta(|J_\delta * u|^2 + \lambda^2)^{1/2}}$$

the last inequality because f is increasing. Since $u(x, 0) \ge \mu$, by continuity we have $u(x, t) > 0$ at least for small $t > 0$, and (3.11) gives

$$u(x, t) \ge e^{-t}u(x, 0) + \beta f(\beta\lambda)\int_0^t dt_1 e^{t_1-t}(J_\delta * u)((J_\delta * u)^2 + \lambda^2)^{-1/2}(x, t_1) \tag{3.12}$$

Now, using the monotony of the convolution, and again the fact that the function $\rho \mapsto \rho(\rho^2 + \lambda^2)^{-1/2}$ is increasing on $\mathbf{R}_+$, we can easily show that the solution $\mu(t)$ of (3.10) with $\mu(0) = \mu$ is actually a subsolution for (3.12), for all $t > 0$; the properties proved already for $\mu(t)$ then imply the Proposition. □

Of course, by continuity, Propositions 3.3 and 3.4 imply the corresponding estimates for the solutions of (3.3), or equivalently for the solutions of Euler-Lagrange Eq. (3.2). Our last result states that if $\beta \le 2$, then $m(x, t)$ tends to 0 $t \to \infty$, which is consistent with the absence of phase transition (or spontaneous magnetization) at high temperature.

Proposition 3.5. *Assume $\beta \le 2$, and let $m(x, t)$ be the solution of* (3.4). *Then $m(x, t) \to 0$ on Λ^* as $t \to +\infty$.*

Proof: Using that $f(\rho') \leq \frac{1}{2}\rho'$, all $\rho' > 0$, (3.9) shows that

$$|m(x,t)| \leq e^{-t}|m_0(x)| + \frac{\beta}{2}\int_0^t dt_1 e^{t_1 - t} J_\delta * |m|(x,t_1)$$

So by taking convolution

$$J_\delta * |m|(x,t_1) \leq e^{-t_1} J_\delta * |m_0|(x) + \frac{\beta}{2}\int_0^{t_2} dt_2 e^{t_2 - t_1} J_\delta^{*2} * |m|(x,t_2)$$

and integrating the resulting inequality:

$$|m(x,t)| \leq e^{-t}\left[|m_0(x)| + \frac{\beta t}{2} J_\delta * |m_0|(x) + \left(\frac{\beta}{2}\right)^2 T^{(2)}\big(e^{(\cdot)} J_\delta^{*2} * |m|(x,\cdot)\big)(t)\right]$$

where $T^{(k)}u(t) = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \ldots \int_0^{t_{k-1}} dt_k u(t_k)$ denotes the k-fold integral of u, and J_δ^{*k} the k-fold convolution product of J_δ with itself. By induction, we get:

$$|m(x,t)| \leq e^{-t}\left[|m_0(x)| + \frac{\beta}{2} t J_\delta * |m_0|(x) + \cdots + \left(\frac{\beta}{2}\right)^k \frac{t^k}{k!} J_\delta^{*k} * |m_0|(x)\right.$$
$$\left. + T^{(k+1)}\big(e^{(\cdot)} J_\delta^{*(k+1)} * |m|(x,\cdot)\big)(t)\right]$$

The series is uniformly convergent for t in compact sets so we can write

$$|m(x,t)| \leq e^{-t}\sum_{k=0}^{+\infty}\left(\frac{\beta}{2}\right)^k \frac{t^k}{k!} J_\delta^{*k} * |m_0|(x)$$

When $\beta < 2$, using $J_\delta^{*k} * |m|(x,0) \leq |m_0(x)| \leq 1$, it follows that $m(x,t) \to 0$ for all $x \in \Lambda^*$ as $t \to \infty$. This holds again for $\beta = 2$ since we may assume that m_0 has compact support, and we know (see Ref. 11, Lemma 1.3.6) that $J_\delta^{*k} \to 0$ uniformly on $\mathbf{R}^2$ (or on $\mathbf{Z}^2$ in the discrete case), as $k \to \infty$. □

4. VORTICES

We consider here the problem of finding numerically the critical points of Euler-Lagrange Eq. (3.3) by solving (3.4) subject to a boundary condition on Λ^{*c} presenting vorticity.

4.1. Generalities

First we recall some facts about the degree of a map. Let $m: \mathbf{R}^2 \to \mathbf{C}$ be a differentiable function, considered as a vector field on $\mathbf{R}^2$, and subject to the

condition $|m(x)| \to \ell > 0$ as $|x| \to \infty$ uniformly in $\hat{x} = x/|x|$. Then the integer

$$\deg_R m = \frac{1}{2\pi} \int_{|x|=R} d(\arg m) = \frac{1}{2i\pi} \int_{|x|=R} \frac{dm}{m} \tag{4.1}$$

is independent of R when $R > 0$ is large enough, is called the (topological) degree of m at infinity, and denoted by $\deg_\infty m$.

We define in the same way the local degree (or topological defect) $\deg_{x_0} m$ of m near x_0, provided $m(x) \neq 0$, $x \neq x_0$, by integrating on a small loop around x_0. The local degree takes values $d_j \in \mathbf{Z}$. When m has finitely many zeros x_j inside the disc of radius R, its total degree (or vorticity) is defined again as the sum of all local degrees near the x_j's. In many boundary value problems (or generalized boundary value problems, in the sense that the boundary is at infinity,) such as Ginzburg-Landau equations, total vorticity is conserved, i.e. $\deg_\infty m = \sum_j \deg_{x_j} m$. Generically $d_j = \pm 1$ ("simple poles.") Our aim is to check this conservation principle in the present situation.

We can define analogously the degree of a discrete map, which makes sense at least in the thermodynamical limit. If $m(x) = \rho(x)e^{i\theta(x)}$, the degree of m at infinity is the degree restricted to the lattice Λ^{*c}, e.g. by

$$d = \deg_{\Lambda^{*c}} m = \frac{1}{2\pi} \sum_j (\theta_{j+1} - \theta_j) \tag{4.2}$$

along some closed loop $\Gamma_\iota \subset \Lambda^{*c}$ encircling Λ^*, the sites along Γ_ι being labelled by j, assuming that this integer takes the same value on each Γ_ι.

The local degree near x_0, where $m(x_0) = 0$, is identified again by computing the angle circulation on a loop encircling x_0. Local degrees are also expected to take, generically, values ± 1.

We chose our parameters as follows. We start with prescribing the degree of the spin variable σ on Λ^c, and take on Γ_ι, the ι:th loop away from Λ, containing N_ι sites, ($N_\iota = 4\iota + P$, where P is the perimeter of Λ, we take enough ι's to cover the range of interaction), with a uniform distribution:

$$\sigma_j = \exp i(2\pi dj/N_\iota + \phi_0), \quad 1 \leq j \leq N_\iota \tag{4.3}$$

here ϕ_0 is a constant (e.g. $\phi_0 = 1$) that "breaks" the symmetry of the rectangle Λ. We shall also randomize these boundary conditions.

To this spin distribution on Λ^c, we apply the block spin transformation (1.3), so to have a distribution of magnetization on Λ^{*c}, then we prescribe initial conditions inside Λ^*. The simplest way is to take zero initial values, which gives a particular symmetry to the solution. Otherwise, we can choose them as random numbers, either small, or with absolute value less than m_β. All these cases will be discussed.

We usually fix the inverse temperature $\beta = 5$, so $m_\beta = 0.72$; the results do not depend on β in an essential way, we just observe that magnetization tends

to 0 as $\beta \to 2^+$. The diameter L of the lattice Λ ranges from 2^6 to 2^{10}, the size δ/γ of the diameter of the block-spin $\Delta(x)$ is set to 4 (most of the time) so the diameter L^* of the lattice Λ^* ranges from 2^4 to 2^8. The lattice is either a square, or a rectangle.

The size $1/\delta$ of the length of interaction in Λ^* ranges from 2 to 32, thus the corresponding interaction in Λ has length $1/\gamma = 4/\delta$ between 8 to 128.

Equation (3.4) is solved by "time-delayed" approximations as in (3.7), implemented by the second order trapezoidal method to compute the integrals.

These experiments lead to the following observations, vortices display in a different way, according to the initial configuration on Λ^*, but always obey the conservation of total vorticity.

4.2. Some Typical Configurations

We consider here the case of a uniform distribution of spins on the boundary.

The particular case of zero initial values and a square lattice, gives raise to interesting symmetries (or degeneracies) in the picture: namely, vortices tend to occupy most of Λ^* so to cope with the symmetry of the square. So for $d = 1$ there is a single vortex in the center, for $d = 2$ (cf Fig. 1(a)) a vortex of multiplicity 2, (unless the degeneracy is lifted and turns into 2 nearby vortices,) for $d = 4 - 1$, (cf Fig. 2(a)) one vortex of degree -1 surrounded by 4 vortices of degree $+1$ near the corners, for $d = 4$, 4 vortices of degree $+1$ near the corners, for $d = 4 + 1$, same configuration as for $d = 3$, for $d = 4 + 2$ the picture looks alike, with a double vortex at the center, for $d = 2 \times 4 - 1$, 4 new vortices appear near the center (cf Fig. 3(a)), etc. . . So the configuration depends essentially of the residue of d modulo 4: new vortices show up from the middle towards the corners along the diagonals of Λ^*.

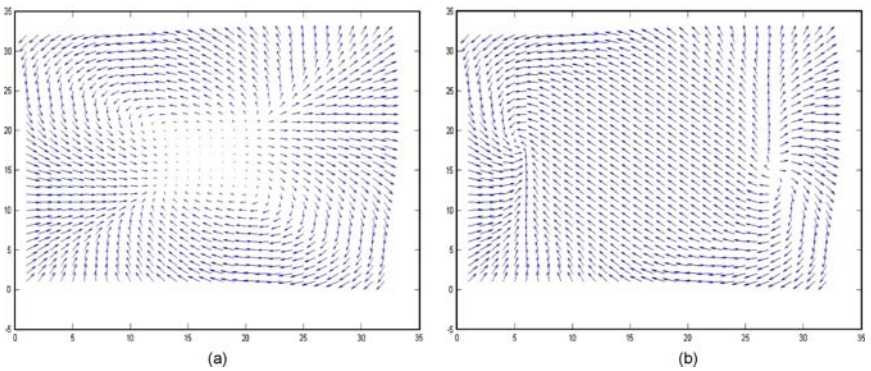

Fig. 1. (a) $L^* = 128$, $d = 2$, zero initial condition. (b) $L^* = 128$, $d = 2$, random initial condition.

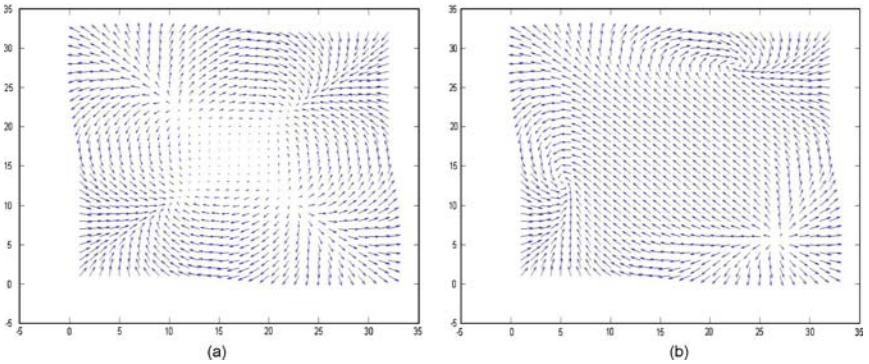

Fig. 2. (a) $L^* = 128$, $d = 3$, zero initial condition. (b) $L^* = 128$, $d = 3$, random initial condition.

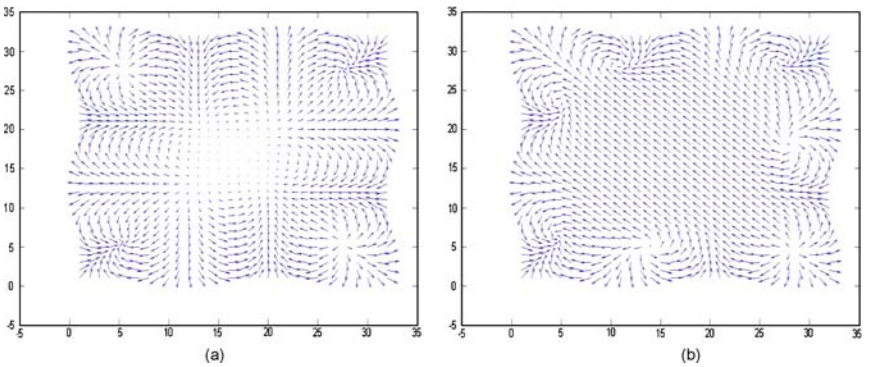

Fig. 3. (a) $L^* = 128$, $d = 7$, zero initial condition. (b) $L^* = 128$, $d = 7$, random initial condition.

Next we consider the case of a square lattice, but with random initial conditions, that is, we pick initial magnetizations with random direction and random length, provided the length is much smaller than m_β, typically $|m_0(x)| \leq 0.05$. Then vortices are simple (i.e. have local degree ± 1, total vorticity is of course conserved,) and tend to display at the periphery of Λ^*, in a pretty regular way, leaving some large ordered domain near the center.

Thus, these configurations maximize the area of the lattice where the magnetizations are aligned , with an absolute value close to m_β, (in accordance with the fact that energy H_γ decreases as the spins align.) Their direction, in general, points out along one of the diagonals of Λ^*. This is illustrated in Fig. 1, 2, 3(b) above, for a vorticity $d = 2, 3, 7$ respectively. In particular, Fig. 2 shows the topological bifurcation from $d = 4 - 1$ to $d = 3$. These simulations also suggest that the equilibrium configurations depend on the initial conditions, but exceptional

configurations due to symmetry, for zero initial conditions, are essentially removed as soon as a small disorder is introduced.

Now we vary the shape of the lattice, changing the square into a rectangle, keeping in mind that thermodynamic limit, most of the time, should be taken in the sense of Fisher, i.e. the length of the rectangle Λ^* doesn't exceed a constant times $|\Lambda^*|^{1/2}$. As expected, vortices tend to align along the largest dimension, but again, limiting configurations depend on whether the initial condition inside Λ^* is set to zero or not.

Thus, for zero initial condition, vortices display along the largest median of Λ^*, with possible extra vortices near the corners (inheriting the features of the square lattice.) Namely, they tend to repel each other so the energy cost in clustering is minimized by occupying the corners. Typically, such configurations occur if $d \geq 4$ and the length of Λ^* is only twice its width. But for sufficiently long lattices, or small degree, they just stand the median line. See Fig. 4(a) and 4(c).

For small random initial conditions as above (Fig. 4(b)), we recover the general picture of square lattices, i.e. vortices set along the boarder of Λ^*, leaving a large space in the middle with parallel magnetizations. In any case, degeneracies are lifted, and all vortices have degree $+1$.

4.3. The Simulated Annealing

If we increase the initial conditions, still keeping $|m_0(x)| \leq m_\beta$, we obtain similar pictures, but with a non uniform distribution of defects: conservation of total degree holds, but at the same time, many vortices spread over the lattice, and the corresponding long range order region shrinks correspondingly. This suggest that the gradient-flow dynamics converges only to a local minimum of the free energy.

