

GRANDES DÉVIATIONS POUR LES MESURES DE GIBBS I

1. INTRODUCTION

En physique, on décrit un système microscopique à $n \geq 1$ degrés de liberté (généralement, des particules ou des sites) par un espace de configurations Ω_n , de cardinal fini mais typiquement grand. On définit sur cet espace la mesure de Gibbs

$$(1) \quad P_{n,\beta}^{H_n}(\omega) := \frac{\exp(-\beta H_n(\omega))}{Z_{n,\beta}^{H_n}} P_n(\omega),$$

où :

- P_n est une mesure (de probabilité) de référence sur l'espace des configurations Ω_n ;
 - $H_n(\omega)$ est le Hamiltonien, ou l'énergie, associé à la configuration ω ;
 - β est la température inverse du système ;
 - $Z_{n,\beta}^{H_n} := \sum_{\omega \in \Omega_n} \exp(-\beta H_n(\omega)) P_n(\omega)$ est la fonction de partition du système ;
- et qui donne la probabilité de trouver le système dans la configuration ω .

On ne détaille pas ici la justification théorique de cette forme, cela fera l'objet d'une partie du prochain exposé. Remarquons néanmoins que la densité de $P_{n,\beta}^{H_n}$ par rapport à P_n est d'autant plus grande que l'énergie est petite. En particulier, lorsque P_n est la mesure uniforme sur Ω_n , les configurations les plus probables sont celles de plus petite énergie.

Une fonction, ou plus précisément une famille de fonctions $A_n : \Omega_n \rightarrow \mathbb{R}$, est appelée une observable. La limite de la loi de A_n lorsque n tend vers l'infini est appelée limite thermodynamique. Dans l'étude des limites thermodynamiques, un outil pratique est la théorie des grandes déviations. Celle-ci fournit en effet généralement une approximation relativement robuste de la loi de A_n , lorsque n est grand. On donne une très rapide introduction à cette théorie dans la section 2, puis on présente l'exemple de la transition de phase dans le modèle de Curie-Weiss dans la section 3.

2. GRANDES DÉVIATIONS : LE STRICT MINIMUM

On donne ici une introduction extrêmement succincte à la théorie des grandes déviations. On reste à un niveau très informel, dans l'esprit de l'article de Touchette [2]. Une introduction au niveau de rigueur mathématique est donnée dans l'ouvrage de den Hollander [1].

2.1. L'exemple du coin tossing. Soit $(X_i)_{i \geq 1}$ une suite de variables aléatoires indépendantes, telles que $\mathbb{P}(X_i = -1) = \mathbb{P}(X_i = 1) = 1/2$. On note $\bar{X}_n := (1/n) \sum_{i=1}^n X_i \in [-1, 1]$ la moyenne empirique de ces variables. Il est bien connu que :

- par la loi des grands nombres, \bar{X}_n converge en probabilité vers 0 ;
- par le théorème central limite, $\sqrt{n}\bar{X}_n$ converge en loi vers une variable aléatoire normale centrée réduite.

En particulier, pour tout $x > 0$, $\mathbb{P}(\bar{X}_n \geq x)$ tend vers 0. On cherche à quantifier de manière précise cette convergence. Pour cela, notons que $n(\bar{X}_n + 1)/2$ suit la loi binomiale de paramètres $(n, 1/2)$, de sorte qu'un calcul élémentaire (et détaillé dans le premier chapitre de [1]) donne

$$(2) \quad \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}(\bar{X}_n \geq x) = -I(x),$$

et par symétrie, pour tout $x < 0$,

$$(3) \quad \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \log \mathbb{P}(\bar{X}_n \leq x) = -I(x),$$

où

$$(4) \quad I(x) = \begin{cases} \frac{1-x}{2} \log(1-x) + \frac{1+x}{2} \log(1+x) & \text{si } |x| < 1, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

