Limite thermodynamique et théorie du potentiel

S. Boucksom

Introduction

Comme chacun sait, un système physique à l'équilibre cherche à minimiser son énergie. En présence d'un grand nombre de particules en interaction, la mécanique statistique nous amène cependant à nuancer ce principe, en restreignant sa validité au cas où la température est nulle. À température non nulle, un mouvement désordonné des particules apparaît, qui entre en compétition avec le principe de minimisation de l'énergie. La quantité à minimiser devient alors l'énergie libre, c'est-à-dire l'énergie restant après soustraction de l'entropie, laquelle rend compte à l'échelle macroscopique de l'aléa introduit.

Le but de ce texte est d'ébaucher le formalisme mathématique utilisé pour décrire rigoureusement ces phénomènes, en les illustrant dans le cas classique de l'électrostatique. Commençons par cette dernière. Le champ électrique engendré par une particule ponctuelle placée en un point $y \in \mathbb{R}^d$ et de charge e=-1 dérive d'un potentiel $V_y(x)$ qui satisfait à l'équation de Poisson $\Delta_x V_y(x) = \delta_y$, avec Δ_x le laplacien (des analystes, i.e. défini négatif) et δ_y la masse de Dirac en y.

Il faut imposer une condition au bord pour assurer l'unicité de V_y , et le cadre le plus réaliste consiste sans doute à travailler dans un domaine borné $\Omega \in \mathbb{R}^d$ dont le bord est mis à la masse, de sorte que $V_y|_{\partial\Omega}=0$. Par définition, on obtient alors $V_y(x)=G_\Omega(x,y)$, la fonction de Green de Ω .

En théorie du potentiel classique, on idéalise cette situation en travaillant avec la fonction de Green $G_d(x,y)$ de \mathbb{R}^d , i.e. l'unique solution de $\Delta_x G_d(x,y) = \delta_y$ invariante par translation, explicitement donnée par

$$G_d(x,y) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi} \ln|x - y| \text{ si } d = 2\\ -c_d|x - y|^{2-d} \text{ si } d \ge 3, \end{cases}$$

avec $1/c_d = (d-2)\operatorname{Vol}(S^{d-1})$. Pour $d \ge 3$, ceci revient donc à une mise à la masse à l'infini.

Deux particules identiques x,y de même charge e=-1 se repoussent mutuellement en cherchant à diminuer l'énergie d'interaction $E_2(x,y)=-G_d(x,y)$. On modélise l'interaction d'une configuration de N particules $x_1,...,x_N$ en moyennant les contributions de toutes les paires (« champ moyen »), i.e.

$$E_N(x_1, ..., x_N) = \binom{N}{2}^{-1} \sum_{1 \le i < j \le N} E_2(x_i, x_j). \tag{1}$$

Si l'on cantonne ces particules à un compact $X \subset \mathbb{R}^d$, qu'on pense comme un condensateur sur lequel nos N particules se meuvent librement, celles-ci s'éloigneront de façon à minimiser l'énergie E_N , et la position à l'équilibre sera donc donnée par une configuration $P = (x_1, ..., x_N) \in X^N$ telle que $E_N(P) = \inf_{X^N} E_N$.

Ainsi définies, les configurations à l'équilibre sont loin d'être uniques en général. Fait remarquable, l'unicité est cependant restaurée asymptotiquement lorsque N tend vers l'infini. Plus précisément, une « distribution continue » de charges sur X est décrite par une mesure de probabilité μ , dont l'énergie est donnée par

$$E(\mu) = \iint E_2(x, y) \mu(dx) \mu(dy).$$

L'ensemble $\mathcal{P}(X)$ des mesures de probabilité sur X est compact pour la topologie faible, et la fonctionnelle $E:\mathcal{P}(X)\to\mathbb{R}\cup\{+\infty\}$ est semi-continue inférieurement (sci) par semi-continuité de E_2 . Un point-clé non trivial de la théorie du potentiel est que E est de plus strictement convexe.

Il résulte de ces propriétés la dichotomie suivante. Si $E(\mu) = +\infty$ pour toute mesure $\mu \in \mathcal{P}(X)$, on dit que X est *polaire*, i.e. négligeable ¹ du point de vue de la théorie du potentiel dans \mathbb{R}^d . Sinon,

^{1.} Un tel ensemble est en particulier de mesure de Lebesgue nulle, et même de dimension de Hausdorff au plus d-2.

l'énergie à l'équilibre $\inf_{\mu \in \mathcal{P}(X)} E(\mu)$ est atteinte en une unique mesure $\mu_{\rm eq}$, la mesure d'équilibre de X.