For reaching lower energies, we let the system explore other regions of the configuration space. This can be achieved through simulated annealing, see e.g. Ref. 12. Replace the dynamics (3.4) by

$$\frac{dm}{dt} = -m + f(\beta(t)|J_\delta * m|)\frac{J_\delta * m}{|J_\delta * m|} \text{ in } \Lambda^* \tag{4.4}$$

where $\beta(t)$ depends continuously on $t \in [0, t_1]$, starting with $\beta_0 < \beta_1 = \beta$, with negative slope at $t = 0$, so that the system is heated initially up to a peak $\beta_2^{-1} \approx 1/2$ (the critical temperature) around $t = t_2$, and then gradually cooled down to β at $t = t_1$. Function $\beta(t)$ is oscillating between successive warm and cool periods, so to "shake" sufficiently the system. Then we keep the temperature constant till we reach equilibrium.

It is not difficult to optimize, empirically, the annealing function $\beta(t)$, and our choice was the following.

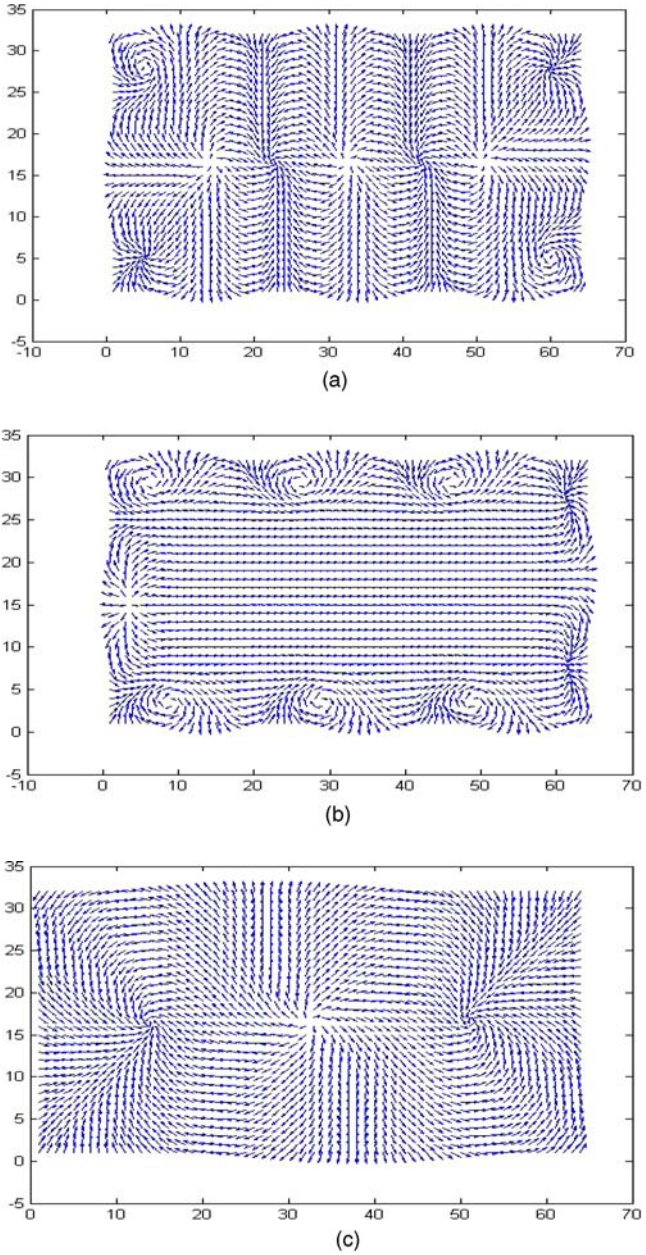

Fig. 4. (a) $L^* = 256$, $\ell^* = 128$, $d = 9$, zero initial condition. (b) $L^* = 256$, $\ell^* = 128$, $d = 9$, random initial condition. (c) $L^* = 256$, $\ell^* = 128$, $d = 3$, zero initial condition.

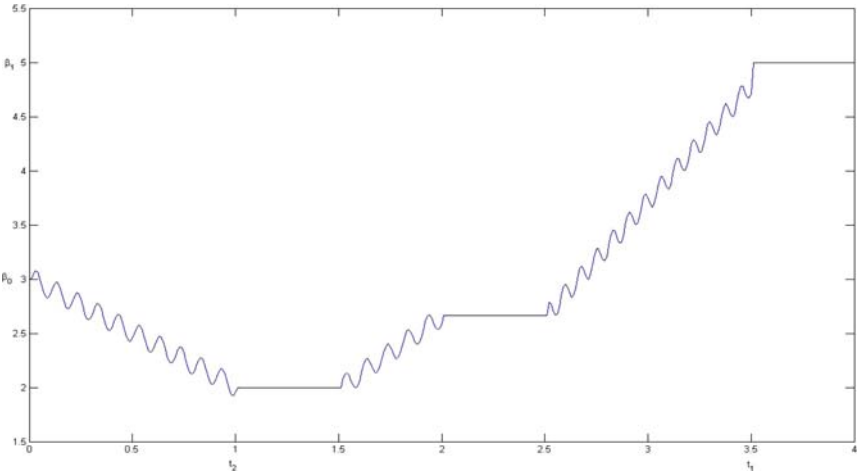

Fig. 5. The annealing function $\beta(t)$.

We applied this method first to the case of a square lattice, when the equilibrium configuration corresponding to some total degree d_0 is used as an initial condition for a dynamics with degree d_1. We fix $\beta_1 = 5$, $L^* = 128$.

Consider first the case $d_1 = 3$, the equilibrium configuration, with 0 initial condition, is given in Fig. 2(a), and the corresponding free energy is $E = 99$. We use simulated annealing to compute the equilibrium, starting from $d_0 = 4, -3, 5$, and find respectively $E = 23, 53, 51$, see Fig. 6. So the energies obtained this way are less than with zero initial conditions, though the initial magnetizations are rather large. At the same time, symmetries get lost. Thus the cost for the 3 vortices to be aligned along one of the diagonals of the square as in Fig. 6(b) is less than to form a domino near the center as in Fig. 2(a).

In Fig. 7 we show how to pass from $d_0 = 3$ to $d_1 = 5$. The configuration with zero initial condition and $d_1 = 5$ is given in Fig. 5(a), and energy is $E = 113$. Taking instead the equilibrium configuration for $d_0 = 3$ as an initial condition yields, without simulated annealing, to Fig. 7(b), with $d_1 = 6 - 1$, and $E = 216$. Using simulated annealing gives instead Fig. 7(c), which looks like Fig. 7(a), and corresponding energy $E = 115$. Actually, the 3 vortices on the anti-diagonal of the square in Fig. 7(b) collapse into a single one at the center.

Note also that the degeneracy in case of $d_1 = 2$ (a vortex of multiplicity 2 at the center for zero initial condition, $E = 24$,) is lifted through annealing from $d_0 = 4$: the 2 vortices move far apart, and $E = -19$. Other applications of simulated annealing will be given in the next subsection.

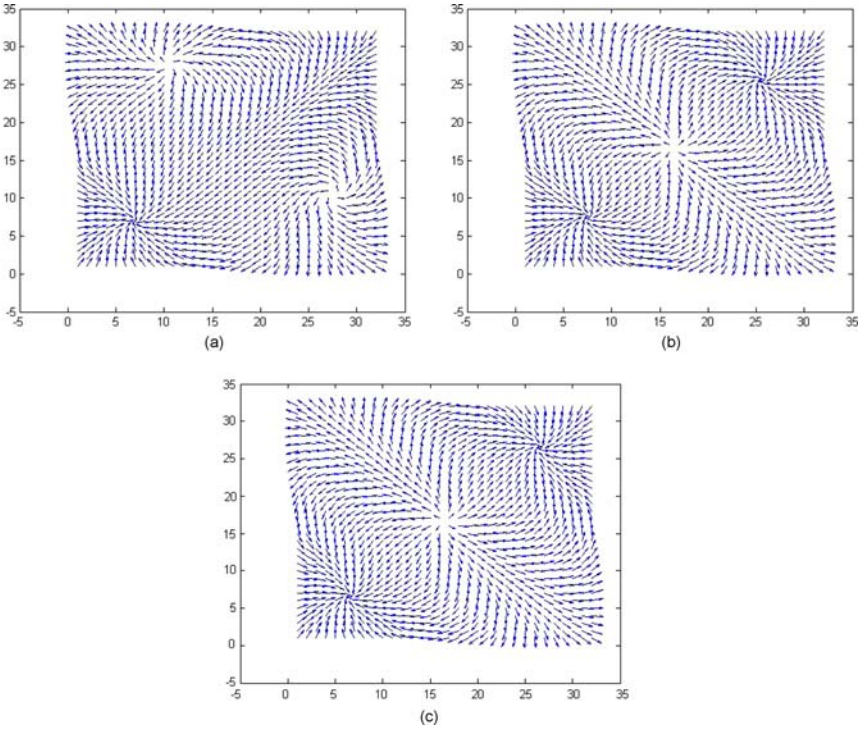

Fig. 6. (a) $d_0 = 4, d_1 = 3, E = 23$. (b) $d_0 = -3, d_1 = 3, E = 53$. (c) $d_0 = 5, d_1 = 3, E = 51$.

4.4. More General Configurations

We examine here the rôle of random fluctuations in the distribution of spins on the boundary Λ^{*c}, so to account for possible defects in the structure. With notations of Sec. 4.1, we take $\sigma_j = \exp(2i\pi d(j/N_\iota + \varepsilon_{\iota,j}))$, where $\varepsilon_{\iota,j}$ are uniform i.i.d. random variables with $\sum_{j=1}^{N_\iota} \varepsilon_{\iota,j} = 0$, and $(\varepsilon_{\iota,j})_{\iota,1\le j\le N_\iota-1}$, and variance small enough. The total degree is still equal to d, but the variation of the direction of spins at the boundary is not uniform. As expected, the picture does not depart drastically from the previous cases. Vortices change their place according to the initial value, and tend again to gather inside Λ^*, but take always the value $+1$ (assuming $d > 0$.) The sole effect of randomness in the boundary condition is to change the place of the vortices: namely they tend to get even closer to the boundary, so to leave larger ordered regions in the middle.

In Fig. 8(a,b), we have shown equilibrium configurations, obtained for $d = 7$, from the same initial and boundary conditions, but with (resp. without) simulated annealing. Initial magnetization has been chosen at random, but a priori larger

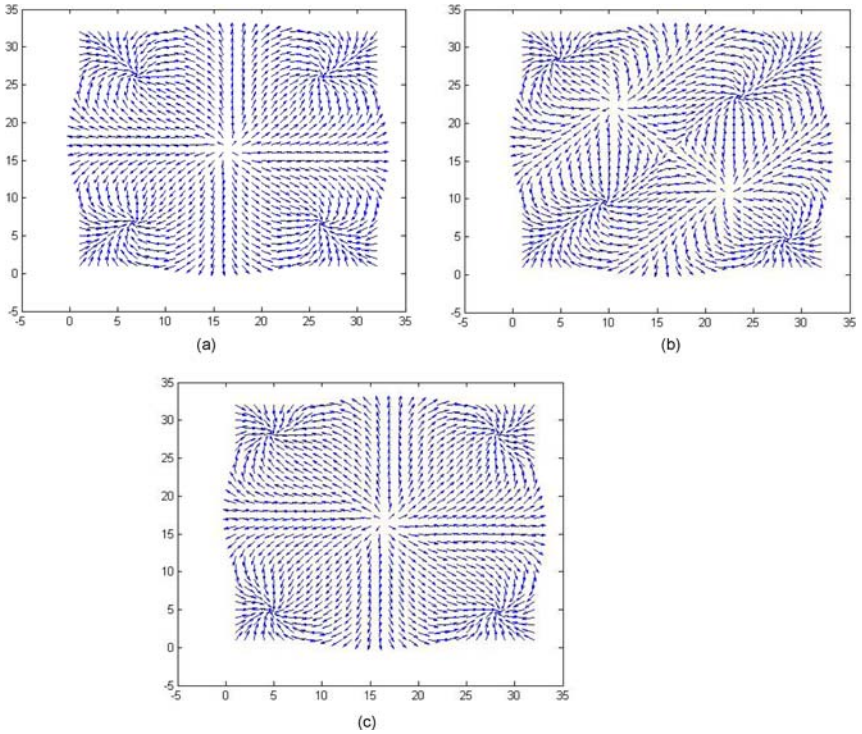

Fig. 7. (a) $d_1 = 5, d = 7$, zero initial condition. (b) $d_0 = 3, d_1 = 5$, without annealing. (c) $d_0 = 3, d_1 = 5$, with annealing.

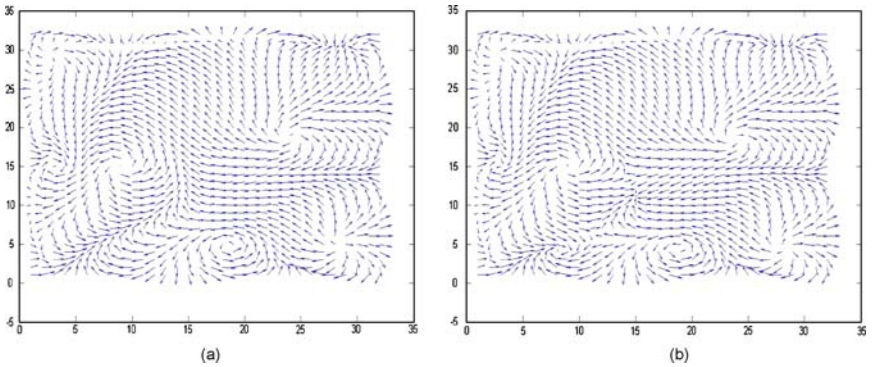

Fig. 8. (a) $d = 8 - 1$, $E = 277$, without annealing. (b) $d = 7$, $E = 240$, with annealing.

than before, the sole requirement being that $|m_0(x)| \leq m_\beta$. Random fluctuations on the boundary have been prescribed as above.

4.5. The Kirchoff-Onsager Correction

Another interesting result concerns the value of energy for the minimizing configurations. In case of Ginzburg-Landau equation, $-\Delta\psi + (|\psi|^2 - 1)\psi = 0$, where ψ is subject to a boundary condition with vorticity, it is known that energy of the minimizer vs. vorticity, has an asymptotic, as the n vortices x_j become distant from each other, the leading order term is given by a"proper energy," proportional to $\sum_{i=1}^{n} d_i^2$, and the next correction is the inter-vortex energy given by so-called Kirchhoff-Onsager hamiltonian, of the form

$$W_0 = -\pi \sum_{i \neq j} d_i d_j \log |x_i - x_j| \tag{4.5}$$

(see e.g. Ref. 3, 16 for precise statements.) It can be interpreted as the electrostatic energy for a system of charges d_j interacting through Coulomb forces. It turns out that, despite forces in action have no electrostatic character, Kirchhoff-Onsager correction holds with a good accuracy in our case, even for long range interactions (i.e. for small γ,) but provided the inter-vortex distance is bounded below by the range of the interaction. We have listed below some graphs of $K = \mathcal{F}(\cdot|m^c) - W_0$, obtained with uniform boundary conditions, which show that K roughly grows linearly with d (cf. Fig. 9).

