OÙ PHYSIQUE THÉORIQUE, ANALYSE DE FOURIER ET PROBABILITÉS SE REJOIGNENT.... UN EXEMPLE DE TRANSITION DE PHASES

Sylvie Roelly

Cette note est dédiée, avec émotion, à la mémoire du Professeur Dobrushin disparu récemment.

Quelques mots introductifs

Le but de la mécanique statistique à l'équilibre est d'étudier le comportement de "grands" systèmes de particules se déplaçant dans $\mathbb{R}^d$ et interagissant, après un temps très long d'évolution autonome. La donnée de base est celle du "potentiel" qui génère l'interaction entre les particules.

L'exemple fondamental est celui de la dynamique newtonienne, où l'emplacement $x_{i,t}$ de la particule $i (i \in \mathbb{N})$ au temps t $(t \in \mathbb{R}^+)$ est solution du système d'équations différentielles :

$$(1) \qquad \begin{cases} \frac{d^2}{dt^2} x_{i,t} = -\frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{N}} \nabla \phi(x_{i,t} - x_{i,t}) \\ x_{i,0} \in \mathbb{R}^d \end{cases}$$

ϕ étant la fonction *potentiel* définie sur $\mathbb{R}^d$ à valeurs réelles.

Ce système gradient, déterministe, de second ordre, est particulièrement difficile à résoudre de façon générale.

En introduisant de l'aléatoire dans la donnée initiale, c'est-à-dire en prenant une répartition initiale des particules dans $\mathbb{R}^d$ suivant une loi μ_0 , on peut espérer obtenir des informations sur la loi (ou répartition) au temps t, pour t grand, des particules dans l'espace. De telles lois limites sont des mesures sur $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{N}}$ appelées "mesures d'équilibre", dont la structure spatiale est particulièrement intéressante : Gurevich, Suhov et Dobrushin [1] ont prouvé en 1976 - 1977 que, pour d =1 ou 2, il existe des mesures d'équilibre, et ce sont les *mesures* dites de *Gibbs* associées au potentiel ϕ. Nous illustrerons, dans ce qui suit, dans des contextes plus simples, toute la profondeur de ce résultat.

Le système (1) étant souvent non soluble explicitement nous nous intéresserons à des "caricatures" de celui-ci, où l'introduction de termes aléatoires permettra d'obtenir explicitement au moins la loi de la solution et son comportement asymptotique en temps.

L'équation qui va donc nous occuper sera celle dite de Langevin :

$$(2) \qquad \begin{cases} dx_{i,t} = [\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \nabla_i \phi_{i,j}(x_{i,t}, x_{j,t}) + \frac{1}{2} V'(x_{i,t})] dt + dB_{i,t} \\ i \in \mathbb{N}, t \in \mathbb{R}^+ \end{cases}$$

équation de premier ordre valeurs dans $(\mathbb{R}^d)^{\mathbb{N}}$, où les coordonnées interagissent et la dynamique déterministe est perturbée par un "bruit" que modélisent les mouvements browniens $(B_{i,t})_i$. Avant de faire une étude détaillée d'une certaine équation de Langevin et des mesures d'équilibre associées, faisons quelques rappels sur la stabilité d'un système fini suivant le même type de dynamique.