Comme on le verra, l'énergie à l'équilibre « microscopique » inf $_{X^N}E_N$ tend vers l'énergie à l'équilibre « macroscopique » inf $_{\mathcal{P}(X)}E$, et l'unicité asymptotique évoquée ci-dessus signifie que toute suite de configurations $P_N \in X^N$ minimisant E_N s'équirépartit sur la mesure d'équilibre $\mu_{\rm eq}$ lorsque $N \to \infty$. En d'autres termes, on a convergence faible $\delta_N(P_N) \to \mu_{\rm eq}$, avec $\delta_N: X^N \to \mathcal{P}(X)$ l'application mesure empirique, qui associe à une configuration $P = (x_1,...,x_N) \in X^N$ la mesure de probabilité discrète correspondante

$$\delta_N(P) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}.$$
 (2)

S'il est naturel de considérer $(\mathcal{P}(X), E)$ comme la limite de (X^N, E_N) via δ_N , la signification précise de cette convergence n'est pas immédiate. En particulier, on notera que $E \circ \delta_N \equiv +\infty$! L'un des points de ce texte est de proposer une définition de convergence dans un contexte général, que l'on peut penser comme un cas limite (température nulle) de la théorie probabiliste des grandes déviations.

Introduisons maintenant de l'aléa dans le modèle précédent. On se donne une mesure de probabilité de référence $\mu_0 \in \mathcal{P}$ d'énergie $E(\mu_0)$ finie, et on considère une configuration aléatoire $P_N \in X^N$ formée de N particules $x_1,...,x_N \in X$ indépendantes et de même loi μ_0 , de sorte que P_N est de loi μ_0^N . Lorsque ces particules interagissent, cet aléa entre en compétition avec le principe de minimisation de l'énergie; à l'équilibre, la loi de P_N est modifiée pour se concentrer autour des minima de E_N , avec d'autant plus de vigueur que la température T diminue. Comme nous l'enseigne la mécanique statistique, cette nouvelle loi est donnée par la mesure de Gibbs

$$\gamma_{\beta,N} := \frac{1}{Z_{\beta,N}} e^{-\beta N E_N} \mu_0^N,$$

où $\beta=T^{-1}$ est la température inverse et le facteur de normalisation $Z_{\beta,N}=\int_{X^N} \mathrm{e}^{-\beta N E_N} \mu_0^N$, appelé fonction de partition, garantit que $\gamma_{\beta,N}$ est une mesure de probabilité.

On verra qu'on a alors équirépartition d'une configuration typique $P_N \in X^N$ de loi $\gamma_{\beta,N}$ sur une mesure d'équilibre μ_{β} , au sens où la suite de mesures empiriques $\delta_N(P_N)$ converge en loi vers la mesure déterministe μ_{β} . La mesure μ_{β} est caractérisée

comme l'unique minimiseur dans $\mathcal{P}(X)$ de l'énergie libre

$$E(\mu) + \beta^{-1} H(\mu | \mu_0)$$
,

avec $H(\mu|\mu_0) \in [0, +\infty]$ l'entropie relative de μ par rapport à μ_0 , définie par

$$H(\mu|\mu_0) = \begin{cases} \int (f \ln f) \, \mu_0 \text{ si } \mu = f \mu_0 \\ +\infty \text{ sinon} \end{cases}$$

De plus, μ_{β} est elle-même une mesure de Gibbs, de la forme

$$\mu_{\beta} = \frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta U} \mu_0$$

où U est solution de l'équation « champ moyen de type Liouville »

$$-\frac{1}{2}\Delta U = \frac{e^{-\beta U}\mu_0}{\int e^{-\beta U}\mu_0}.$$

1. Entropie et grandes déviations

Le second principe de la thermodynamique a trait à l'existence de l'entropie S, fonction d'état maximisée à l'équilibre étant données les contraintes macroscopiques imposées au système. La célèbre formule de Boltzmann énonce que $S=k\ln\Omega$, où k est la constante de Boltzmann et Ω le nombre d'états microscopiques compatibles avec les contraintes macroscopiques. Pour faire le lien avec le second principe, il faut en fait comprendre cette formule à la « limite thermodynamique », i.e. lorsque le nombre N de particules en présence tend vers l'infini.

Afin de formuler ceci de façon plus précise, considérons un système physique dont les états sont paramétrés par les points d'un espace métrique \mathcal{X} , supposé compact pour simplifier. On représente les contraintes imposées au système par un sous-ensemble (borélien) $B \subset \mathcal{X}$, et le nombre d'états microscopiques correspondant par $\Gamma(B)$, avec Γ une mesure (de Radon) positive sur \mathcal{X} . On peut alors justifier comme suit le second principe à partir de la formule de Boltzmann.

En posant $c(B) := k \ln \Gamma(B)$, on définit une *capacité*, entendue ici comme une fonction $B \mapsto c(B) \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ définie sur les boréliens qui est croissante, continue le long des suites croissantes, et *régulière* ² au sens où

^{2.} On devrait plutôt dire que $B\mapsto \exp c(B)\in [0,+\infty[$ est une précapacité, et le théorème de capacitabilité de Choquet implique de façon générale que la régularité intérieure résulte de la régularité extérieure, $\mathcal X$ étant compact.

$$\sup_{K \text{ compact } \subset B} c(K) = c(B) = \inf_{U \text{ ouvert } \supset B} c(U)$$

pour tout borélien B. À la différence d'une mesure, une capacité n'est pas nécessairement sousadditive, mais notons que la capacité que nous considérons satisfait à

$$c(B_1 \cup B_2) \le \max(c(B_1), c(B_2)) + k \ln 2$$
 (3)

pour tout couple de boréliens $B_1, B_2 \subset \mathcal{X}$.