Figure 9(b) shows that several random trials for initial conditions give approximately the same renormalized energy K.

5. THE HEISENBERG MODEL

We consider here "stationary spin waves" for $q = 3$, in a setting similar to this of Belavin and Polyakov, Ref. 4, 17, Chap. 6.

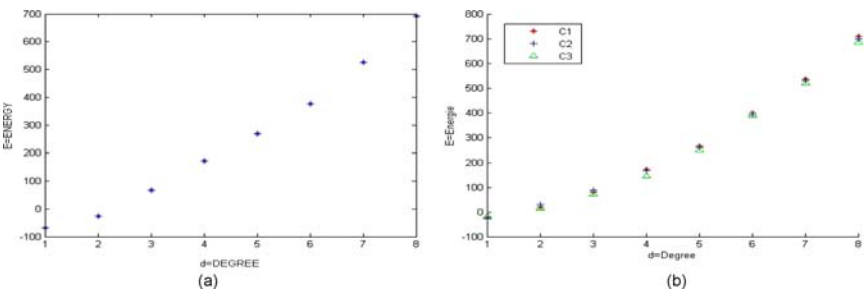

Fig. 9. (a) $L^* = 128$, zero initial condition. (b) $L^* = 128$, 3 random initial conditions.

Let us first recall the model. We look for minimizers of $H(\sigma) = \int_{\mathbf{R}^2} |\nabla\sigma(x)|^2 dx$, among all configurations $\sigma : \mathbf{R}^2 \to \mathbf{S}^2$ subject to the condition $\sigma(x) \to (0, 0, 1)$ as $|x| \to \infty$. This boundary condition not only ensures a finite energy on the whole plane, but also allows to extend σ as a map on the one point compactification $\mathbf{S}^2$ of $\mathbf{R}^2$, so we may consider its degree $D(\sigma) \in \mathbf{Z}$, or winding number, on the sphere. Differentiable maps $\mathbf{S}^2 \to \mathbf{S}^2$ are classified by their degree, in the sense that $\sigma, \tilde{\sigma} : \mathbf{S}^2 \to \mathbf{S}^2$ are homotopic iff they have the same degree. The main result of Belavin and Polyakov asserts that there exist solutions of that minimization problem, with given degree; they are called instantons, and expressed (in suitable coordinates associated with the stereographic projection $\mathbf{C} \to \mathbf{S}^2$) by arbitrary meromorphic functions of the form $\prod_{j=1}^{d} \frac{z-a_j}{z-b_j}$. Here $(a_j, b_j) \in \mathbf{C}^2$ play the role of vortices in the case $q = 2$; they have a natural structure of dipoles, with poles placed at a_j and b_j. So the minimization problem (for a given homotopy class) has a continuous degeneracy, parametrized by the family (a_j, b_j) which we interprete as moduli. The energy of all such instantons is a constant proportional to D.

It is then natural to consider the contribution of all instantons of same energy D. Somewhat heuristically,[17] obtains, after summing over $D \in \mathbf{N}$, a grand partition function of the form

$$\Xi(\lambda) = \sum_{D\geq 0} \frac{\lambda^{2D}}{(D!)^2} \int \prod_j da_j db_j \exp\Bigg[\sum_{i<j} (\log|a_i - a_j|^2 + \log|b_i - b_j|^2) - \sum_{i,j} \log|a_i - b_j|^2\Bigg] \tag{5.1}$$

and each instanton behaves as if it consisted of a pair of opposite Coulomb charges, placed at a_j and b_j. Since the 2 dimensional Coulomb energy is given by $(1/4\pi)\log|a_j - b_j|^2$, the exponent in (5.1) reminds us of the Kirchoff-Onsager hamiltonian (4.5), and formally, $\Xi(\lambda)$ is the grand partition function of a plasma at inverse temperature $\beta = 4\pi$.

It is not known to which extend these instantons are stable relatively to perturbations of $H(\sigma)$, e.g. due to the influence of temperature.

We start with some considerations on the degree of a map on $\mathbf{Z}^2$. Let $m : \mathbf{S}^2 \to \mathbf{S}^2$ be a discrete map, defined through the stereographic projection $\mathbf{Z}^2 \to \mathbf{S}^2$, the one point compactification of $\mathbf{Z}^2$ given by $\bar{\mathbf{Z}}^2 \approx \mathbf{Z}^2 \cup \{\omega\}$. The coordinates on the source and target space are given by the polar and azimuthal angles (θ, φ), and $(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})$ respectively.

Consider the complex $\mathcal{C} = (\mathbf{Z}^2, L_{\mathbf{Z}^2}, P_{\mathbf{Z}^2})$ and its homology group. Here $L_{\mathbf{Z}^2}$ is the set of bonds of unit length indexed by closest neighbors $x, x' \in \mathbf{Z}^2$, and $P_{\mathbf{Z}^2}$ the set of chips of unit area (plaquettes) around $x \in \mathbf{Z}^2$. See e.g.[1] for concepts of polyedral topology.

We define as usual the discrete jacobian $\operatorname{Jac} m(x) = \frac{\partial(\tilde{\theta},\tilde{\varphi})}{\partial(\theta,\varphi)}$ computed on the plaquette around x. Let $y_0 = m(x_0), x_0 \in \mathbf{Z}^2$ be a regular value of m, i.e. $\operatorname{Jac} m(x_0) \neq 0$. The integer

$$D_{x_0}(m) = |\{x \in m^{-1}(\{y_0\}) : \det \operatorname{Jac} m(x) > 0\}| \\ - |\{x \in m^{-1}(\{y_0\}) : \det \operatorname{Jac} m(x) < 0\}|$$

is called local degree of m at x_0. In case where $D_{x_0}(m)$ takes the same value for all $x_0 \in \mathbf{Z}^2$, we call it the degree of m and denote by $D(m)$. This is the general case, and $D(m)$ counts the number of coverings of the sphere. Then $D(m)$ will be given by the discrete analogue of the integral

$$D(m) = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} d\theta \sin\theta \frac{\partial(\tilde{\theta}, \tilde{\varphi})}{\partial(\theta, \varphi)},$$

computed on the complex $\mathcal{C}$ defined above. When the values of m avoid a neighborhood of ω, we put $D(m) = 0$. If $D_{x_0}(m) = d$ for all x_0 in a neighborhood of $\omega \in \mathbf{Z}^2$, we call d the degree of m at infinity and denote $d = D_\omega(m)$. See e.g. Ref. 5 and references therein for a more complete study of topological properties of discrete maps.

We conjecture that for Kac-Heisenberg model, if m is a minimizer for the free energy $\mathcal{F}(\cdot, |m^c)$, i.e. m solves (3.2) or (3.3) with $D_\omega(m_0) = d$, after we take the thermodynamical limit $\Lambda \to \mathbf{Z}^2$, then either m vanishes at some point $x \in \mathbf{Z}^2$, or $\frac{m}{|m|} : \mathbf{Z}^2 \to \mathbf{S}^2$ has degree D. In practice however, we have only observed configurations with $0 \leq D \leq d$. So m shares some features with Belavin and Polyakov instantons, though with less symmetries or degeneracies, and a possible "degree loss" from infinity, since we are not really working in the thermodynamical limit.

It is straightforward to extend the constructions of Secs. 2 and 3 to the case $q = 3$. Let us sketch the main steps. The moment generating function is now $\phi(h) = \hat{\phi}(|h|) = \frac{\sinh|h|}{|h|}$, see Ref. 7, and for the entropy function $I(m) = \hat{I}(|m|)$ defined in (2.2), we have $\hat{I}' = ((\log\hat{\phi})')^{-1}$, and $(\log\hat{\phi})'(t) = L(t) = \frac{\cosh t}{\sinh t} - \frac{1}{t}$ (the function f before) is known as Langevin function. This is a concave, increasing function on $\mathbf{R}^+$, $L(t) \sim t/3$ as $t \to 0$, and $L(t) \to 1$ as $t \to \infty$. There is a phase transition of mean field type i.e. a positive root for equation $\beta m_\beta = \hat{I}'(m_\beta)$, iff $\beta > \hat{I}''(0) = 3$. We derive Euler-Lagrange equations for $\mathcal{F}(m_\delta \mid m_\delta^c)$, as in Sec. 3 (here we simply see m as a vector in the unit ball of $\mathbf{R}^3$, the complex representation of m was not essential,) and find

$$-m + L(\beta|J_\delta * m|)\frac{J_\delta * m}{|J_\delta * m|} = 0 \tag{5.2}$$

For the corresponding gradient-flow dynamics (3.4), there is again a free energy dissipation rate function, which we compute exactly as in Proposition 3.1.

Furthermore, we have estimates on $m(x,t)$ as in Propositions 3.3 and 3.4; more precisely.

Proposition 5.1. *Assume $\beta > 3$, and let $m(x,t)$ be the solution of* (5.2) *such that $m_0(x) = m(x,0)$ satisfies $|m_0(x)| \le \lambda < 1$, for some $\lambda \ge m_\beta$, and all $x \in \mathbf{Z}^2$. Then $|m(x,t)| \le \lambda$ for all $x \in \Lambda^*$, and all $t > 0$. Assume moreover the z-component $m_0^z(x)$ of $m_0(x)$ satisfies $m_0^z(x)) \ge \mu > 0$, for all $x \in \mathbf{Z}^2$, and some $\mu > 0$ with $(\mu^2 + \lambda^2)^{1/2} < \beta L(\beta\lambda)$. Then $m^z(x,t)) \ge \mu$ for all $x \in \Lambda^*$, and $t > 0$.*

So choosing $\sigma^z(i) > 0$ on Λ^c (i.e. spins pointing to the z direction at the boundary) and also initial condition $m_0^z(x) > 0$ on Λ^*, Proposition 5.1 shows that $m^z(t,x) > 0$ stays bounded away from zero uniformly in time, so is the case for the limiting orbit $m(x)$ on $\mathbf{Z}^2$, thus $D(m) = 0$. Our conjecture is again comforted by the following numerical experiments, which also show that $m(x)$ depends in a more essential way on the initial conditions than for the planar rotator.

We start with prescribing the spins variables on Λ^c as in (4.3), taking a family of loops $\Gamma_i \subset \Lambda^c$, $i = 0, 1, 2 \ldots$ along which $\sigma_j = (\cos\Phi_{ij}\sin\theta_i, \sin\Phi_{ij}\sin\theta_i, \cos\theta_i)$, $\Phi_{ij} = 2\pi dj/N_i + \phi_0$, and $0 \le \theta_i \le \theta_0$, decreasing with i, $\theta_{i_0} = 0$ on the last loop Γ_{i_0} interacting with Λ, and θ_0 small enough to fit with Belavin-Polyakov conditions. So fixing the precession number $d = D_\omega(m)$, we get a "stationary spin wave pattern" on the boundary. Inside Λ^* we choose random initial values, $|m_0(x)| \le m_\beta$.

We represent here a few sample of (x,y) and (y,z) projections of the field m, which yield the following observations. In general, the solution is very sensitive to the choice of initial conditions, and many patterns show up, which reflects the moduli in Belavin-Polyakov model. For relatively small β (e.g. $\beta = 5$ with $L^* = 128$) spin waves fluctuate, and m^z can take negative values, but the domain where spins point downwards is not sufficiently large to start revolving around the sphere. So the degree is $D = 0$. We still get 2 dimensional "vortices" in the (x,y) plane, there are typically 1, 2 or 3 such "vortices"when $d = 1$, and up to 4 when $d = 2$. Exceptionally, we can also get a 3 dimensional vortex, i.e. x_0 such that $m(x_0)$ becomes quite small. Such a m is no longer homotopic to a function on the sphere.

Increasing β generally prevents getting too small values for m, and allows larger negative m^z. For $\beta = 10$ and $L^* = 128$, there are random trials where the winding number D is non zero. Thus Fig. 10 is obtained for $d = 1$ and suggests also $D = 1$. In Fig. 11 we still have $d = 1$, but $D = 0$, although 2 large symmetric regions contain negative values of m^z. Figure 12 gives an example where $D = 1$ for $d = 2$. Nevertheless, we have not observed winding numbers $D = 2$ for $d = 2$.

Further increasing β for a given L^* doesn't reveal anything new; namely, if small temperature seems to favors long range order and existence of non trivial instantons, it also creates stiffness and a need for space. In any case, one should

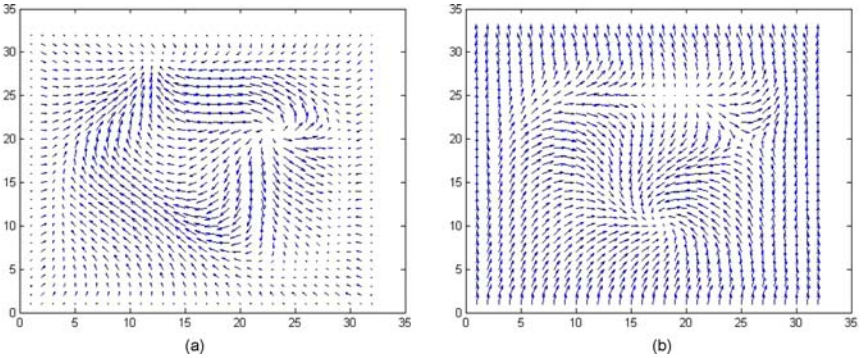

Fig. 10. (a) $L^* = 128$, $d = 1$, XY plane. (b) $L^* = 128$, $d = 1$, YZ plane.

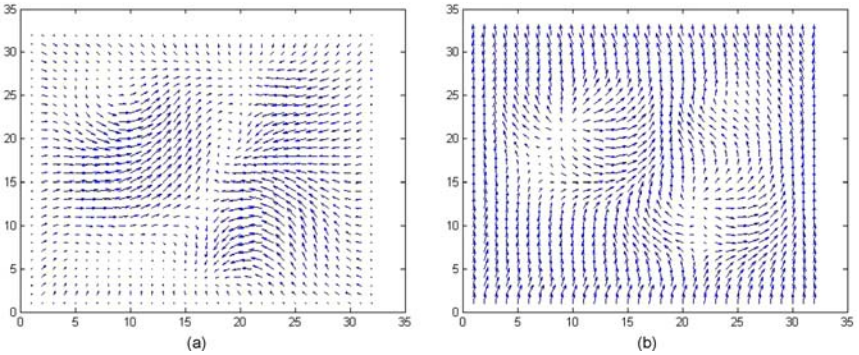

Fig. 11. (a) $L^* = 128$, $d = 1$, XY plane. (b) $L^* = 128$, $d = 1$, YZ plane.