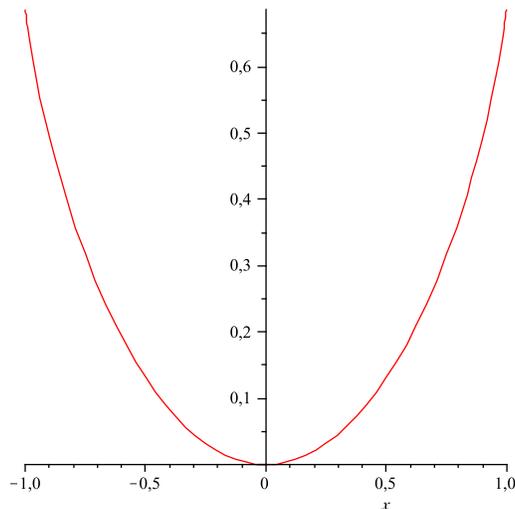


FIGURE 1. La fonction $I(x)$ pour le coin tossing.

En adoptant la notation

$$(5) \quad a_n \asymp b_n \iff \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} (\log a_n - \log b_n) = 0,$$

le résultat ci-dessus se réécrit

$$(6) \quad \mathbb{P}(\bar{X}_n \geq x) \asymp \exp(-nI(x)).$$

La quantité $\mathbb{P}(\bar{X}_n \geq x)$ converge donc exponentiellement vite vers 0, au taux $I(x)$.

2.2. Définition générale et loi des grands nombres. De manière générale, on dit qu'une suite de variables aléatoires $(Z_n)_{n \geq 1}$ à valeurs réelles vérifie un principe de grandes déviations, de vitesse n et de fonction de taux $I : \mathbb{R} \rightarrow [0, +\infty]$, si « moralement »

$$(7) \quad \forall B \subset \mathbb{R}, \quad \mathbb{P}(Z_n \in B) \asymp \exp(-nI(B)), \quad I(B) := \inf_{x \in B} I(x).$$

Il suffit donc de connaître la fonction de taux pour connaître le comportement asymptotique de Z_n . En particulier :

- si la fonction I s'annule en un seul point $x^* \in \mathbb{R}$, Z_n converge en probabilité vers x^* : c'est un résultat de type loi des grands nombres ;
- si la fonction I s'annule en un seul point $x^* \in \mathbb{R}$ et I est deux fois différentiable en x^* , on retrouve un résultat de type théorème central limite en remplaçant $I(x)$ par $I''(x^*)(x-x^*)^2/2$ dans l'écriture du principe de grandes déviations.

Remarque 2.1. Il est en fait plus pratique (et correct) de parler de principe de grandes déviations pour une suite de mesures de probabilité $(\mu_n)_{n \geq 1}$ sur \mathbb{R} , plutôt que pour une suite de variables aléatoires réelles $(Z_n)_{n \geq 1}$. On adoptera ce point de vue dans la suite.

2.3. Tiltting. Les principes de grandes déviations s'obtiennent de manière relativement simple pour des suites de variables iid; c'est l'objet du théorème de Cramér, dont le cas particulier du coin tossing a été étudié plus haut. Pour revenir aux mesures de Gibbs présentées en introduction, disons que sous la mesure de référence P_n , les particules ou sites ont généralement des comportements iid, l'interaction entre ces particules ou sites étant décrite par le Hamiltonien H_n . On dit que $P_{n,\beta}^{H_n}$ est une mesure (exponentiellement) « tiltée » de P_n . Le théorème suivant permet d'obtenir un principe de grandes déviations pour des mesures tiltées.