En physique, la constante de Boltzmann s'écrit k = R/N où R est la constante des gaz parfaits et $N \simeq 6,022.10^{23}$ est la constante d'Avogadro, i.e. le nombre de particules dans une mole de matière. Le passage à la limite thermodynamique consiste à faire tendre N vers l'infini; on est donc amené à travailler avec une suite Γ_N de mesures positives et des capacités associées de la forme

$$c_N(B) = r_N^{-1} \ln \Gamma_N(B) \tag{4}$$

avec $r_N \to +\infty$. Généralisant le cas des mesures, on dira qu'une suite de capacités c_N converge faiblement vers une capacité c si

$$\overline{\lim}_{N} c_{N}(K) \leqslant c(K) \text{ pour tout compact } K;$$

$$\lim_{N} c_{N}(U) \geqslant c(U) \text{ pour tout ouvert } U.$$
 (5)

En utilisant la régularité de la limite c, on voit facilement que celle-ci est unique. Pour c_N de la forme (4), l'inégalité (3) implique que la limite c satisfait à

$$c(B_1 \cup B_2) = \max(c(B_1), c(B_2))$$
 (6)

pour B_1 , B_2 boréliens. Par régularité extérieure de c, la fonction $S(x) := c(\{x\})$ est semi-continue supérieurement. En utilisant (6), on vérifie que $c(K) = \sup_{K} S$ pour tout compact. Par régularité intérieure, on en déduit $c(B) = \sup_{B} S$ pour tout borélien, en accord avec le second principe de la thermodynamique.

On peut en outre décrire plus explicitement la valeur de S en $x \in \mathcal{X}$ comme

$$S(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} \overline{\lim}_{N} c_{N}(B(x,\varepsilon)) = \lim_{\varepsilon \to 0} \underline{\lim}_{N} c_{N}(B(x,\varepsilon)).$$

Dans le contexte probabiliste de la théorie des grandes déviations, formalisée par Varadhan, on considère plutôt la fonction sci I := -S. L'existence d'une limite faible $c(B) = -\inf_B I$ au sens de (5) pour $c_N(B) = r_N^{-1} \ln \Gamma_N(B)$ signifie par définition que la suite de mesures Γ_N satisfait à un principe de grandes déviations à vitesse r_N et fonction de taux I. Le livre [8] propose une excellente introduction à

cette théorie. On consultera aussi à profit la référence [7], très complète.

Si chaque Γ_N est une mesure de probabilité, définissant un état aléatoire x_N de \mathcal{X} , alors $\inf_{\mathcal{X}} I =$ $\lim_{N} c_{N}(\mathcal{X}) = 0$. Le contenu essentiel du principe de grandes déviations est que les états aléatoires x_N se concentrent à vitesse exponentielle vers les minima de I, au sens où tout voisinage U des minima de I satisfait à

$$\mathbb{P}(x_N \notin U) := \Gamma_N(\mathcal{X} \setminus U) = O(e^{-c \, r_N}) \tag{7}$$

avec c > 0. En particulier, si l est minimisée en un unique point $x_{eq} \in \mathcal{X}$ (l'état d'équilibre), alors les états aléatoires x_N convergent en loi vers l'état déterministe x_{eq} .

2. Le point de vue fonctionnel

Considérons une suite de capacités c_N sur \mathcal{X} de l'un des deux types suivants :

- (a) $c_N(B) = r_N^{-1} \ln \Gamma_N(B)$ avec Γ_N mesure positive sur \mathcal{X} et $r_N \to +\infty$;
- (b) $c_N(B) = -\inf_B I_N$ avec I_N sci sur \mathcal{X} .

Comme on l'a vu plus haut, si c_N converge faiblement vers une capacité c, alors celle-ci vérifie (6), donc est nécessairement de la forme $c(B) = -\inf_B I$ avec I sci sur \mathcal{X} . Dans le cas (a), ceci correspond à un principe de grandes déviations pour Γ_N .

Dans le cas (b), on dira que la suite de fonctions sci I_N converge faiblement vers I. D'après la première condition de (5), on a alors en particulier $\underline{\lim}_{N} \inf_{K} I_{N} \ge \inf_{K} I$ pour tout compact K, propriété dont on peut vérifier qu'elle équivaut à $\lim_{N} I_{N}(x_{N}) \ge I(x)$ pour toute suite convergente $x_N \rightarrow x$. En utilisant ceci, on obtient :

Proposition 1. Supposons que c_N converge faiblement vers une capacité $c(B) = -\inf_B I$, et que I soit minimisée en un unique point $x_{eq} \in \mathcal{X}$. Dans les cas (a) et (b), on a alors respectivement:

- (a) l'état aléatoire $x_N \in \mathcal{X}$ de loi $\Gamma_N := \Gamma_N / \Gamma_N(\mathcal{X})$ converge en loi vers l'état déterministe x_{eq} ;
- (b) toute suite $x_N \in \mathcal{X}$ telle que $I_N(x_N) = \inf_{\mathcal{X}} I_N$ converge vers x_{eq} .