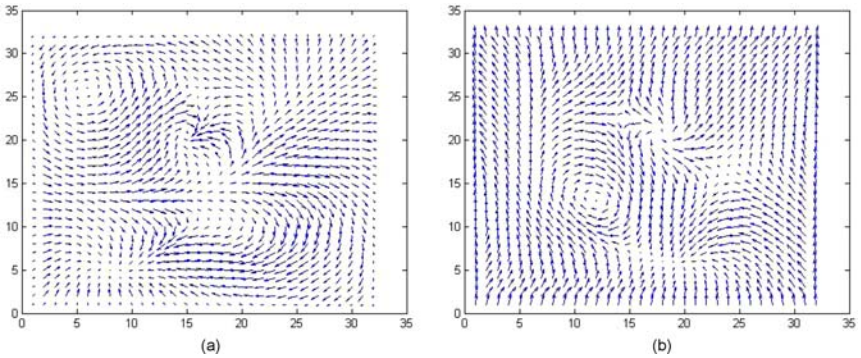

Fig. 12. (a) $L^* = 128$, $d = 2$, XY plane. (b) $L^* = 128$, $d = 2$, YZ plane.

keep in mind that Belavin-Polyakov instantons can be reproduced only as $\beta \to \infty$, and in the thermodynamic limit $|\Lambda| \to \infty$. Of course, everything can be again improved through simulated annealing.

ACKNOWLEDGEMENTS

We are very grateful to P. Picco who introduced us to the subject; we also thank A. Messager and Y. Vignaud for many interesting and useful discussions.

REFERENCES

1. P. Alexandroff, *Elementary Concepts of Topology* (Dover Publ. N.Y., 1961).
2. G. Alberti, G. Belletini, M. Cassandro and E. Presutti, Surface tension in Ising systems with Kac potentials. *J. Stat. Phys.* **82**(3/4):743–795 (1996).
3. F. Bethuel, H. Brezis and F. Helein, *Ginzburg-Landau vortices* (Birkhäuser, Basel, 1994).
4. A. A. Belavin and A. M. Polyakov, Metastable states of 2-d isotropic ferromagnets. *JETP Lett.* **22**(10):245–247 (1975).
5. Ph. Blanchard, D. Gandolfo, J. Ruiz and S. Shlosman, On the Euler-Poincaré characteristic of random cluster model. *Mark. Proc. Rel. Fields* **9**:523 (2003).
6. P. Bleher and J. Lebowitz, Energy-level statistics of model quantum systems: universality and scaling in a lattice-point problem. *J. Stat. Phys.* **74**:167–217 (1994).
7. P. Buttà and P. Picco, Large-deviation principle for one-dimensional vector spin models with Kac potentials. *J. Stat. Phys.* **92**:101–150 (1998).
8. A. DeMasi, Spins systems with long range interactions. *Progress in Probability* (vol. 54, Birkhäuser, 2003), pp. 25–81.
9. A. DeMasi, E. Orlandi, E. Presutti and L. Triolo, Uniqueness and global stability of the instanton in non-local evolution equations. *Rendiconti di Mat., Serie VII* **14**:693–723 (1994).
10. H. El-Bouanani and M. Rouleux, Thermodynamical equilibrium of vortices for the bidimensional continuous Kac rotator. In preparation.
11. L. Hörmander, *The Analysis of Partial Differential Operators I* (Springer, 1983).
12. S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt and M. P. Vecchi, Optimization by simulated annealing. *Science, Nr.* **4598**:1983.
13. X. Leoncini, A. Verga and S. Ruffo, Hamiltonian dynamics and the phase transition of the XY model. *Phys. Rev. E* **57**:6377–6389 (1998).
14. R. Minlos and E. Zhizhina, Asymptotics of the decay of correlations for the Gibbs spin fields. *Theoret. Math. Phys.* **77**(1):1003–1009 (1988).
15. Y. Ovchinnikov and I. M. Sigal, Ginzburg-Landau Equation I. *Static vortices* (Vol. 12, CRM Proceedings, 1997), pp. 199–220.
16. Y. Ovchinnikov and I. M. Sigal, The energy of Ginzburg-Landau vortex. *Eur. J. Appl. Math.* **13**:153–178 (2002).
17. A. M. Polyakov, *Gauge Fields and Strings* (Harwood Academic. Chur. 1987).
18. E. Presutti, From statistical mechanics towards continuum mechanics, Preprint M. Planck Institute, Leipzig, 1999.
19. D. Ruelle, *Statistical Mechanics* (World Scientific, 1999).
20. Y. Sinai, *Theory of Phase Transitions: Rigorous Results*. Pergamon Press, 1982.
21. J. Zinn-Justin, *Quantum Fields Theory and Critical Phenomena* (Clarendon Press, Oxford, 1989).

Chapitre 4

Vorticité quantique à l'équilibre pour le modèle XY.

On considère le modèle XY quantique avec interaction entre plus proches voisins sur un réseau $\Lambda \cup \partial\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ avec une condition de vorticité sur $\partial\Lambda$. On introduit la notion de matrice de vorticité à température inverse β et on étudie sa monodromie.

Introduction.

Les modèles de spin sur le réseau $\mathbb{Z}^2$ avec groupe continu de symétries ($O^+(2)$ pour le modèle XY) jouent un rôle important en Physique Statistique. On va considérer ici un système quantique de spins 1/2, avec interaction entre plus proches voisins.

Le système en volume fini $\Lambda \subset \mathbb{Z}^2, |\Lambda| = N$ sans condition limite, est régi par le Hamiltonien

$$H(\sigma) = -\frac{1}{4} \sum_{\langle i,j \rangle; i,j \in \Lambda} (\sigma_i^x \otimes \sigma_j^x + \sigma_i^y \otimes \sigma_j^y) + h \sum_j \sigma_j^z$$

(opérateur sur $\ell^2(\Lambda) \otimes \mathbb{C}^2 \approx \mathbb{C}^{2N}$). Ici

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

désignent les matrices de Pauli, $h \in \mathbb{R}$ représente un champ magnétique.

Pour le système de spins classique, on observe à la limite thermodynamique $|\Lambda| \to \infty$ des transitions dites de second ordre, qui ont été décrites par V.Berezinskii, J.Kosterlitz & D.Thouless en termes d'excitations topologiques (vortex). Alors que ces vortex sont organisés en dipôles à basse température, un état désordonné apparaît à la transition. J.Fröhlich &

T.Spencer [FrSp] ont montré que les fonctions de corrélation décroissent polynômialement à basse température, tandis qu'elles sont à décroissance exponentielle au delà d'une certaine température critique. On va tenter ici de répondre à la question suivante :

Question : Que faut-il entendre par *vorticité quantique*?

Une façon de favoriser l'apparition de vortex en volume fini, est de compléter le réseau Λ par un environnement $\partial\Lambda \subset \mathbb{Z}^2$ ("bord" de Λ dans $\mathbb{Z}^2$, constitué d'une ou plusieurs enceintes) sur lequel les matrices de Pauli du Hamiltonien sont "polarisées" dans les directions $(\theta_j)_{j\in\partial\Lambda}$. Dans ces conditions, la mesure de la variable "direction du spin" (son signe demeurant une variable libre) sur un site extérieur est déterministe, ce qui rend compte de l'aspect classique de l'environnement. On dit aussi qu'on a "compressé" les opérateurs de spin sur $\partial\Lambda$.

Dans l'expression de H, défini sur $\Lambda \cup \partial\Lambda$, lorsque $i \in \partial\Lambda$, on remplace donc σ_i par $\sigma_i(\theta_i) = \Pi_{\theta_i}\sigma_i\Pi_{\theta_i}$ où Π_{θ_i} est le projecteur orthogonal dans la direction $\binom{\cos\theta_i}{\sin\theta_i}$. Ainsi,

$$\sigma_i^x(\theta_i) = (\sin 2\theta_i)\Pi_{\theta_i}, \quad \sigma_i^y(\theta_i) = 0 \tag{4.1}$$

et ignorant le champ magnétique h dans la direction z on a

$$\begin{aligned} H(\sigma|\partial\Lambda) = &-\frac{1}{4}\sum_{\langle i,j\rangle; i,j\in\Lambda}(\sigma_i^x\otimes\sigma_j^x + \sigma_i^x\otimes\sigma_j^x) \\ &-\frac{1}{4}\sum_{\langle i,j\rangle;(i,j)\in\Lambda\times\partial\Lambda}(\sigma_i^x\otimes\sigma_j^x(\theta_j) + \sigma_i^x(\theta_i)\otimes\sigma_j^x) - \frac{1}{4}\sum_{\langle i,j\rangle; i,j\in\partial\Lambda}\sigma_i^x(\theta_i)\otimes\sigma_j^x(\theta_j) \end{aligned} \tag{4.2}$$

Là encore on devra prendre la limite $|\Lambda|, |\partial\Lambda| \to \infty$. On peut aussi considérer le système anti-ferromagnétique en changeant le signe de $H(\sigma|\partial\Lambda)$.

On s'attend naturellement à ce que la vorticité ait ici un caractère matriciel et non plus vectoriel comme dans le cas classique. En fait, on verra que la vorticité est encore essentiellement vectorielle, ce qui restaure le lien entre les modèles quantique et classique.

Les propriétés des systèmes quantiques de spins sur réseau sont surtout bien comprises en 1-D (chaîne XY), grâce à la transformation de Jordan-Wigner qui diagonalise le hamiltonien (l'interaction s'exprime à l'aide des opérateurs de création/annihilation), leur associant un gaz de Fermions. Citons quelques travaux :

- Propriétés à l'équilibre (états KMS) : E.Barouch & Mc-Coy [BMcC], H.Araki [Ar], E.Barouch & B.Fuchssteiner [BFu], ...
- Propriétés hors équilibre (NESS) : W.Aschbacher & C.A.Pillet [AsPi], W.Aschbacher & J.M. Barbaroux [AsBa] ...

Par contre en 2-D, il n'existe pas de transformation de Jordan-Wigner, et même pour des transformations approchées ([LieMatSch] ...) on ne connait pas avec précision la dynamique

engendrée par la dérivée d'Heisenberg $A \mapsto \delta(A) = i[H, A]$ sur l'algèbre des observables locales $\mathcal{O}$ munie du *-produit.

Notons que les propriétés de transition de phase pour les systèmes quantiques de spins ont été étudiées par des méthodes dues à F.Dyson, J.Fröhlich, R. Israel, E.Lieb, B.Simon, etc...("chessboard estimates", cf. par exemple [DyLiSi], [FrLi], [BiChSt].)

On va se limiter ici essentiellement à des simulations numériques sur réseau. Ce travail est organisé comme suit :

Dans la Sect.1 on définit les matrices de vorticité et les vortex, dont on établit quelques propriétés, dont l'invariance par rapport au choix de la base.

Dans la Sect.2 on définit le degré topologique pour un champ différentiable sur $\mathbb{R}^2$ à valeurs dans $\mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$, et l'on conjecture les propriétés relatives au degré des matrices de vorticité dans la limite continue.

Dans la Sect.3 on teste numériquement ces définitions, montrant aussi qu'on obtient le degré du système antiferromagnétique correspondant (dans la limite thermodynamique) par un simple changement de signe.

4.1 Matrices de vorticité.

On commence par énoncer une propriété élémentaire des matrices 4×4 à coefficients réels. Une telle matrice notée $\widehat{b} = (b^{ij})_{1 \leq i,j \leq 4} \in \mathcal{M}_4(\mathbb{R})$ se décompose en 4 vecteurs b_k, que l'on réécrit sous forme de matrice en utilisant par exemple l'ordre suivant :

$$b_k = \begin{pmatrix} b^{1k} & b^{2k} \\ b^{3k} & b^{4k} \end{pmatrix} \tag{4.3}$$

On obtient ainsi une nouvelle matrice $b = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{pmatrix}$ par blocs 2×2.

Notons $T(b) = \begin{pmatrix} \mathrm{Tr}\, b_1 & \mathrm{Tr}\, b_2 \\ \mathrm{Tr}\, b_3 & \mathrm{Tr}\, b_4 \end{pmatrix}$ la matrice des traces, et encore $\widetilde{T}(b) = T(b) - \frac{1}{2}\,\mathrm{Tr}\, T(b)$ la matrice des traces normalisée, de trace nulle. On a :

Lemme 4.1 : Soit G_0 le groupe opérant sur $\mathcal{M}_4(\mathbb{R})$ par permutations, ou multiplication par -1, de certains vecteurs b_k. Alors pour tout $\widehat{b} \in \mathcal{M}_4(\mathbb{R})$ la matrice $\widetilde{T}(b)$ vérifie $\det \widetilde{T}(b) \leq 0$ après action éventuelle de G_0.

Preuve : Echangeons par exemple les vecteurs b_1 et b_2, ainsi que b_3 et b_4, et notons $\widehat{b'} = (b_2, b_1, b_4, b_3)$. De même, multiplions b_1 et b_2 par -1, et posons $\widehat{b''} = (-b_1, -b_2, b_3, b_4)$. On a

$$\det T(b') = \det T(b'') = -\det T(b)$$

D'autre part, si $T(b) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$, alors $\det \widetilde{T}(b) = -\frac{1}{4}(A+D)^2 + \det T(b)$, ce qui donne le Lemme. ♣

Supposons désormais que $\widehat{b}$ est une matrice orthogonale, et identifions les b_k à une base orthonormée (BON) de $\mathbb{R}^4$, de composantes b^{ij} dans la base canonique. Considérons d'autre part l'espace o des matrices 2×2 à coefficients réels, muni du produit scalaire $(A|B) = \mathrm{Tr}(B^* A)$. Une BON de o est donnée par :

$$\delta_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \delta_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

Par (4.3) on peut donc identifier une BON $\widehat{b}$ de $\mathbb{R}^4$ à la BON b de o de composantes b^{ij} dans la base δ. On dira que b est une "base élémentaire". On préférera désormais la notation matricielle

$$b = \begin{pmatrix} b_1 & b_2 \\ b_3 & b_4 \end{pmatrix} \tag{4.5}$$

Soit d'autre part $\mathcal{O}$ l'algèbre des matrices $2N \times 2N$ à coefficients complexes (algèbre des "observables locales" sur Λ, $N = |\Lambda|$). L'analogue quantique en dimension finie de l'état de Gibbs à température inverse β est donné par la forme linéaire (état KMS)

$$\omega_\beta : \mathcal{O} \to \mathbb{C}, \quad \omega_\beta(A) = \frac{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H} A}{\mathrm{Tr}\, e^{-\beta H}} \tag{4.6}$$

On va définir les matrices de vorticité comme décomposition de ω_β sur l'algèbre duale des "fonctions à un point" supportées aux sites $i \in \Lambda$. Soit $\widetilde{\mathcal{O}} \subset \mathcal{O}$ la sous-algèbre des matrices diagonales par blocs 2×2 et $\widetilde{\mathcal{O}}_\mathbb{R} \subset \widetilde{\mathcal{O}}$ une sous-algèbre réelle, de dimension $4N$.

Exemple 1 : $\widetilde{\mathcal{O}}_\mathbb{R}$ est l'algèbre "canonique" engendrée par les matrices $(A^i)_{i\in\Lambda}$,

$$A^i = \left(A^i_j\right)_{1\le j\le 4} \tag{4.7}$$

dont tous les blocs diagonaux de taille 2×2 sont nuls à l'exception de celui attaché au site i et qui vaut $A^i_j = \delta_j$, où les δ_j sont définis en (4.4) avec la notation matricielle (4.5). On a donc N copies identiques des matrices δ_j réparties sur les sites $i \in \Lambda$, et la famille des

$$\left(A^i_j\right)_{1\le i\le N, 1\le j\le 4} = \left(0 \otimes \cdots \otimes \delta_j \otimes \cdots \otimes 0\right)_{1\le j\le 4}$$

(δ_j à la i-ème place) ci-dessus forme une BON de $\widetilde{\mathcal{O}}_\mathbb{R}$.