1. Equilibre(s) d'une particule se déplaçant dans $\mathbb{R}$

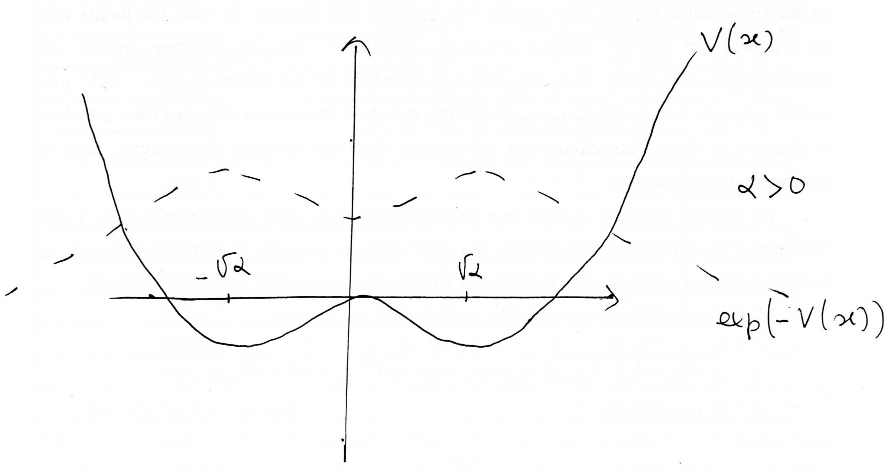
1.1. Dynamique déterministe. — Sous le potentiel V, fonction "régulière" de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$, la dynamique gradient s'écrit :

$$dx_t = -\frac{1}{2}V'(x_t)dt, x \in \mathbb{R}. \tag{3}$$

Les états d'équilibre x_∞ sont bien sûr définis par l'équation $x_\infty = \lim\limits_{x \to +\infty} x_t$, et ceux qui sont stables correspondent aux minima de V.

Exemple : Si l'on prend un oscillateur anharmonique de potentiel $V(x) = \frac{1}{2}x^4 - \alpha x^2$, pour $a > 0$ il y a deux équilibres stables, en $+\sqrt{\alpha}$ et $-\sqrt{\alpha}$.

dessin 1



1.2. Dynamique aléatoire. — En perturbant la dynamique (3) par un "bruit" de type mouvement brownien réel B (i. e. un processus trajectoires continues gaussien centré de covariance $E(B_tB_{t'}) = \inf(t, t')$), l'on obtient l'équation stochastique :

$$dx_t = -\frac{1}{2}V'(x_t)dt + dB_t, x_0 \in \mathbb{R}. \tag{4}$$

On sait résoudre cette équation sans difficultés et expliciter la répartition μ_t de x_t, pour tous temps $t > 0$. En particulier, sous des hypothèses d'intégrabilité de V, on a le résultat suivant bien connu : Il existe une et une seule mesure d'équilibre μ_e, probabilité sur $\mathbb{R}$ satisfaisant $\mu_e = \lim_{t \to +\infty} \mu_t$ et égale à :

$$\mu_e(dx) = cte \cdot exp[-V(x)]dx.$$

On remarque que $exp[-V(x)]$, la densité de présence de la particule à l'équilibre au point x, est maximale quand V est minimale, c'est-à-dire aux points stables de la dynamique déterministe. Reprenons l'exemple de I. 1. : la mesure d'équilibre a une densité symétrique avec deux maxima en $+\sqrt{\alpha}$ et $-\sqrt{\alpha}$ (*cf. dessin* 1).

En conclusion, pour un système gradient à valeurs dans $\mathbb{R}$ de dynamique aléatoire (et le résultat reste vrai pour un système fini, i. e. à valeurs $\mathbb{R}^n$, $n \in \mathbb{N}$), il n'existe (sous des hypothèses de régularité du potentiel) qu'une seule mesure d'équilibre, facile à expliciter.

Nous voyons dans ce qui suit pourquoi et comment ceci n'est plus vrai quand le système devient infini (à valeurs $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^n}$). Cette pathologie est directement liée au problème de construction de mesures sur un produit infini d'espaces.

2. Un exemple de système infini de particules et ses équilibres

Soit le système d'oscillateurs harmoniques classiques suivants :

$$\left\{ \begin{array}{l} dx_{i,t} = [\frac{1}{2} \sum_{j \in \mathbb{Z}^d} a_{ij} x_{j,t} dt + dB_{i,t}, i \in \mathbb{Z}^d \\ (x_{i,0})_{i \in \mathbb{Z}^d} \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d} \end{array} \right. \tag{5}$$

qui s'écrit encore

$$dx_{i,t} = \nabla_i h_i(x_{i,t})dt + dB_{i,t}$$

où $h_i(x) = \sum_j a_{ij} x_i x_j, x \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ est la fonction potentiel hamiltonien (quadratique) déterminant la dynamique, et les $(B_i)_{i \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}}$ forment une suite de processus browniens indépendants.