Définissons ensuite des fonctionnelles Λ_N : $C^0(\mathcal{X}) \rightarrow \mathbb{R}$ en posant respectivement pour $\Phi \in C^0(\mathcal{X})$

- $\begin{array}{ll} \text{(a)} & \Lambda_N(\Phi) = -r_N^{-1} \ln \int \mathrm{e}^{-r_N \Phi} \, d\Gamma_N \, ; \\ \text{(b)} & \Lambda_N(\Phi) = \inf_{\mathcal{X}} (I_N + \Phi). \end{array}$

Dans les deux cas, Λ_N est concave sur $C^0(\mathcal{X})$ (par l'inégalité de Hölder, dans le cas (a)); elle est aussi clairement croissante et satisfait à $\Lambda_N(\Phi+c)=\Lambda_N(\Phi)+c$ pour $c\in\mathbb{R}$, ces deux propriétés impliquant que Λ_N est 1-lipschitzienne.

Le résultat suivant est dû à Bryc et Varadhan dans le cas (a) (cf. [7, Chapitre 4]), et s'adapte aisément au cas (b).

Proposition 2. Une suite de capacités c_N de la forme (a) ou (b) converge faiblement vers une capacité c si et seulement si la suite Λ_N converge simplement vers une fonctionnelle $\Lambda: C^0(\mathcal{X}) \to \mathbb{R}$.

De plus, la fonction sci I définie par $I(x) := \sup_{\Phi} (\Lambda(\Phi) - \Phi(x))$ satisfait alors à $c(B) = -\inf_{B} I$ et $\Lambda(\Phi) = \inf_{\mathcal{X}} (I + \Phi)$.

Supposons maintenant que \mathcal{X} soit réalisé comme un compact du dual topologique V^* d'un espace de Banach V, muni de la topologie \star -faible. En pratique pour nous, \mathcal{X} sera l'espace des mesures de probabilité sur un autre espace métrique compact X, et donc $V = C^0(X)$. On s'intéresse alors à la stricte convexité de I, propriété qui a le bon goût de garantir l'unicité d'un éventuel minimiseur, comme dans la proposition 1. On introduit pour cela sa transformée de Legendre concave $F: V \to \mathbb{R}$ en posant pour $\phi \in V$

$$F(\phi) := \inf_{x \in \mathcal{X}} (I(x) + \langle \phi, x \rangle) \tag{8}$$

qui coïncide donc avec $\Lambda(\langle \phi, \cdot \rangle)$ avec Λ définie comme ci-dessus et $\langle \phi, \cdot \rangle \in C^0(\mathcal{X})$ la forme linéaire induite par ϕ . Un peu d'analyse convexe permet alors de montrer que les conditions suivantes sont équivalentes :

- (i) I est strictement convexe;
- (ii) pour tout $\phi \in V$, l'infimum définissant $F(\phi)$ est atteint en un unique $x_{\phi} \in \mathcal{X}$;
- (iii) F est dérivable au sens de Gâteaux (i.e. en restriction à toute droite).

Lorsqu'elles sont satisfaites, la dérivée de F en ϕ est donnée par $x_{\phi} = \nabla F(\phi)$, et on reconstruit I via

$$I(x) = \sup_{\phi \in V} (F(\phi) - \langle \phi, x \rangle), \tag{9}$$

par dualité de Legendre. Ceci motive le théorème suivant, dû à Gärtner et Ellis dans le cas (a) (cf. [7, §4.5.3]), et s'adaptant à nouveau sans peine au cas (b).

Théorème 1. Les conditions suivantes sont équivalentes :

- (i) une suite de capacité c_N de la forme (a) ou (b) converge faiblement vers c(B) = - inf_B I avec I strictement convexe sur V*;
- (ii) la suite de transformées de Legendre concaves F_N définies par (8) admet une limite finie $F(\phi)$ pour tout $\phi \in V$, et F est dérivable au sens de Gâteaux sur V.

La fonction I est alors donnée par (9).

Comparé à la proposition 2 de Bryc-Varadhan, la condition imposée dans (ii) est plus faible, puisqu'elle ne demande la convergence de Λ_N que sur le sous-espace V^* des formes linéaires dans $C^0(\mathcal{X})$. Comme nous le verrons plus loin, cet énoncé fournit un moyen efficace d'établir un principe de grandes déviations.

3. Particules en interaction

On s'intéresse ici à un système formé d'un grand nombre de particules identiques, et à sa limite macroscopique.

Pour formaliser ceci, on se donne un espace métrique compact X, l'espace des états internes de notre particule type. Dans le cas de l'électrostatique, X est un compact de \mathbb{R}^d à l'intérieur duquel se meut librement une particule négativement chargée. On appelle les fonctions $\phi \in C^0(X)$ les observables internes.