Exemple 2 : $\widetilde{\mathcal{O}}_\mathbb{R}$ est l'algèbre engendrée par les matrices de Pauli $(A^i)_{i\in\Lambda}$ avec

$$A^i_j = a_j \in \{\mathrm{Id}, i\sigma^x, i\sigma^y, i\sigma^z\}$$

On se limitera par la suite pour simplifier à l'algèbre canonique. Comme le hamiltonien est du second ordre dans les interactions, on identifie $\widetilde{\mathcal{O}}_{\mathbb{R}}$ à un sous-espace de $\widetilde{\mathcal{O}}_{\mathbb{R}} \otimes \widetilde{\mathcal{O}}_{\mathbb{R}}$ au moyen du coproduit usuel Δ, et on pose $\widetilde{x} = \Delta(x) = \frac{1}{2}(1 \otimes x + x \otimes 1) \in o \otimes o$, pour $x \in o$. puis on remplace $\widetilde{\delta} = \Delta(\delta)$ par $(\widetilde{A}^i_j)_{i \in \Lambda, 1 \leq j \leq 4}$, avec des notations évidentes. On considère alors les composantes $\omega_\beta(\widetilde{A}^i_j)$ de la forme linéaire ω_β dans sa base duale. En chaque site i, $\big(\omega_\beta(\widetilde{A}^i_j)\big)_{1 \leq j \leq 4}$ est donc un vecteur de $\mathbb{R}^4$ auquel on associe une matrice 2×2 par le procédé ci-dessus.

Définition 4.2 : On appelle *matrice de vorticité* au site i, relative à la base δ, et à température inverse β, la matrice :

$$\Omega^i_\beta(\delta) = \begin{pmatrix} \omega_\beta(\widetilde{A}^i_1) & \omega_\beta(\widetilde{A}^i_2) \\ \omega_\beta(\widetilde{A}^i_3) & \omega_\beta(\widetilde{A}^i_4) \end{pmatrix}$$

(Cette matrice est symétrique, puisque $\delta_2 = \delta_3^*$ et H est auto-adjoint.) La matrice $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{\delta}) = \Omega^i_\beta(\widetilde{\delta}) - \frac{1}{2}\operatorname{Tr}\big(\Omega^i_\beta(\widetilde{\delta})\big)\operatorname{Id} \in \mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$ est appelée *matrice de vorticité réduite* au site i.

Exemple 3 : $\Lambda = \{1, 2\}$ est un réseau à deux sites, $\partial\Lambda = \emptyset$. On trouve

$$\widetilde{\Omega}^1_\beta(\delta) = \widetilde{\Omega}^2_\beta(\delta) = 0$$

On définit $\widetilde{b} = \Delta(b)$, $\Omega^i_\beta(\widetilde{b})$ et $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b})$ de la même manière, si b est une autre base élémentaire, qu'on exprime par ses composantes dans la base canonique. Ici b est définie modulo le groupe G_0 pour assurer que $\det \widetilde{T}(b) \leq 0$; toutes les bases considérées seront données dans le "bon ordre". Remarquons que $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b})$ n'est plus nécessairement symétrique. Notons aussi que $T(b) = \Omega^i_0(\widetilde{b})$. Le Lemme 4.1 montre que sauf peut-être sur un ensemble de mesure nulle de $\mathrm{O}(4)$ (sous-variété algébrique), après action éventuelle du groupe G_0, la matrice $\widetilde{T}(b)$ vérifie $\det \widetilde{T}(b) < 0$, et est donc diagonalisable sur $\mathbb{R}$ avec des valeurs propres distinctes. Par analyticité de $\beta \mapsto \Omega^i_\beta(\widetilde{b})$ (en volume fini), on a donc :

Proposition 4.3 : Pour presque toute BON de $\widetilde{\mathcal{O}}_{\mathbb{R}}$, obtenue comme N copies identiques d'une BON $\widehat{b}$ de $\mathbb{R}^4$, et après action éventuelle du groupe G_0, pour tout $|\beta|$ assez petit, $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b})$ est diagonalisable pour tout i. En particulier

$$\forall i \in \Lambda \quad \det \widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b}) \leq 0$$

Cette propriété est vérifiée quels que soient β réel et la taille de Λ si b est symétrique.

Remarques : 1) Notons que l'action "initiale" de G_0 sur $\widehat{b}$ est en général nécessaire, mais qu'elle est indépendante du site i.

2) Choisir $\beta < 0$ correspond en fait à changer le hamiltonien en son opposé, i.e. à passer du cas ferromagnétique au cas antiferromagnétique. On verra que le déterminant des

matrices de vorticité est conservé (approximativement) par cette transformation. Pour les réseaux invariants par la "symétrie de l'échiquier" [Si], [BiChSt]..., cette quantité devrait être conservée ; ici les conditions limite introduisent un "décalage" dans les angles θ_j voisins, qui devient toutefois négligeable dans la limite thermodynamique.

3) Les simulations numériques permettent de conjecturer la Proposition 4.3 pour toute valeur de β (ce qui est naturellement le cas physiquement intéressant). En pratique on n'utilisera que des bases symétriques.

On note $\lambda^i_\beta(b) = -\det \widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b}) \geq 0$ de sorte que

$$\left(\widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b})\right)^2 = \lambda^i_\beta(b)\,\mathrm{Id} \tag{4.8}$$

On définit ensuite les vortex comme l'ensemble des points où la matrice de vorticité est singulière. Il est commode d'utiliser la base canonique pour la formuler.

Définition 4.4 : On dira que $i \in \Lambda$ est un *vortex* ssi $\Omega^i_\beta(\widetilde{\delta})$ admet deux valeurs propres égales, autrement dit $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{\delta}) = 0$. On appelle *réguliers* les points qui ne sont pas des vortex.

Par construction, tous les points sont des vortex pour $\beta = 0$. Le problème des transitions de phase ne sera pas abordé ici. On s'intéresse alors à l'indépendance de cette notion vis-à-vis du choix de la base b. Un cas particulièrement simple est le suivant :

Si a est une BON, et $P \in O(2;\mathbb{R})$, on pose avec la notation évidente, $b = {}^tPaP$. On a alors $T(b) = {}^tPT(a)P$. Désignons encore par P la matrice unitaire sur $\mathbb{R}^{2N}$ obtenue comme N copies de P aux différents sites de Λ, il est facile de voir que

$$\Omega^i_\beta(\widetilde{b}) = {}^tP\Omega^i_\beta(\widetilde{a})P, \quad \widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b}) = {}^tP\widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{a})P \tag{4.9}$$

Donc si i est un vortex, c'est encore un vortex relativement à toute BON b telle que $b = {}^tP\delta P$. Ceci se vérifie pour toutes les BON dites δ-symétriques pour lesquelles $b_{12} = b^*_{21}$ et $T(b)$ admet une valeur propre double.

4.2 Holonomie sur le groupe de Lie $\mathrm{SL}(2;\mathbb{R})$.

On commence par l'étude de formes différentielles sur $\mathbb{R}^2$ à valeurs dans les matrices $M \in \mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$ (matrices de trace nulle.) On rappelle que $M(x)$ vérifie $M(x)^2 = \lambda(x)\,\mathrm{Id}$, $\lambda(x) \geq 0$. Soit $\rho \in \Lambda^1(\mathbb{R}^2;\mathrm{sl}(2;\mathbb{R}))$ la 1-forme définie par

$$\rho(x) = \frac{1}{2}(M^{-1}(x)dM(x) - dM(x)M^{-1}(x)) \tag{4.10}$$

qui a la propriété d'être une matrice antisymétrique si M est symétrique.
Puisque $M^{-1}(x)dM(x) + dM(x)M^{-1}(x)) = \frac{d\lambda(x)}{\lambda(x)}$ on a

$$M^{-1}(x)dM(x) = \rho(x) + \frac{d\lambda(x)}{2\lambda(x)}, \quad dM(x)M^{-1}(x) = -\rho(x) + \frac{d\lambda(x)}{2\lambda(x)}$$

Soit $D \subset \mathbb{R}^2$ un ouvert simplement connexe où $x \mapsto M(x)$ est C^1 et $\lambda(x) > 0$. Alors $\frac{d\lambda(x)}{2\lambda(x)}$ est une forme exacte, et si γ est un lacet dans D

$$\int_\gamma M^{-1}(x)dM(x) = -\int_\gamma dM(x)M^{-1}(x) = \int_\gamma \rho(x) \tag{4.11}$$

On cherche une condition pour que ρ soit fermée. Utilisant l'identité $M(x)^2 = \lambda(x)\,\mathrm{Id}$, on trouve facilement

$$d\rho(x) = \big[M\frac{\partial M}{\partial x_1}M\frac{\partial M}{\partial x_2} - M\frac{\partial M}{\partial x_2}M\frac{\partial M}{\partial x_1} - \frac{\partial M}{\partial x_2}M\frac{\partial M}{\partial x_1}M + \frac{\partial M}{\partial x_1}M\frac{\partial M}{\partial x_2}M\big]\frac{dx_1 \wedge dx_2}{\lambda^2(x)}$$

et si $M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & -a \end{pmatrix}$, un calcul montre que

$$d\rho(x) = -\lambda^{-2}(adb \wedge dc + bdc \wedge da + cda \wedge db)M \tag{4.12}$$

Donc ρ est fermée si

$$R(a,b,c) = adb \wedge dc + bdc \wedge da + cda \wedge db = 0 \tag{4.13}$$

et cette condition est vérifiée si M est symétrique. Pour une application M différentiable définie sur $\mathbb{R}^2$ à valeurs dans les matrices $M \in \mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$ vérifiant (4.13) et uniformément elliptiques à l'infini, au sens où

$$|\lambda(x)| \geq C > 0, \quad |x| \geq r_0$$

on peut donc définir le nombre

$$s_\infty = \det \frac{1}{2\pi}\int_{|x|=r} \rho(x) \tag{4.14}$$

qui est indépendant de $r \geq r_0$ grâce à la formule de Stokes. De la même manière, si ξ est un vortex (i.e. l'application M est singulière au point ξ) on définit le "degré local"

$$s_\xi = \det \frac{1}{2\pi}\int_\gamma \rho(x) \tag{4.15}$$

pourvu que $M(x)$ soit inversible pour $x \neq \xi$, en intégrant sur un petit contour γ autour de ξ.

Calculons d'autre part l'équation de structure de Maurer-Cartan pour la forme $\rho(x)$ à valeurs dans $\mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$, cf. [Ma,p.165]. Les coefficients de structure de l'algèbre de Lie $\mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$, de base $e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, e_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, e_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ sont donnés par $C^2_{1,2} = -C^2_{2,1} = 2, C^3_{1,3} = -C^3_{3,1} = -2, C^1_{2,3} = -C^1_{3,2} = 1$, et $C^k_{i,j} = 0$ sinon. Calculant alors $[\rho,\rho] = \sum_k (\sum_{i<j} C^k_{i,j}\rho^i \wedge \rho^j)e_k$, on trouve

$$-[\rho,\rho] = \lambda^{-2}(adb \wedge dc + bdc \wedge da + cda \wedge db)M$$

Sous l'hypothèse (4.13), cette relation montre que ρ vérifie l'équation de structure

$$d\rho + [\rho,\rho] = 0 \tag{4.16}$$

Rappelons que si G est un groupe de Lie, $\mathcal{A}$ son algèbre de Lie, et ω la forme canonique de Maurer-Cartan sur G, invariante par translations à gauche, on définit la différentielle de Darboux d'une application $f \in C^1(D;G)$ sur un ouvert $D \subset \mathbb{R}^2$ par $\pi_f = f^*\omega$. Le théorème fondamental d'existence ("lemme de Poincaré") associe à une forme différentielle $\rho \in \Lambda^1(D;\mathcal{A})$ vérifiant $d\rho + [\rho,\rho] = 0$ une application $f \in C^1(D;G)$, dont elle est, localement, la différentielle de Darboux, et cette application est unique dès lors qu'on lui assigne sa valeur en un point $x_0 \in D$.

Par ailleurs, on sait [Ki,p.117& 321], que le groupe de Lie dont $\mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$) est l'algèbre de Lie, est le revêtement universel $E = \widetilde{\mathrm{SL}}(2;\mathbb{R})$ du groupe unimodulaire $\mathrm{SL}(2;\mathbb{R})$. Rappelons que localement une matrice $N \in \mathrm{SL}(2;\mathbb{R})$ est de la forme

$$N = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \exp \begin{pmatrix} \alpha & \gamma \\ \gamma & -\alpha \end{pmatrix}$$

Le groupe unimodulaire est topologiquement équivalent au cylindre $\mathbf{S}^1 \times \mathbb{R}^2$, son groupe fondamental égal à $\mathbb{Z}$, et E est homéomorphe à $\mathbb{R}^3$. Toutefois, on ne peut généralement pas paramétrer E par des matrices, plus précisément E ne s'écrit d'aucune façon comme sous-groupe d'un $\mathrm{GL}(n;\mathbb{C})$, avec $n \in \mathbb{N}$.

La relation (4.16) assure l'existence d'une primitive locale $N \in C^1(D;\mathrm{SL}(2;\mathbb{R}))$ de ρ, qui est le "logarithme" de M. Si D est simplement connexe, cette primitive est globale. Sinon, elle admet un prolongement à E. Ainsi, si $\gamma \subset \mathbb{R}^2$ est un lacet de base x_0, on peut définir l'opérateur de monodromie T_γ agissant sur les fonctions $N : \gamma \to E$.

Exemple : Pour les matrices

$$M_0(x) = \begin{pmatrix} \cos d\theta & \sin d\theta \\ \sin d\theta & -\cos d\theta \end{pmatrix}, \quad M_1(x) = \begin{pmatrix} r\cos d\theta & \sin d\theta \\ \sin d\theta & -r\cos d\theta \end{pmatrix} \tag{4.17}$$

on a $s_\infty = d^2$. La forme ρ associée à M_0 est simplement $\begin{pmatrix} 0 & d \\ -d & 0 \end{pmatrix} d\theta$. ♣

Puisque le groupe fondamental de E égal à $\mathbb{Z}$, s_∞ et s_ξ sont des entiers.