Nous nous plaçons sous des hypothèses de régularité sur $(h_i)_{i \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}}$ qui assurent existence et unicité des solutions de (5) et nous recherchons les mesures d'équilibre de ce système, i.e. les mesures μ_e sur $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ obtenues comme limite en temps infini des lois du système.

Si l'on s'inspire de la dimension finie [2], il est naturel de penser que formellement μ_e sera proche de

$$cte \cdot exp[\sum_{i \in \mathbb{Z}^d} h_i(x)].\text{"} \prod_{i \in \mathbb{Z}^d} dx_i\text{"}.$$

Comme le produit infini des mesures de Lebesgue et la somme infinie des potentiels h_i n'ont aucun sens, l'on se tourne vers la notion de mesures de Gibbs, introduite vers 1900 par Gibbs et Einstein, qui se restreignent à une définition locale de la mesure.

Plus précisément, désintégrons une mesure μ sur $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ par rapport à ses marginales 1-codimensionnelles :

$$\forall i \in \mathbb{Z}^d \mu(dx) = \int_{\mathbb{R}^i}^{C} \mu(dx_i/x_{i^C})\mu|_{i^C}(dx_{i^C})$$

μ sera dite mesure de Gibbs de potentiel $(h_i)_{i\in\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}}$ si la famille des mesures obtenues désintégration (ou conditionnement) à la forme suivante :

$$\mu(dx_i/x_{i^C}) = cte.e^{-h_i(x)}.dx_i$$

pour $\mu - p.t.x_{i^C}$, où $x_i \in \mathbb{R}, x_{i^C} \in \mathbb{R}^{i^C}$, dx_i est la mesure de Lebesgue et x est l'élément de $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ de $i^{ème}$ coordonnée x_i (resp. de i^c - projection x_{i^c}).

Cette définition étant posée, les deux questions fondamentales sont : pour un potentiel choisi, existe-t-il des mesures de Gibbs associées et y a-t-il unicité de telles mesures ?

Dans ce qui suit nous montrons, pour un certain potentiel quadratique, l'existence de mesures de Gibbs associées via l'analyse de Fourier, et la non-unicité via l'ergodicité du système (5), ce qui nous amènera à la conclusion.

2.1. Mesures gaussiennes sur $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$. — Soit h le potentiel (quadratique) suivant :

$$h_i(x) = \frac{1}{2} \sum_{\substack{j\in\mathbb{Z}^d \\ |j-i|=1}} (x_j - x_i)^2, x \in \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d} \tag{6}$$

Son gradient (linéaire) est donné par la "matrice"

$$A = a_{ij\,(i,j)\in\mathbb{Z}^d} \text{où} \begin{cases} a_{ii} = 2d \\ a_{ij} = 0 si |i-j| > 1 \\ a_{ij} = -1 si |i-j| = 1 \end{cases} \tag{7}$$

On peut montrer [3] qu'une mesure gaussienne μ_A sur $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ de matrice de covariance A^{-1}, si elle existe sera une mesure de Gibbs de potentiel h.

Cherchons donc à construire μ_A. μ_A est définie par sa fonction caractéristique, ou transformée de Fourier,

$$\hat{\mu}_A(y) = \int_{\mathbb{R}}^{\mathbb{Z}^d} e^{i<y,x>} d\mu(x), \text{ y suite finie de } \mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$$

devant satisfaire

$$\hat{\mu}_A(y) = e^{1/2<y,A^{-1}y>} = e^{1/2<A^{1/2}y,A^{1/2}y>}$$

Ceci n'a de sens que si le domaine de l'opérateur $A^{1/2}$ contient l'espace des suites finies de $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$. Montrons que pour l'opérateur A ci-dessus, c'est vrai si et seulement si d est supérieur à 3 (d est la dimension du réseau).