Un état macroscopique du système est donné par une « distribution » de particules identiques, qu'on formalisera par un élément μ de l'espace $\mathcal{P} = \mathcal{P}(X)$ des mesures de probabilité sur X, appelé l'espace des états macroscopiques ; l'espace \mathcal{P} est lui-même métrique compact pour la convergence faible des mesures, et on pourra donc lui appliquer les considérations du §1.

On appellera observable macroscopique une fonction continue $\Phi \in C^0(\mathcal{P})$. Toute observable interne $\phi \in C^0(X)$ définit une observable macroscopique Φ par moyennisation, i.e. $\Phi(\mu) = \langle \phi, \mu \rangle$.

Un état microscopique de notre système est donné par une configuration de N particules identiques, donc un point $P=(x_1,...,x_N)$ de X^N . Tout état microscopique détermine un état macroscopique via l'application mesure empirique $\delta_N: X^N \to \mathcal{P}$ qui associe à $P=(x_1,...,x_N) \in X^N$ la mesure de probabilité

$$\delta_N(P) := \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{x_i}.$$

On note que δ_N induit un homéomorphisme $X^N/\mathcal{S}_N\simeq \delta_N(X^N)$, où le groupe symétrique \mathcal{S}_N agit sur X^N par permutation des facteurs, et que la réunion des $\delta_N\left(X^N\right)$ est dense dans \mathcal{P} .

Pour chaque N, on modélise les interactions entre N points par une énergie d'interaction microscopique E_N , qui est par définition une fonction symétrique sci $E_N: X^N \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$. Les configurations à l'équilibre sont celles qui minimisent E_N .

Exemple 1 (Champ moyen). Un modèle « champ moyen » consiste à se donner l'énergie d'interaction E_2 des paires de points de X, et à définir E_N en moyennant les contributions des paires de points comme dans (1).

Outre le cas de l'électrostatique mentionné dans l'introduction, on considère classiquement le potentiel de Riesz $E_2(x,y) = |x-y|^{-s}$, ou encore le potentiel « sphère dure de rayon r »

$$E_2(x,y) = \begin{cases} +\infty \text{ si } |x-y| \leqslant r \\ 0 \text{ sinon.} \end{cases}$$

Tout ces modèles sont répulsifs, au sens où $E_2(x,x)=+\infty$. À l'opposé, un modèle attractif bien connu est celui de Curie-Weiss, approximation à champ moyen du modèle d'Ising d'interaction entre des spins. On a ici $X=\{-1,1\}$, et l'énergie d'interaction de deux spins $\sigma,\sigma'\in X$ est donnée par $E_2(\sigma,\sigma')=-J\sigma\sigma'$ avec J>0.

Plus généralement, on dira que l'interaction est d'ordre r si E_N est la moyenne des interactions entre r points, i.e.

$$E_N(x_1,...,x_N) = {N \choose r}^{-1} \sum_{1 \le i_1 \le ... \le i_r \le N} E_r(x_{i_1},...,x_{i_r}). \quad (10)$$

On mentionnera plus loin le cas de la répulsion déterminantale, qui n'est pas d'ordre r en général.

Puisque E_N est symétrique par hypothèse, elle descend au quotient $X^N/\mathcal{S}_N\simeq \delta_N(X^N)$. On peut donc la voir comme une fonction sci $\widetilde{E}_N:\mathcal{P}\to\mathbb{R}\cup\{+\infty\}$ en posant $\widetilde{E}_N\equiv+\infty$ sur $\mathcal{P}\setminus\delta_N(X^N)$.

On dira que E_N admet une limite macroscopique $E: \mathcal{P} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ si \widetilde{E}_N converge faiblement vers E au sens du §2. Plus concrètement, ceci signifie donc

$$\overline{\lim}_{N}\inf_{\delta_{N}^{-1}(U)}E_{N}\leqslant\inf_{U}E\text{ pour tout ouvert }U\subset\mathcal{P};$$

$$\underline{\lim}_{N}\inf_{\delta_{N}^{-1}(K)}E_{N}\geqslant\inf_{K}E\text{ pour tout compact }K\subset\mathcal{P},$$
(11)

ou de façon équivalente (proposition 2)

$$\inf_{\mathcal{L}_N}(E_N + \Phi \circ \delta_N) \to \inf_{\mathcal{D}}(E + \Phi)$$

pour toute observable macroscopique $\Phi \in C^0(\mathcal{P})$.

Lorsque E admet un unique minimiseur $\mu_{\rm eq}$, la proposition 1 entraı̂ne que toute suite $P_N \in X^N$ minimisant E_N s'équirépartit sur $\mu_{\rm eq}$.