Les degrés à l'infini et en x_0 sont donc invariants par homotopie. En particulier, on peut faire une théorie de perturbations en développant les coefficients de M en série de Fourier. Le degré pour les matrices $M \in \mathrm{sl}(2;\mathbb{R})$ vérifiant (4.13) peut également s'obtenir par la théorie de Brouwer [Mi], en considérant que ces matrices forment (localement) une variété de dimension 2. Si les matrices M sont symétriques, alors ρ est antisymétrique, donc

$$\frac{1}{2\pi}\int_\gamma \rho = \begin{pmatrix} 0 & -d \\ d & 0 \end{pmatrix} \tag{4.18}$$

si bien que l'on posera

$$s_\infty = (\deg_\infty(M))^2 \in \{0,1,4,9,\cdots\}, \quad s_\xi = (\deg_{x_1}(M))^2 \in \{0,1,4,9,\cdots\} \tag{4.19}$$

4.3 Simulations numériques

On étudie la distribution des matrices de vorticité réduites sur des réseaux rectangulaires. Le réseau $\Lambda \cup \partial\Lambda$ est défini par ses dimensions (L,ℓ) et par le nombre d'enceintes m constituant $\partial\Lambda$. On a donc $n = (\ell-1)/2 - m$ enceintes intérieures. Il est commode d'introduire les normes, pour L et ℓ impairs, $N_1(i) = \max(\frac{\ell-1}{2}|i_1|, \frac{L-1}{2}|i_2|)$ sur $\Lambda \cup \partial\Lambda$ et $N_2(i) = \max((\frac{\ell-1}{2} - m)|i_1|, (\frac{L-1}{2} - m)|i_2|)$ sur Λ.

Ni le rôle du nombre d'enceintes constituant $\partial\Lambda$ par rapport à la taille de Λ dans la limite $|\Lambda| \to \infty$, ni l'influence de la température ne sont encore bien compris, mais l'effet de la polarisation sur le sous-système Λ est d'autant plus important que $|\partial\Lambda|$ et β sont grands. Pratiquement, on prendra au moins autant d'enceintes extérieures que d'enceintes intérieures, soit $m \geq n$.

La forme du réseau joue également un rôle important. Si le réseau est carré, trop de symétries entrent en jeu dans le système créant ce qu'on appelle parfois un *effet de grille* : en volume fini, toutes les variables vectorielles tendent à s'aligner suivant les axes de symétrie, leur direction variant brusquement, si bien que l'approximation des variables discrètes par un champ différentiable n'est plus valable. Il est donc nécessaire de briser certaines symétries, et en particulier de remplacer le carré par un rectangle suffisamment "allongé". En pratique ses dimensions (L,ℓ) seront choisies dans un rapport de l'ordre de 3 à 2, compte tenu de la taille modeste des réseaux compatible avec les algorithmes numériques (diagonalisation du hamiltonien par la méthode QR.) La qualité des résultats augmente bien entendu avec β.

On prescrit la polarisation sur $\partial\Lambda$ avec une distribution uniforme. Pour briser encore les symétries, et arriver ainsi à des configurations plus stables, on introduit un déphasage ϕ_0 entre l'angle de polarisation (ou compression) et les axes du réseau. Ainsi $\theta_{(i_1,i_2)} = d(\arctan(\frac{i_2}{i_1}) + \phi_0)$, pour $i_1 > 0$, et $\theta_{(i_1,i_2)} = d(\arctan(\frac{i_2}{i_1}) + \pi + \phi_0)$, pour $i_1 < 0$, avec par exemple $\phi_0 = 1$.

On pourrait aussi faire varier la polarisation “par paliers”, par exemple si le degré est $d = 2$, lui faire faire $3/4$ de tour sur un quart de l'enceinte, puis $1/4$, puis de nouveau $3/4$, etc..., ou encore introduire des perturbations aléatoires dans la distribution des θ_j.

Même pour $\beta = 1$ on observe une structure de vortex, bien que les vortex soient peu différenciés, numériquement, des points voisins. Ils apparaissent plus distinctement à la faveur de l'ordre à longue portée généré à basse température.

Bien qu'il semble que la configuration de vortex ne dépende pas de la base b choisie (après réarrangement de ses éléments), le choix d'une base symétrique de type δ pour le calcul des matrices de vorticité réduites $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\delta)$ est le plus naturel, car il est facile de perturber une matrice au voisinage d'un point (le vortex) où elle a une valeur propre double. De plus, ces matrices de vorticité vérifient (4.13) et (4.16) et permettent le calcul du degré. Au sens de l'approximation continue, un tel champ est continu, mais non différentiable aux vortex.

Notons aussi qu'on n'a pas trouvé de bases b non symétriques pour lesquelles le champ des matrices de vorticité vérifierait (4.13). On peut donc admettre qu'il s'agit là d'une condition pratiquement nécessaire.

4.3.1 Le spectre de H.

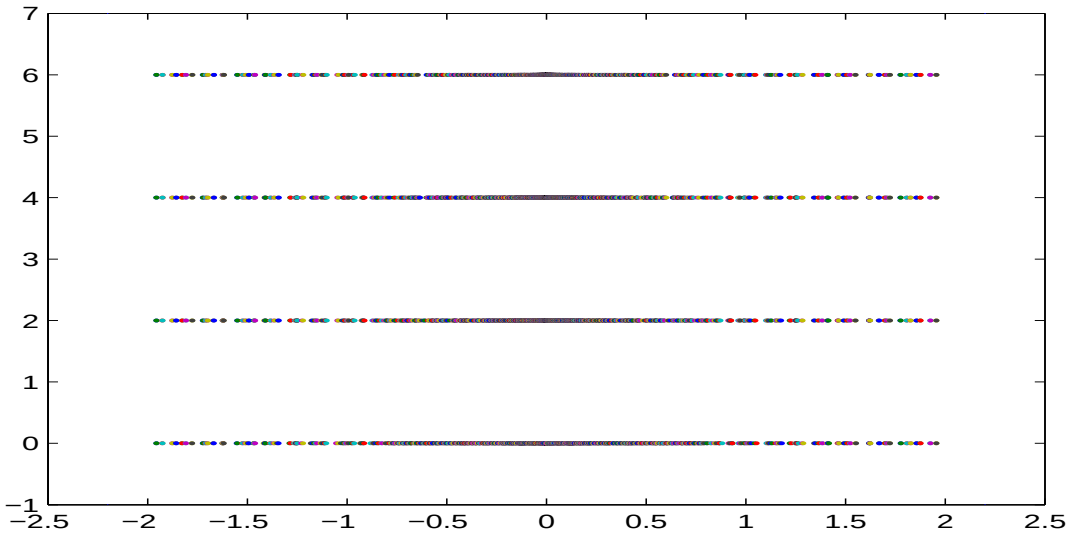

FIG. 4.1 – *Spectre de H, $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5)$*

Le spectre du modèle XY en 2-D, dans la limite $|\Lambda| \to \infty$, même sans condition limite,

n'est pas connu rigoureusement. Dans un travail récent, M.Damak, M.Mantoiu, et R.Tiedra de Aldecoa [DaManTie] proposent de résoudre ce problème au moyen d'algèbres de Toeplitz associées au groupe $\mathbb{Z}^2$, muni de l'ordre lexicographique. Il s'agit de généraliser des méthodes utilisées avec succès en 1-D, pour une certaine représentation du modèle d'Heisenberg, analogue à la représentation de Fock pour les modèles fermioniques, au sens où elle ne met en jeu qu'un nombre fini mais variable d'interactions.

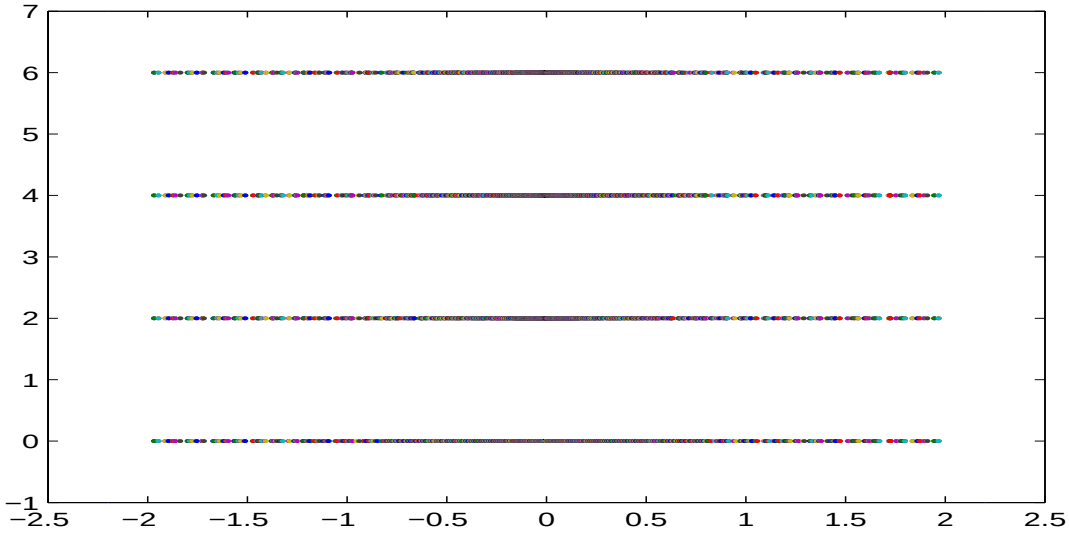

FIG. 4.2 – *Spectre de* H, $(L, \ell, n, m) = (37, 25, 6, 6)$

L'intuition suggère évidemment qu'il s'agit pour le modèle libre, comme pour le laplacien discret, d'un spectre absolument continu, égal à un intervalle $[-a, a]$, sauf éventuellement pour le bas du spectre, a étant une valeur propre de multiplicité infinie, correspondant au groupe continu de symétries. Dans le cas d'une condition limite, la dégénéréscence est levée, et l'état fondamental, qui doit aussi correspondre à l'état KMS dans la limite $\beta \to \infty$, est en général unique.

Cette intuition apparaît clairement dans le cas présent, en regardant la distribution des valeurs propres de H restreint au réseau $\Lambda \cup \partial\Lambda$, que l'on représente ci-dessous pour certaines valeurs de (L, ℓ, n, m). On remarque que ce spectre est à peu près symétrique par rapport à l'origine (en fait la symétrie de l'échiquier n'est qu'approximative, Λ ayant un nombre impair de cases.)

4.3.2 Champ des directions principales de la matrice de vorticité.

Pour visualiser la monodromie des matrices de vorticité, on peut "suivre" la base des vecteurs propres de $\widetilde{\Omega}^i_\beta(b)$ en fonction du site i. Pour des bases b "symétriques" ces bases, en chaque point, sont orthogonales, et il suffirait en fait, comme pour le cas classique, de représenter un champ de vecteurs. Mais le calcul numérique du repère principal ne permettant pas toujours de déterminer "continûment" son orientation, il est préférable de représenter le repère "projectif" sous forme d'une croix dont les branches ont une longueur proportionnelle à la valeur propre positive $\sqrt{\lambda_i}$ de $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\delta)$ (rappelons que les valeurs propres des matrices de vorticité sont opposées). Pour des raisons pratiques, le facteur d'échelle dépend des enceintes, $\sqrt{\lambda_i}$ étant très grande á l'interface de Λ et $\partial\Lambda$.

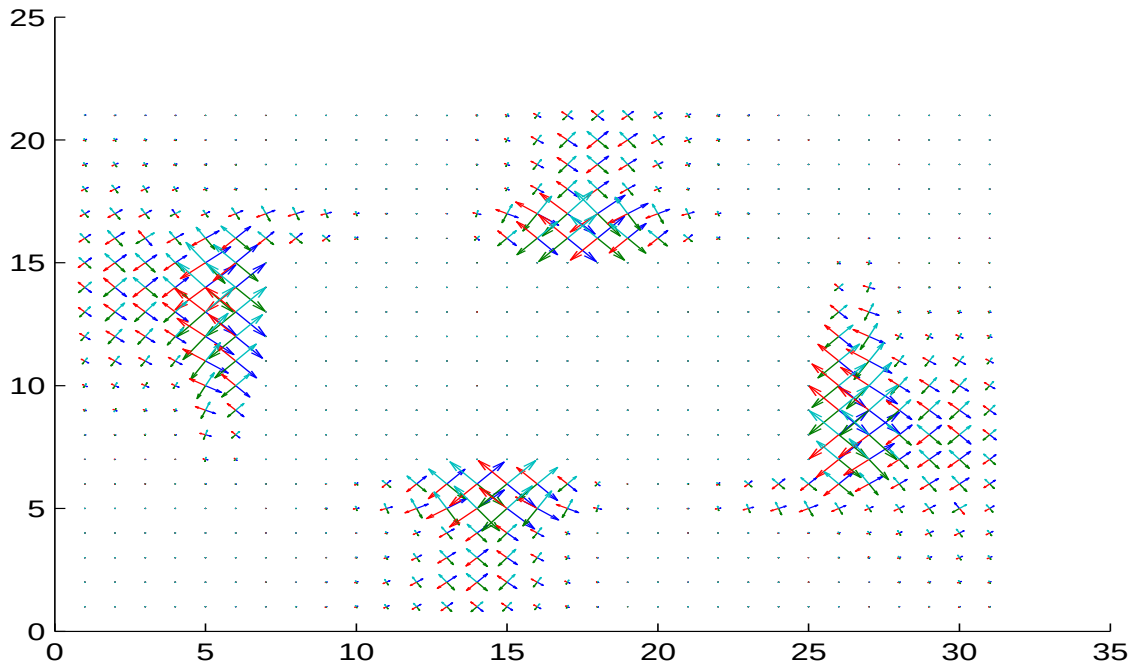

FIG. 4.3 – *Directions principales des matrices de vorticité,* $(L, \ell, m, n) = (31, 21, 5, 5), (d, \beta) = (1, 5)$

On commence par $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5)$, ce qui semble être la taille minimale pour éliminer des effets de volume trop importants. Donc $\Lambda \cup \partial\Lambda$ est défini par $N_1(i) = \max(2|i_1|, 3|i_2|) \leq 30$ et Λ par $N_2(i) = \max(|i_1|, 2|i_2|) \leq 10$.

On a choisi ici $\beta = 5$. Pour $d = 1$ il y a un vortex au centre (rappelons que i est un

vortex si $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\delta) = 0$). Bien qu'il soit plus intéressant de connaître les $\widetilde{\Omega}^i_\beta(\delta)$ pour $i \in \Lambda$ on les calcule aussi pour $i \in \partial\Lambda$ au moins sur les premières enceintes.