En effet, à A, opérateur de Toeplitz sur $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, on peut associer de façon biunivoque l'opérateur de multiplication sur $L^2([0,2\pi]^d)$ par la fonction

$$\tilde{A}(\alpha) = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \alpha(k)e^{i\alpha.k}, \alpha \in [0,2\pi]^d$$

Donc l'espace des suites finies de $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ est inclus dans $D(A^{-1/2})$ si et seulement si $\tilde{A} \in L^1([0,2\pi]^d)$, ce qui équivaut pour notre exemple, à

$$\tilde{A}(\alpha) = 4\sum_{l=1}^{d} \sin^2(\alpha_\ell/2) \in L^1([0,2\pi]^d)$$

Cette condition est remplie exactement pour $d \geq 3$.

Récapitulons ([4]) : Pour $d \geq 3$, il existe une mesure de Gibbs sur $\mathbb{R}^{\mathbb{Z}^d}$ associé à l'hamiltonien défini en (6). C'est la mesure gaussienne de covariance A^{-1} où A est donné en (7).

2.2. Transition de phases. — L'opérateur A défini par (7) sur $\ell_2\mathbb{Z}^d$ est non borné. Pour $d \geq 3$, il est inversible et son domaine a la propriété souhaitée pour pouvoir construire la mesure gaussienne associée. Mais, on a la pathologie suivante : il existe des vecteurs propres "généralisés" de A associés à la valeur propre 0. Par exemple, le vecteur $m = (...1,1,1,1,1,...) \in \ell_2\mathbb{Z}^d$ satisfait

$$A\, m = 0.$$

Soit V l'espace de tels vecteurs propres.

Il est clair que, pour tout élément m de V , l'image de la mesure μ_A par la translation de vecteur m est une mesure de Gibbs associée au même potentiel h donné en (6) .

Nous venons d'exhiber un exemple de potentiel h pour lequel l'ensemble des mesures de Gibbs associé est non vide, et contient plus d'un élément.

Suivant la terminologie de la mécanique statistique, il y a "transition de phases".

De plus, chaque mesure de Gibbs de la forme $\mu_A(. - m)$, $m \in V$, est effectivement une mesure d'équilibre : la solution de (5) de condition initiale $(x_{i,0})_i = m$ s'écrit encore

$$x_t = e^{tA}m + \int_0^t e^{(t-s)A}.dB_s \tag{8}$$

où cette dernière intégrale représente une convolution stochastique et est indépendante de la condition initiale.

C'est un terme dont la loi converge, quand t tend vers l'infini, vers μ_A. Puisque $m \in V$, $e^(tA)m \equiv m$ et

$$\lim_{t \to +\infty} (\text{loi de } x_t) = \mu_A(. - m).$$

En conclusion, le système infini-dimensionnel (5) génère plusieurs mesures d'équilibre, suivant la condition initiale. Celles-ci sont des mesures de Gibbs associées au potentiel quadratique h donné par (6). Cela reflète un phénomène de transition de phases.

Dans le cas d'un potentiel h quelconque, de nombreux problèmes restent encore ouverts sur la relation entre mesures de Gibbs et mesures d'équilibre [5] .

Références

[1] *B. M. Gurevich, Yu. M. Suhov : Comm. math. phys.* 49 (1976), 54, 56 (1977).

[2] *H. Doss, G. Royer : Z. Wahrsch. Verw. Geb.* 46 (1978).

[3] *R. L. Dobrushin : Advances in Proba. and Rel. Topics* (1987).

[4] *Yu. G. Kondratiev, T. A. Sokol : Selecta Mathematica* 13 (1994).

[5] *P. Cattiaux, S. Roelly, H. Zessin : Prob. Theory and Rel. Fields (sera publié en 1996).*

Sylvie Roelly
UFR de mathématiques
Université de Lille 1
59655 Villeneuve d' Ascq cedex