Ceci est en particulier le cas lorsque E_N admet une limite macroscopique E strictement convexe, ce qui, d'après le théorème 1, se produit si et seulement si les fonctionnelles concaves $F_N: C^0(X) \to \mathbb{R}$ définies par

$$F_N(\phi) = \inf_{x^N} (E_N + \langle \phi, \delta_N \rangle)$$

convergent simplement vers une fonctionnelle Gâteaux dérivable $F: C^0(X) \to \mathbb{R}$, qui satisfait alors

$$E(\mu) = \sup_{\phi \in C^{0}(X)} (F(\phi) - \langle \phi, \mu \rangle).$$

Cela fournit un outil puissant pour démontrer l'existence d'une limite macroscopique lorsqu'on ne sait pas la deviner *a priori*, comme dans le cas de l'interaction déterminantale discutée plus bas.

Afin d'illustrer la notion de limite macroscopique, considérons le cas où l'énergie d'interaction microscopique est d'ordre r au sens de (10), ce qui couvre par exemple le cas de l'électrostatique classique discutée dans l'introduction. Il est naturel de s'attendre à ce que la limite macroscopique soit donnée par $E(\mu) := \langle E_r, \mu^r \rangle$. Ceci est confirmé par le résultat suivant

Théorème 2. Si E_N est d'ordre k, alors E_N admet comme limite macroscopique la fonction sci $E: \mathcal{P} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ définie par $E(\mu) = \langle E_r, \mu^r \rangle$.

Sans hypothèse supplémentaire, il arrive que $E \equiv +\infty$ sur \mathcal{P} . Pour l'énergie électrostatique considérée dans l'introduction, c'est le cas si X est polaire, par définition.

Preuve. On va montrer que $\inf_{X^N}(E_N + \Phi \circ \delta_N)$ converge vers $\inf_{\mathcal{P}}(E + \Phi)$ pour toute $\Phi \in C^0(\mathcal{P})$. En intégrant (10) contre μ^N avec $\mu \in \mathcal{P}$, on trouve

$$\langle E_N, \mu^N \rangle = \langle E_r, \mu^r \rangle = E(\mu)$$

pour tout N. D'un autre côté, la loi des grands nombres montre que la suite de mesures sur \mathcal{P} $(\delta_N)_*\mu^N$ converge faiblement vers la masse de Dirac en μ , i.e. $\langle \Phi \circ \delta_N, \mu^N \rangle \to \Phi(\mu)$. Puisque

$$\inf_{X^N}(E_N + \Phi \circ \delta_N) \leqslant \langle E_N + \Phi \circ \delta_N, \mu^N \rangle,$$

il en résulte que $\overline{\lim}\inf_{X^N}(E_N+\Phi\circ\delta_N)\leqslant E(\mu)+\Phi(\mu)$ pour tout $\mu\in\mathcal{P}.$

Considérons maintenant l'inégalité inverse. Puisque E_r est sci, elle coïncide avec le sup des fonctions $G \in C^0(X^r)$ symétriques telles que $G \leqslant E_r$. Pour tout $P = (x_1, ..., x_N) \in X^N$ on a

$$E_N(x_1,...,x_N) \ge {N \choose r}^{-1} \sum_{i_1 \le ... \le i_r} G(x_{i_1},...,x_{i_k}).$$

Par symétrie de G, on observe que

$$r! \sum_{i_1 < \dots < i_r} G(x_{i_1}, \dots, x_{i_r}) = N^k \langle G, \delta_N(P)^r \rangle + O(N^{r-1}).$$

Puisque $\binom{N}{r} \sim N^r/r!$, on en déduit

$$E_N(P) \ge \langle G, \delta_N(P)^k \rangle + O(N^{-1}),$$
 (12)

où la constante dans le O dépend de G, mais pas de $P \in X^N$.

On choisit maintenant une suite $N_k \to +\infty$ telle que

$$\underline{\lim}_{N}\inf_{X^{N}}(E_{N}+\Phi)=\lim_{k}\inf_{X^{N_{k}}}(E_{N_{k}}+\Phi)$$

et $P_k \in X^{N_k}$ minimisant $E_{N_k} + \Phi$. Quitte à passer à une sous-suite, on peut supposer que $\delta_{N_k}(P_k)$ admet une limite $\mu \in \mathcal{P}$. D'après (12), on a

$$\begin{split} & \underbrace{\lim_{N} \inf_{X^{N}} (E_{N} + \Phi)} \\ & \geqslant \lim_{k} \Big(\langle G, \delta_{N_{k}}(P_{k})^{r} + \Phi(\delta_{N_{k}}(P_{k})) \rangle + O(N_{k}^{-1}) \Big) \\ & = \langle G, \mu^{r} \rangle + \Phi(\mu). \end{split}$$

En prenant le sup sur $G \leq E_r$, on conclut

$$\underline{\lim}_{N}\inf_{X^{N}}(E_{N}+\Phi)\geqslant\langle E_{r},\mu^{r}\rangle+\Phi(\mu)\geqslant\inf_{\mathcal{P}}(E+\Phi).$$

4. Électrostatique dans \mathbb{R}^d et dans \mathbb{C}^n

On considère d'abord plus en détail le cas de l'électrostatique dans un compact $X \subset \mathbb{R}^d$, discuté dans l'introduction. Les interactions sont d'ordre r=2, et $E_2(x,y)=-G_d(x,y)$, avec G_d la fonction de Green de \mathbb{R}^d . Le théorème 2 montre que la limite macroscopique de

$$E_N(x_1,...,x_N) = {N \choose 2}^{-1} \sum_{i < j} E_2(x_i,x_j)$$

est donnée par l'énergie

$$E(\mu) = \iint E_2(x, y) \mu(dx) \mu(dy),$$

Un point essentiel de la théorie du potentiel est que E est *strictement convexe* sur les mesures de probabilité μ à support compact dans \mathbb{R}^d .