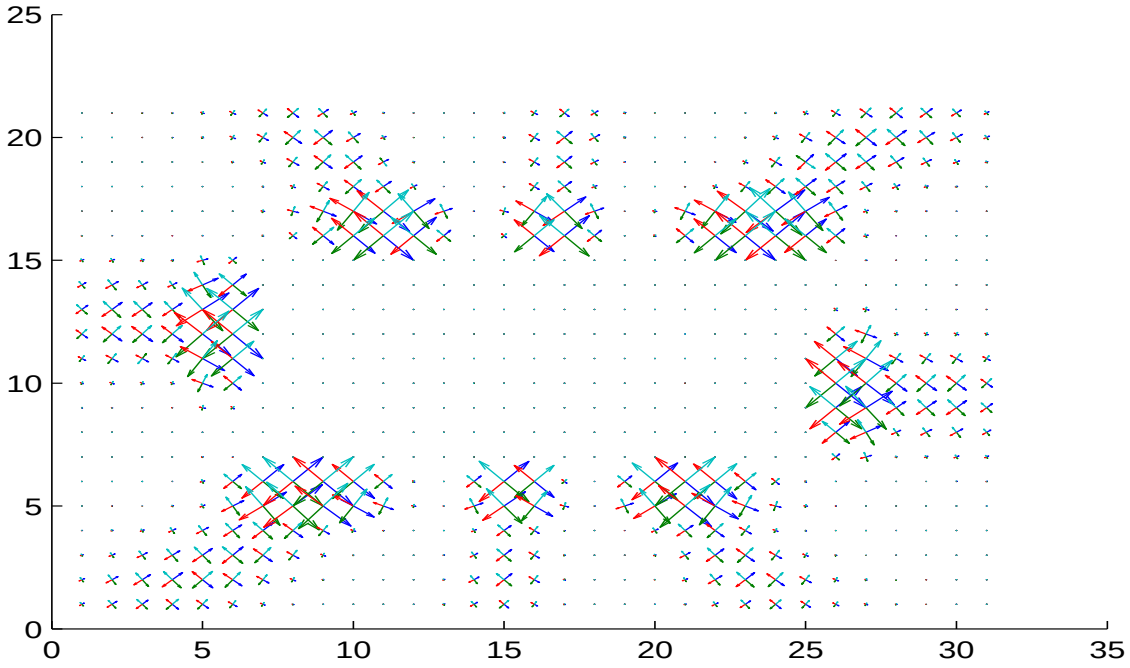

FIG. 4.4 – *Directions principales des matrices de vorticité,* $(L, \ell, m, n) = (31, 21, 5, 5), (d, \beta) = (2, 5)$

Notons que l'ordre de grandeur des matrices de vorticité croit typiquement de 10^{-9} à 10^3, entre la 3 :iéme et la 5 :iéme ou 6 :iéme enceinte (interface entre Λ et $\partial\Lambda$), puis redécroît aux alentours de 1 à la périphérie du réseau extérieur. Ceci explique la relative instabilité des résultats vis-à-vis du choix de (L, ℓ, n, m). Il est clair sur la figure que les directions principales des matrices de vorticité tournent de 2π.

On augmente alors le degré. Bien que les directions des lignes de champs suggèrent l'existence de plusieurs vortex il est assez difficile de les distinguer. Il faudrait sans doute augmenter la taille (en allongeant le rectangle) ou briser fortement la symétrie du réseau, ainsi que celle des conditions limite, pour les repérer clairement.

A titre de comparaison, nous avons représenté une configuration typique pour le cas classique (modèle de Kac). Insistons sur le fait que dans le cas classique la configuration des magnétisations est une donnée à l'extérieur du réseau, alors que dans le cas quantique les

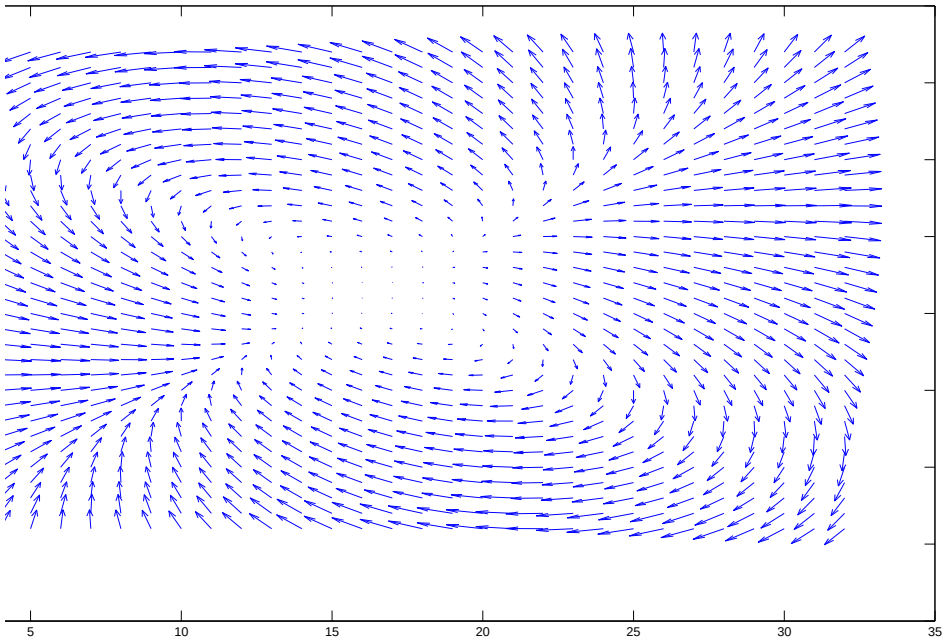

FIG. 4.5 – *Une configuration d'équilibre pour le modèle XY avec potentiel de Kac, $d = 2$.*

matrices de vorticité restent des "variables" qui dépendent de la température et bien sûr du hamiltonien ; toutefois elles tendent évidemment à s'aligner avec la "polarisation" ambiante.

On augmente maintenant le nombre d'enceintes en choisissant $(L, \ell, n, m) = (37, 25, 6, 6)$ Donc $\Lambda \cup \partial\Lambda$ est défini par $N_1(i) = \max(2|i_1|, 3|i_2|) \leq 36$ et Λ par $N_2(i) = \max(|i_1|, 2|i_2|) \leq 12$. On obtient la figure 4.6, la précision des calculs ne permet pas d'avoir une bonne image.

4.3.3 Calcul du degré.

On va calculer maintenant directement les matrices de degré i.e. la somme discrète correspondant à $\int_\gamma \rho(x)$.

Pour une application définie sur le réseau $\mathbb{Z}^2$, on peut donner un sens à l'intégrale en remplaçant de façon usuelle la différentielle par des différences finies. Toutefois le passage du continu au discret (processus "d'homogénéisation") présente des aspects délicats qui ne seront pas discutes ici (cf. [Sm] pour une discussion de la notion d'"holomorphie discrète").

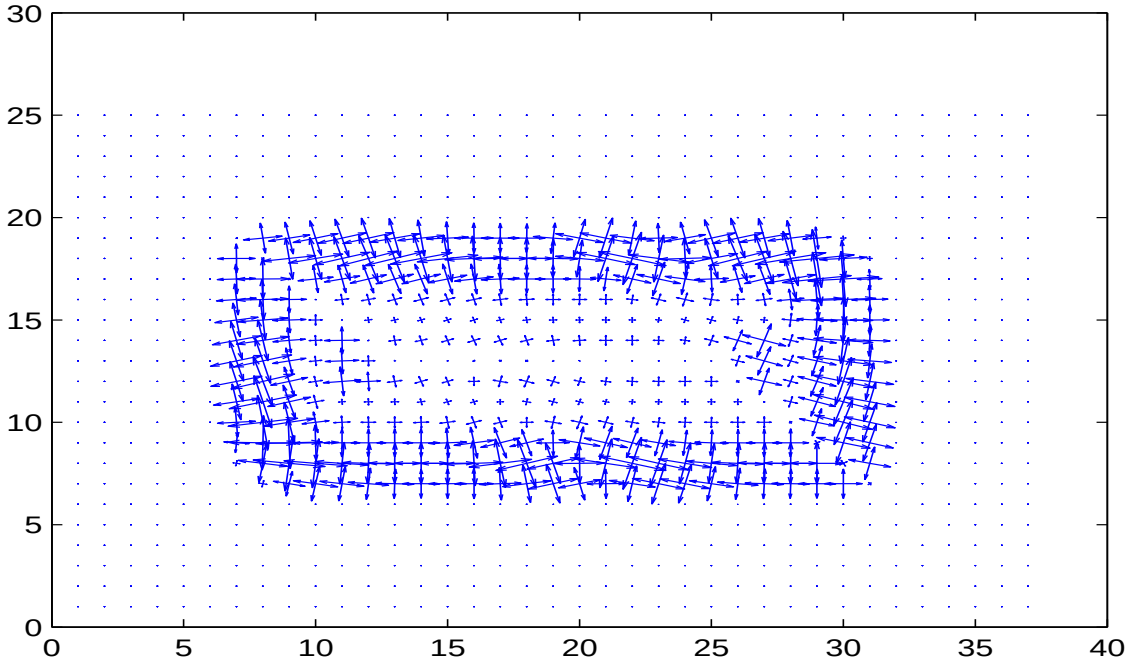

FIG. 4.6 – *Directions principales des matrices de vorticité,* $(L, \ell, m, n) = (37, 25, 6, 6), (d, \beta) = (2, 21)$

On s'intéresse alors à la monodromie de $i \mapsto \widetilde{\Omega}^i_\beta(\widetilde{b})$ en fonction de d. Contrairement à la permanence des vortex vis-à-vis du choix de la base, l'équation de structure (4.13) n'est pas toujours vérifiée. On se limitera donc à des bases b "symétriques", auquel cas les matrices de vorticité sont symétriques, et alors l'intégrale de ρ sur un contour est de la forme (4.18).

On choisit des contours carrés $\gamma = \gamma_k \subset \Lambda \cup \partial\Lambda$, (la k :ième enceinte à partir du centre) sur lesquels on somme en tous les sites j, sauf en leurs coins, les quantités $M^{-1}(j)\big(M^+(j) - M^-(j)\big)/2$, et $\big(M^+(j) - M^-(j)\big)M^{-1}(j)/2$. Ici $M^\pm(j)$ désigne la matrice M calculée au site suivant (resp. précédant) immédiatement le site j le long du contour orienté.

En fait, (4.11) n'est pas bien vérifiée en général numériquement, parce que la somme discrète correspondant à $\int_{\gamma_k} \frac{d\lambda(x)}{\lambda(x)}$ n'est pas exactement nulle, tandis que la somme discrète correspondant à

$$\frac{1}{2}(I_k - J_k) = (2\pi)^{-1} \int_{\gamma_k} M^{-1}(x)dM(x) - dM(x)M^{-1}(x) = \begin{pmatrix} 0 & -d_k \\ d_k & 0 \end{pmatrix} \tag{4.20}$$

est toujours (théoriquement) une matrice antisymétrique. Il existe en effet certains sites, où

apparaîssent des vortex “accidentels”, ou “quasi-vortex”, en général près des diagonales de Λ, donc la ou λ est très petit.

Un critère de sélection des “bonnes matrices de degré” consiste donc à retenir les valeurs de k pour lesquelles les valeurs sur la diagonale de I_k (ou celle de J_k) sont petites par rapport à celle de l'anti-diagonale, par exemple dans un rapport de 1 à 10.

Il est remarquable que ce sont justement les “bonnes matrices de degré” qui ne sont pas exactement antisymétriques (d'un point de vue numérique) alors que les autres le sont en général avec une grande précision.

Dans la suite, on va discuter quelques cas, en essayant de mettre en évidence le rôle des proportions du réseau (L, ℓ), du rapport du nombre d'enceintes intérieures/extérieures (n, m), de la température, et du degré de polarisation d sur le bord $\partial\Lambda$. Là encore le nombre de “bonnes matrices de degré” croît évidemment avec β.

Commençons par le réseau ci-dessus avec $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5)$.

Les calculs numériques pour $d = 1$ donnent en fait des valeurs par défaut $d_k \leq 1$ (typiquement d_k de l'ordre de 0.5) qui dépendent peu de β, tant que $3 \leq \beta \leq 9$, puis des “catastrophes” apparaissent en dehors de cet intervalle, (diminution de d_k) qu'on peut attribuer par exemple à la taille insuffisante du réseau, plutôt qu'à une réelle transition de phase. Notons aussi qu'on a les meilleurs résultats lorsque k varie entre 4 et 6.

β	E_3	E_4	E_5	E_6	E_7	E_8
2	−0.64 −1.27 0.53 −0.10	-	3.46 1.91 −5.54 −4.91	0.68 −0.55 0.55 0.68	0.28 −0.61 0.61 0.28	−0.04 −0.35 0.35 −0.04
3	−2.83 −0.94 −0.86 −0.89	−0.20 −0.86 0.81 1.22	0.70 −0.40 0.40 0.70	0.21 −0.64 0.64 0.21	0 −0.54 0.54 0	0.11 −0.27 0.27 0.11
4	0.35 −1.94 1.42 0	0.44 −0.35 0.36 0.43	0.34 −0.43 0.43 0.34	0.07 −0.65 0.65 0.07	0 −0.43 0.43 0	0.13 −0.15 0.15 0.13
5	−0.01 1.93 −0.49 1.99	0.21 −0.41 0.41 0.21	0.20 −0.41 0.41 0.20	0.06 −0.61 0.61 0.06	0.01 −0.34 0.34 0.01	0.11 −0.10 0.10 0.11
6	0.18 −0.27 0.27 0.17	0.13 −0.40 0.40 0.13	0.17 −0.37 0.37 0.17	0.08 −0.52 0.52 0.08	−0.03 −0.30 0.30 −0.03	0.09 −0.07 0.07 0.09
7	0.12 −0.28 0.28 0.12	0.12 −0.37 0.37 0.12	0.18 −0.29 0.29 0.18	0.08 −0.44 0.44 0.08	−0.09 −0.30 0.30 −0.09	0 −0.06 0.06 0
8	0.11 −0.28 0.28 0.11	0.14 −0.32 0.32 0.14	0.18 −0.20 0.20 0.18	0.07 −0.38 0.38 0.07	−0.14 −0.32 0.32 −0.14	0.06 −0.05 0.05 0.06
9	0.13 −0.26 0.26 0.13	0.15 −0.26 0.26 0.15	0.16 −0.14 0.14 0.16	0.06 −0.35 0.35 0.06	0.19 −0.34 0.34 0.19	0.11 −0.28 0.28 0.11

TAB. 4.1 – *Valeurs de I_k, $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5), d = 1$*

Les calculs pour $d = 2$ donnent des valeurs $d_k \leq 2$ typiquement de l'ordre de 1.2, soit environ le double des valeurs précédentes.

On fait ensuite varier légèrement la taille du réseau, en allongeant le rectangle $(L, \ell) = (37, 25, 6, 6)$ mais en gardant le même nombre d'enceintes. Cette fois les valeurs de d_k sont toujours par excès ; elles s'améliorent toutefois lorsque β augmente. On a éliminé du tableau toutes les valeurs pour lesquelles les termes diagonaux de I_k dominent sur les termes anti-diagonaux.