Théorème 2.2. *Soit $(\mu_n)_{n \geq 1}$ une suite de mesures de probabilité sur \mathbb{R} , qui vérifie un principe de grandes déviations de vitesse n et de taux I . Soit $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction continue, bornée supérieurement. Pour tout $n \geq 1$, définissons la mesure tiltée $\tilde{\mu}_n$ sur \mathbb{R} par*

$$(8) \quad \tilde{\mu}_n(dx) := \frac{\exp(nF(x))}{Z_n} \mu_n(dx), \quad Z_n := \int_{x \in \mathbb{R}} \exp(nF(x)) \mu_n(dx).$$

Alors la suite de mesures de probabilité $(\tilde{\mu}_n)_{n \geq 1}$ vérifie un principe de grandes déviations de vitesse n et de fonction de taux \tilde{I} définie par

$$(9) \quad \tilde{I}(x) := [I(x) - F(x)] - \inf_{y \in \mathbb{R}} [I(y) - F(y)].$$

3. TRANSITION DE PHASE POUR LE MODÈLE DE CURIE-WEISS

Le modèle de Curie-Weiss décrit la magnétisation d'un matériau ferromagnétique dans lequel les spins sont en interaction faible. Pour $n \geq 1$, l'ensemble Ω_n des configurations est $\{-1, 1\}^n$. Une configuration $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n) \in \Omega_n$ décrit l'état dans lequel se trouve chacun des n spins. La magnétisation totale du matériau est

$$(10) \quad \bar{\omega}_n := \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \omega_i,$$

et c'est à la limite thermodynamique de cette observable que l'on s'intéresse.

La mesure de référence P_n est la mesure uniforme sur Ω_n . Sous cette mesure, les ω_i sont iid, et $P(\omega_i = -1) = P(\omega_i = 1) = 1/2$. Le Hamiltonien est défini par

$$(11) \quad H_n(\omega) = -\frac{1}{2n} \sum_{i,j=1}^n \omega_i \omega_j - h \sum_{i=1}^n \omega_i = -n \left(\frac{1}{2} \bar{\omega}_n^2 + h \bar{\omega}_n \right),$$

où $h \in \mathbb{R}$ est le champ magnétique extérieur. On définit, comme dans l'introduction,

$$(12) \quad P_{n,\beta}^h(\omega) := \frac{\exp(-\beta H_n(\omega))}{Z_{n,\beta}^h} P_n(\omega),$$

et l'on note μ_n (respectivement $\mu_{n,\beta}^h$) la loi de $\bar{\omega}_n$ sous P_n (respectivement sous $P_{n,\beta}^h$). Notons que la partie quadratique du Hamiltonien est d'autant plus petite qu'il y a de paires de spins dans le même état. En l'absence de champ magnétique extérieur, les configurations les plus probables sont donc $(-1, \dots, -1)$ et $(1, \dots, 1)$. De même, le terme de champ magnétique est d'autant plus petit qu'il y a de spins du même signe que h .

Notre raisonnement est le suivant :

- (1) on montre que la suite $(\mu_n)_{n \geq 1}$ vérifie un principe de grandes déviations;
- (2) on montre que $\mu_{n,\beta}^h$ est une mesure tiltée de μ_n , ce qui donne un principe de grandes déviations pour la suite $(\mu_{n,\beta}^h)_{n \geq 1}$;
- (3) on étudie la fonction de taux associée pour décrire le comportement asymptotique de $\bar{\omega}_n$ en fonction des paramètres β et h .

3.1. Principe de grandes déviations pour μ_n . Sous la mesure de référence P_n , la suite $(\omega_i)_{i \geq 1}$ est celle étudiée dans le paragraphe consacré au coin tossing. La suite $(\mu_n)_{n \geq 1}$ vérifie donc un principe de grandes déviations de vitesse n et de fonction de taux $I(x)$ décrite en (4).

3.2. **Principe de grandes déviations pour $\mu_{n,\beta}^h$.** Pour tout $x \in [-1, 1]$, posons

$$(13) \quad F_\beta^h(x) := \beta \left(\frac{1}{2}x^2 + hx \right),$$

de sorte qu'on a immédiatement

$$(14) \quad \mu_{n,\beta}^h(dx) = \frac{\exp(nF_\beta^h(x))}{Z_{n,\beta}^h} \mu_n(dx).$$

En appliquant le théorème 2.2, on en déduit que la suite $(\mu_{n,\beta}^h)_{n \geq 1}$ vérifie un principe de grandes déviations de vitesse n et de fonction de taux \tilde{I} donnée par

$$(15) \quad \tilde{I}(x) = \begin{cases} \frac{1-x}{2} \log(1-x) + \frac{1+x}{2} \log(1+x) - \beta \left(\frac{1}{2}x^2 + hx \right) + \Psi(\beta, h) & \text{si } |x| < 1, \\ +\infty & \text{sinon,} \end{cases}$$

où $\Psi(\beta, h)$ est une constante que l'on ne détaille pas.