On dit que X est *polaire* si X ne porte aucune mesure μ d'énergie finie, ce qui équivaut donc à $\inf_{X^N} E_N \to +\infty$. Si X n'est pas polaire, la stricte convexité de E implique que celle-ci est minimisée par une unique mesure $\mu_{\rm eq} \in \mathcal{P}(X)$, la *mesure d'équilibre* de X, qui décrit la distribution macroscopique des charges électriques sur X à l'équilibre, et sur laquelle s'équirépartit toute suite $P_N \in X^N$ de configurations minimisant E_N , d'après la proposition 1.

Afin de décrire la mesure d'équilibre, appelons potentiel une fonction sous-harmonique V sur \mathbb{R}^d telle que $V(x) \to 0$ (resp. $V(x) - \frac{1}{2\pi} \ln |x| \to 0$) à l'infini pour $d \geqslant 3$ (resp. d=2). Une fonction harmonique et bornée sur \mathbb{R}^d étant constante, un potentiel V est uniquement déterminé par la mesure positive $\mu = \Delta V$, dont on montre qu'elle est automatiquement de masse 1 dans le cas d=2. On dit que V est le potentiel de μ .

Réciproquement, toute mesure de probabilité μ à support compact dans \mathbb{R}^d admet un potentiel V_μ , donné par

$$V_{\mu}(x) = \int G_{d}(x, y) \mu(dy).$$

La mesure μ est d'énergie finie si et seulement si $V_{\mu} \in L^{1}(\mu)$, avec $E(\mu) = -\int V_{\mu} d\mu$.

On montre que le potentiel de la mesure d'équilibre $\mu_{\rm eq}$ de $X\subset \mathbb{R}^d$ est l'unique potentiel $V_{\rm eq}$ qui est harmonique en dehors de X et constant q.p. sur X, q.p. étant une abréviation de « quasi-partout », i.e. en dehors d'un ensemble polaire. La mesure de probabilité $\mu_{\rm eq}=\Delta V_{\rm eq}$ ne chargeant pas de tels ensembles, la constante c telle que $V_{\rm eq}=c$ q.p. sur X est donnée par

$$c = \int V_{\text{eq}} d\mu_{\text{eq}} = -E(\mu_{\text{eq}}) = -\inf_{\mathcal{P}(X)} E.$$

Pour $d \geqslant 3$, on considère plutôt la fonction superharmonique $U_{\rm eq} = c^{-1} V_{\rm eq}$, qui est harmonique hors de X, vaut 1 q.p. sur X et 0 à l'infini, et on définit la capacit'e du condensateur X comme la charge totale

$$c(X) = -\int_X \Delta U_{\text{eq}} = 1/\inf_{\mathcal{P}(X)} E.$$

Dans le cas d=2, on définit le N-diamètre d'un compact $X \subset \mathbb{R}^2 = \mathbb{C}$ comme le maximum de la moyenne géométrique des distances entre N points de X, i.e.

$$d_N(X) := \sup_{(z_1, \dots, z_N) \in X^N} \prod_{i < j} |z_i - z_j|^{2/N(N-1)},$$

le diamètre usuel de X étant donc $d_2(X)$. Une configuration $P=(z_1,...,z_N)\in X^N$ réalisant le sup de droite est appelée configuration de Fekete. Ces points jouent un rôle important en théorie de l'interpolation polynomiale, car les polynômes de Lagrange associés

$$P_i(z) = \prod_{j \neq i} (z - z_j) / \prod_{j \neq i} (z_i - z_j),$$

qui satisfont à $P_i(z_j) = \delta_{ij}$, sont de norme sup au plus 1 sur X.

On observe que $d_N(X) = e^{-2\pi\inf_{X^N} E_N}$, et que les configurations de Fekete sont celles qui minimisent l'énergie E_N sur X^N . La convergence de E_N vers E entraı̂ne donc l'existence de la limite

$$d_{\infty}(X) = \lim_{N} d_{N}(X) = e^{-2\pi \inf_{\mathcal{P}(X)} E},$$

appelée diamètre transfini (ou capacité logarithmique) de X, ainsi que l'équirépartition des configurations de Fekete sur la mesure d'équilibre $\mu_{\rm eq}$.