β	E_3		E_4		E_5		E_6		E_7		E_8	
2	−0.39	−1.37	-		3.84	1.58	0	−0.55	0	−0.61	0	−0.35
	0.47	0.39			−5.72	−3.84	0.55	0	0.61	0	0.35	0
3	−0.96	−0.98	−0.7	−0.7	0	−0.40	0	−0.64	0	−0.54	0	−0.27
	−0.92	0.96	0.9	0.72	0.40	0	0.64	0	0.54	0	0.27	0
4	−0.06	−1.93	0	−0.35	0	−0.43	0	−0.65	0	−0.43	0	−0.15
	1.35	0.06	0.36	0	0.43	0	0.65	0	0.43	0	0.15	0
5	−0.93	1.96	0	−0.41	0	−0.41	0	−0.61	0	−0.34	0	−0.10
	−0.44	0.93	0.41	0	0.41	0	0.61	0	0.34	0	0.10	0
6	0	−0.27	0	−0.40	0	−0.37	0	−0.52	0	−0.30	0	−0.07
	0.27	0	0.40	0	0.37	0	0.52	0	0.30	0	0.07	0
7	0	−0.28	0	−0.37	0	−0.29	0	−0.44	0	−0.30	0	−0.06
	0.28	0	0.37	0	0.29	0	0.44	0	0.30	0	0.06	0
8	0	−0.28	0	−0.32	0	−0.20	0	−0.38	0	−0.32	0	−0.05
	0.28	0	0.32	0	0.20	0	0.38	0	0.32	0	0.05	0
9	0	−0.26	0	−0.26	0	−0.14	0	−0.35	0	−0.34	0	−0.05
	0.26	0	0.26	0	0.14	0	0.35	0	0.34	0	0.05	0

TAB. 4.2 – *Valeurs de* $(I_k - J_k)/2$, $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5), d = 1$

β	E_3		E_4		E_5		E_6		E_7		E_8	
2	−0.23	0.07	0.62	−0.70	8.90	4.26	0	−2	0	−1.12	0	−2
	1.05	0.23	−1.63	−0.62	−4.40	−8.90	2	0	1.12	0	2	0
3	0.04	−0.10	5	5	0	−0.13	0	−1.10	0	−1.10	0	−0.40
	−0.90	−0.04	−1.30	−5	0.13	0	1.10	0	1.10	0	0.40	0
4	0.55	0.38	0	−0.84	0	−0.58	0	−1.69	0	−0.76	0	−0.28
	−2.92	−0.55	0.84	0	0.58	0	1.69	0	0.76	0	0.28	0
5	−0.08	−0.96	0	−0.59	0	−0.67	0	−1.52	0	−0.70	0	−0.22
	0.96	0.08	0.59	0	0.67	0	1.52	0	0.70	0	0.22	0
6	0	−0.50	0	−0.59	0	−0.42	0	−1.57	0	−0.67	0	−0.18
	0.50	0	0.59	0	0.42	0	1.57	0	0.67	0	0.18	0
7	0	−0.53	0	−0.38	0	−0.40	0	−1.58	0	−0.68	0	−0.16
	0.53	0	0.38	0	0.40	0	1.58	0	0.68	0	0.16	0
8	0	−0.36	0	−0.37	0	−0.35	0	−1.60	0	−0.71	0	−0.15
	0.36	0	0.37	0	0.35	0	1.60	0	0.71	0	0.15	0

TAB. 4.3 – *Valeurs de* $(I_k - J_k)/2$, $(L, \ell, n, m) = (31, 21, 5, 5), d = 2$

En conclusion, pour une base de type δ symétrique les simulations numériques conduisent avec une bonne précision, à la loi de conservation du degré que nous pouvons énoncer comme la :

Conjecture 4.1 : Soit b une base δ symétrique. Si la polarisation de l'interaction sur $\partial\Lambda$ est de degré d, alors dans la limite thermodynamique $\Lambda \to \infty$, pour tout $r > 0$ assez grand

$$\frac{1}{2\pi} \int_{|x|=r} \rho(x) = \begin{pmatrix} 0 & -d \\ d & 0 \end{pmatrix}$$

soit $d^2 = s_\infty$ en rappelant (4.14). D'autre part la vorticité algébrique totale est conservée, i.e. si ξ désignent les vortex à l'intérieur de Λ, alors dans la limite thermodynamique $\Lambda \to \infty$

$$d = \sum_\xi d_\xi$$

4.3.4 Passage au cas antiferromagnétique.

Avec une bonne précision, on trouve que changer β en $-\beta$ (i.e. passer du cas ferromagnétique au cas antiferromagnétique) a pour effet de changer d_k en son opposé (donc "renverser" la vorticité).

Il existe apparemment entre les matrices Ω^i_β et $\Omega^i_{-\beta}$ la relation (empirique)

$$\Omega^i_{-\beta}(\widetilde{\delta}) \approx {}^tP\Omega^i_\beta(\widetilde{\delta})P \tag{4.21}$$

où P est une matrice orthogonale indépendante du site (cf (4.9)).

Il est connu que les modèles ferro- et antiferromagnétique sont unitairement équivalents sur le réseau $\mathbb{Z}^2$ (cas libre), par l'opération qui consiste à "renverser" les spins aux sites i "impairs" (i.e. les indices $i = (i_1, i_2)$ tels que $|i| = |i_1| + |i_2|$ soit un nombre impair.) Plus précisément, soient $\mathbb{Z}^2_e$ et $\mathbb{Z}^2_o$) les sous-réseaux pair et impair, ainsi que U l'opérateur unitaire sur $\ell^2(\mathbb{Z}^2)$ défini par $(U\psi)_i = \psi_i$ si $i \in \mathbb{Z}^2_e$ et $(U\psi)_i = -\psi_i$ si $i \in \mathbb{Z}^2_o$. On a

$$\operatorname{Tr}\exp[\beta H]A = \operatorname{Tr}\exp[-\beta U^* HU]A = \operatorname{Tr} U^* \exp[-\beta H]UA = \operatorname{Tr}\exp[-\beta H](UAU^*)$$

Si $A = A^i$ comme dans (4.7), alors il est facile de voir que $UAU^* = A$.

Ce n'est plus vrai dans le cas d'un bord, mais il semble que l'on ait toujours l'équivalence (4.21) entre les cas ferro- et antiferromagnétique

Références

[AlBeCaPr] G.Alberti, G.Belletini, M.Cassandro, E.Presutti. Surface tensions in Ising systems with Kac potential. J. Stat. Phys. 82(3-4), p.743-796, (1996).

[Ar] H.Araki. On quasifree states of CAR and Bogoliubov auttomorphisms. Publ. RIMS, Kyoto Univ. 6, p.35-442, (1970).

[AsBa] W.Aschbacher, J.M.Barbaroux. Out of equuilibrium correlations in the XY chaain. Lett. Math. Phys. 77, p.11-20, (2006).

[AsPi] W.Aschbacher, C.A.Pillet. Non-equilibrium steady states of the XY chain. J. Stat. Phys. 112, p.1153-1175, (2003).

[BFu] E.Barouch, B.Fuchssteiner. Master symmetries and similarity equations. Stud. Appl. Math. 73, p.221-237, (1985).

[BMcC] E.Barouch, B.M. McCoy. Statistical mechanics of the XY model II. Spin-correlation functions. Phys. Rev.A 3, p.786-8804, (1971).

[Be] V.Berezinskii. Destruction of the long-range order in 1-D and 2-D systems with continuous symmeetry group I. Classical systems. Soviet Physics JETP, 32, p.493-500, (1971).

[BetBrHe] F.Bethuel, H.Brezis, F.Helein. Ginzburg-Landau vortices, Birkhäuser, Basel, (1994).

[BiChSt] M.Biskup, L.Chayes, S.Starr. Quantum spin systems at finite temperature. Commun. Math. Phys. Vol 269, 3, p.611-657, (2007).

[BrFoLa] J.Bricmont, J.Fontaine, J.Landau. On the uniqueness of the equuilibrium state for the plane rotator. Commun. Math. Phys. 56, p.281-286, (1977).

[BuPi] P.Butta, P.Picco. Large-Deviation principle for one-Dimensional vector spin models with Kac potentials. J. Stat. Phys. 92(1-2), p.101-150, (1998).

[Ch] L.Chayes. Discontinuity of the spin-wave stiffness in the 2-D XY model. Commun. Math. Phys. 197, p.623-640, (1998).

[Co] P.Collet. Thermodynamic limit of the Ginzburg-Landau equations. Nonlinearity 7, p.1175-1190, (1994).

[DaManTie] M.Damak, M.Mantoiu, R.Tiedra de Aldecoa. Toeplitz algebras and spetral results for the 1-D Heisenberg model. J. Math. Phys. 47, no. 8, 082107, (2006).

[De] O.Derzhko. Jordan-Wigrer fermionisatioin for spin-1/2 systems in 2-D : a brief review. Preprint arXiv

[Di] H.T.Diep. Physique de la matière condensée. Dunod, Paris, (2003).

[DoSh] R.L.Dobrushin, S.Shlosman. Absence of continuous symmetry in 2-D models of Statistical Physics. Commun. Math. Phys. 42, p.31-40, (1975).

[DyLiSi] F.Dyson E.Lieb, B.Simon. Phase transitions in quantum spin systems with isotropic and anisotropic interactions. J. Stat. Phys. 18(4), p.335-383, (1978).

[ElBRo] H.El-Bouanani, M.Rouleux. Vortices and magnetization in Kac's model. J. Stat. Physics. Vol.28, No.3, p.741-770, (2007).

[FrLi] J.Fröhlich, E.Lieb. Phase transitions in anisotropic lattice spin systems. Commun. Math. Phys. 60, p.233-267, (1978).

[FrSp] J.Fröhlich, T.Spencer. The Kosterlitz-Thouless phase transition in 2-D Abelian spin systems and the Coulomb gas. Commun. Math. Phys. 81, p.527-602, (1981).

[Gi] J.Ginibre. Commun. Math. Phys. p.310, (1977).

[ItDr] Cl.Itzykson, J.M.Drouffe. Théorie statistique des champs I. InterEditions/Editions du CNRS, Paris (1989).

[JoKaKiNe] J.José, L.Kadanov, S.Kirkpatrick, D.Nelson. Phys. Rev. B16, p.1217-1241, (1977).

[Ki] A.Kirillov. Eléments de la Théorie des Représentations, Editions MIR, Moscou, (1974).

[Ko] J.Kosterlitz. The critical properties of the two-dimensional XY model. J.Phys. C7, p.1046-1060, (1974).

[KoTh] J.Kosterlitz, D.Thouless. Ordering, metastability and phaase transitions in 2-D systems. J.Phys. C6, p.1181-1203, (1973).

[LieMatSch] E.Lieb, D.Mattis, T.Schultz. Two-Dimensional Ising Model as a Soluble Problem of Many Fermions. Rev. Mod. Phys. 36, p.856-871, (1964).

[M] P.Minnhagen. The 2-D Coulomb gas, vortex unbinding and superfluid-superconduction films. Rev. Modern Phys. 59, p.1001-1006, (1987).

[Ma] P.Malliavin. Géométrie Différentielle Intrinsèque, Hermann, Paris, (1972).

[McBSp] O.McBrian, T.Spencer. On the decay of correlations inSO(n)-symmetric ferromagnets. Commun. Math. Phys. 53, p.299-302, (1977).

[MeMiPf] A.Messager, S.Miracle, C.Pfister. Correlation inequalities and uniqueness of equilibrium state for the planar rotator ferromagnetic model. Commun. Math. Phys. 58, p.19-29, (1978).

[Mi] J.Milnor. Topology from the differentiable viewpoint, Virginia Univ. Press, (1965).

[OvSi] Y.Ovchinnikov, I.M.Sigal. **1** Ginzburg-Landau Equation I. Static vortices. CRM Proceed. Vol.12, (1997) p.199-220, **2** The energy of Ginzburg-Landau vortices, European J. of Applied Mathematics 13, p.153-178, (2002).

[Pr] E.Presutti. From statistical mechanics towards continuum mechanics. Preprint M.Planck Institut, Leipzig, (1999).

[Si] B.Simon. The Statistical Mechanics of Lattice Gas. Princeton University Press, (1993).

[Sin] Ya.Sinai. Theory of phase transitions : Rigorous results. Pergamon, Oxford (1982).

[Sj] J.Sjöstrand. **1** Singularites analytiques microlocales. Astérisque 95, Soc. Math. France (1982), **2** Complete asymptotics for correlations of Laplace integrals in the semi-classical limit. Mémoires de la Société Mathématique de France Sér.2, 83, p.1-104, (2000).

[Sm] S.Smirnov. Conformal invariance in random cluster models I. Holomorphic fermions in the Ising model. Preprint arXiv 0708.0039v1.

[So] J.M.Souriau. Calcul linéaire. PUF, Paris, (1965).

[vEntRoZa] A.van Enter, S.Romano, V.Zagrebnov. First order transitions for some generalized XY models. J. of Phys. A : Math Gen. 39 p.L439-L445, (2006).

[vEntSh] A.van Enter, S.Shlosman. Provable 1 :st order transitions for nonlinear vector and gauge models with continuous symmetries. Commun. Math. Phys. 225, p.21-32, (2005).

[Vi] J.Villain. J.Physique, 36, p.581, (1975).

Résumé : Cette Thèse est consacrée à l'étude des systèmes de spins à symétrie continue sur un réseau 2-D. Pour le modèle XY, on considère les transitions de phase de seconde espèce [Berezinskii, Kosterlitz et Thouless], en liaison avec la vorticité des états de Gibbs ou des paramètres d'ordre (minimiseurs de l'énergie libre $\mathcal{F}$). Les vortex présentent une analogie avec les interfaces dans le modèle d'Ising ; la symétrie continue du système a toutefois un effet régularisant sur les transitions de phase, excluant en 2-D toute aimantation spontanée, même à basse température, ce qui se traduit par une décroissance des fonctions de corrélation. Pour le modèle d'Heisenberg avec potentiel de Kac, les vortex sont remplacés par des instantons.

Dans le Chapître 1, on rappelle quelques propriétés de l'interaction entre plus proches voisins, pour le rotateur, ou sa version simplifiée appelée modèle de Villain. On introduit aussi le modèle du champ moyen.

Le modèle de Kac, qui partage certains aspects de ces deux modèles, est étudié au Chapître 2. Par un procédé d'homogénéisation, on ramène essentiellement l'étude de la mesure de Gibbs en volume fini à celle de la fonctionnelle énergie libre $\mathcal{F}$, généralisant des techniques utilisées dans le modèle d'Ising.

Les propriétés de vorticité du modèle de Kac sont analysées dans le Chapître 3, où l'on détermine les extrema de $\mathcal{F}$, avec conditions limite. On met ainsi en évidence des configurations très similaires à celles des solutions des équations de Ginzburg-Landau.

Dans le Chapître 4 on passe au cas quantique, en introduisant la notion de "matrice de vorticité" à température inverse β, dont on calcule le "degré non-commutatif". Il apparaît ainsi, pour le modèle XY de spin 1/2, des configurations de vorticité analogues à celles rencontrées dans le cas classique.

Abstract : This Thesis concerns spin systems with continuous symmetry on a 2-D lattice. For XY model we consider second order phase transitions [Berezinskii, Kosterlitz and Thouless], related with vorticity of Gibbs states or order parameters (minimizers of free energy $\mathcal{F}$). Vortices are analogues with interfaces in Ising model ; but internal continuous symmetry smears out phase transitions, excluding in 2-D spontaneous aimantation and allowing for a delay of correlation functions, even at low temperature. For Heisenberg model with Kac potential, vortices are replaced by instantons.

In Part I, we recall some properties of nearest neighbors interactions for the rotator, or its simplified version (Villain model). We also introduce the mean field model.

Kac's model, which relates various aspects of these models is presented in Part II. By homogenization, we essentially reduce properties of Gibbs measure in finite volume to these of $\mathcal{F}$, generalizing techniques used for the Ising model.

In Part III we analyze vorticity for Kac's model, and determine extrema for $\mathcal{F}$, with boundary conditions. We thus arrive at configurations similar to solutions of Ginzburg-Landau equations.

In Part IV, we turn to the quantum case, introducing "vorticity matrices" at inverse temperature β, and compute their "non commutative degree". Thus we obtain for the XY model with spin 1/2, configurations as those we met in the classical case.

Mots clés : Modèle XY, Modèle de Kac, Transitions de phase, Fonctionnelle énergie libre, Vorticité, Instantons.