3.3. **Limite thermodynamique de la magnétisation.** Pour étudier la convergence de $\bar{\omega}_n$, on cherche les zéros de \tilde{I} . Si cette fonction s'annule en un seul point $x^* \in]-1, 1[$, alors $\bar{\omega}_n$ converge en probabilité vers x^* .

Sur $] -1, 1[$, la fonction \tilde{I} est dérivable et

$$(16) \quad \tilde{I}'(x) = \operatorname{argth}(x) - \beta(x + h).$$

Le signe de cette quantité dépend des paramètres $\beta > 0$ et $h \in \mathbb{R}$. Il est clair que celle-ci s'annule en 1, 2 ou 3 points dans $] -1, 1[$. L'étude de la fonction \tilde{I} donne :

- Si $h > 0$, alors pour tout $\beta > 0$, \tilde{I} s'annule en un unique $x_{\beta,h}^* \in]0, 1[$, donc $\bar{\omega}_n$ converge en probabilité vers $x_{\beta,h}^*$: il y a magnétisation spontanée.
- Si $h < 0$, alors pour tout $\beta > 0$, \tilde{I} s'annule en un unique $x_{\beta,h}^* \in]-1, 0[$, donc $\bar{\omega}_n$ converge en probabilité vers $x_{\beta,h}^*$: il y a magnétisation spontanée.
- Si $h = 0$ et $\beta \leq 1$, \tilde{I} s'annule seulement en 0, donc $\bar{\omega}_n$ converge en probabilité vers 0 : le matériau n'est pas magnétisé.
- Si $h = 0$ et $\beta > 1$, \tilde{I} s'annule en trois points $x_\beta^- < 0 < x_\beta^+$, avec $x_\beta^+ = -x_\beta^- < 1$. Dans ce cas, on peut montrer (mais pas pour les mêmes raisons que précédemment) que $\mu_{n,\beta}^0$ converge étroitement vers $(\delta_{x_\beta^-} + \delta_{x_\beta^+})/2$: la magnétisation reste aléatoire à la limite thermodynamique.

Ces conclusions sont représentées sur le diagramme de phase ci-dessous.

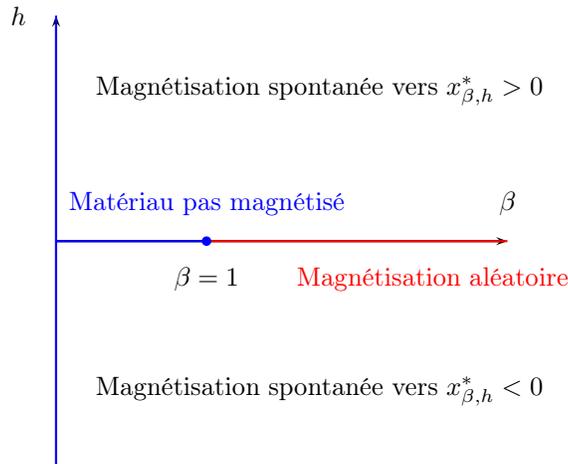


FIGURE 2. Diagramme de phase pour la limite thermodynamique de la magnétisation.

RÉFÉRENCES

- [1] Frank den Hollander : *Large deviations*, volume 14 de *Fields Institute Monographs*. American Mathematical Society, Providence, RI, 2000.
- [2] Hugo Touchette : The large deviation approach to statistical mechanics. *Phys. Rep.*, 478(1-3):1–69, 2009.