On se tourne maintenant vers le cas de l'interaction déterminantale en n variables complexes. On note

$$N_k = \binom{n+k}{n} = \frac{k^n}{n!} + O(k^{n-1})$$

la dimension de l'espace des polynômes complexes en n variables et de degré au plus k, et on introduit le déterminant de Vandermonde généralisé

$$V_k(z_1,...,z_{N_k}) := \det(z_i^{\alpha})_{\alpha \in \mathbb{N}^n, |\alpha| \leqslant k}^{1 \leqslant i \leqslant N_k},$$

bien défini modulo ± 1 (choix d'un ordre pour les monômes). Pour un compact $X\subset \mathbb{C}^n$, on définit l'énergie d'interaction déterminantale $E_k:X^{N_k}\to \mathbb{R}\cup \{+\infty\}$ en posant

$$E_k = -\frac{1}{kN_k} \ln |V_k|^2.$$

En dimension n = 1, on a $N_k = k + 1$,

$$V_k(z_1,...,z_{N_k}) = \det(z_i^{j-1})_{1 \le i,j \le N_k} = \prod_{1 \le i < j \le N_k} (z_j - z_i),$$

et donc

$$E_k(z_1,...,z_{N_k}) = \frac{2}{N_k(N_k-1)} \sum_{i < j} \ln|z_i - z_j|^{-1},$$

qui redonne le cas de l'électrostatique dans $\mathbb{C} = \mathbb{R}^2$.

Les configurations $(z_1,...,z_{N_k})$ maximisant $|V_k|$ sur X^{N_k} sont à nouveau appelées configurations de Fekete, avec des polynômes de Lagrange associés

$$P_i(z) = \frac{V_k(z_1, ..., z_{i-1}, z, z_{i+1}, ..., z_{N_k})}{V_k(z_1, ..., z_{N_k})}$$

de norme sup au plus 1 sur X. Dans les années 50, Leja introduit le k-diamètre

$$d_k(X) := \exp\left(-\inf_{X^{N_k}} E_k\right) = \sup_{z_i \in X} |V_k(z_1, ..., z_{N_k})|^{2/kN_k}$$

et postule l'existence d'un diamètre transfini $d_{\infty}(X) = \lim_k d_k(X)$, démontrée par Zakharyuta dans les années 70 via un argument non trivial de sous-additivité.

On aimerait cependant aller plus loin et montrer l'existence d'une limite macroscopique E des E_N , comme dans le cas d'une variable complexe. La difficulté dans ce cas est qu'on ne peut plus deviner la forme de la limite, et l'approche suivie dans [5] consiste à travailler avec la transformée de Legendre concave

$$F_k(\phi) := \inf_{X^{N_k}} (E_k + \langle \phi, \delta_{N_k} \rangle)$$

$$= -\frac{1}{kN_k} \ln \sup_{z_i \in X} |V_k(z_1, ..., z_{N_k})|^2 e^{-2k(\phi(z_1) + ... + \phi(z_{N_k}))}.$$

En utilisant des résultats sur l'asymptotique des noyaux de Bergman et une bonne dose de théorie du pluripotentiel, on démontre l'existence d'une limite $F(\phi)$, Gâteaux dérivable. Le théorème 1 montre alors que la limite macroscopique E de E_N existe, et qu'elle est strictement convexe, donnée par

$$E(\mu) = \sup_{\phi \in C^{0}(X)} (F(\phi) - \langle \phi, \mu \rangle).$$

On obtient en particulier l'équirépartition des points de Fekete sur la mesure d'équilibre, établie dans [6].

Grâce à l'approche variationnelle pour l'opérateur de Monge-Ampère complexe développée dans [4], on peut donner de cette énergie pluricomplexe E la description suivante. Toute mesure $\mu \in \mathcal{P}(X)$ telle que $E(\mu) < +\infty$ s'écrit comme la mesure de Monge-Ampère complexe $\mu = (i \partial \overline{\partial} V_{\mu})^n$ (en

un sens faible adéquat) d'une fonction plurisousharmonique V_{μ} sur \mathbb{C}^n à croissance logarithmique, unique à une constante additive près; on a alors

$$\begin{split} E(\mu) &= \sum_{j=0}^{n-1} \frac{j+1}{n+1} \int_{\mathbb{C}^n} i \partial (V_{\mu} - V_0) \wedge \overline{\partial} (V_{\mu} - V_0) \\ &\wedge (i \partial \overline{\partial} V_{\mu})^j \wedge (i \partial \overline{\partial} V_0)^{n-j-1} - \langle V_0, \mu \rangle, \end{split}$$

avec $V_0(z) = \max_i \ln^+ |z_i|$. On peut voir cette formule comme une version non-linéaire de la fonctionnelle de Dirichlet classique, et constater que la convergence de

$$E_k(z_1,...,z_{N_k}) = -\frac{1}{kN_k} \ln \left| \det (z_i^{\alpha})_{1 \leqslant i \leqslant N_k, |\alpha| \leqslant k} \right|^2$$

vers $E(\mu)$ ne saute pas aux yeux!

Énergie libre et mesures de Gibbs

On résume ici quelques faits élémentaires du formalisme thermodynamique. On pourra par exemple consulter le chapitre 5 de [8] pour plus de détails.

Considérons comme au §1 un espace métrique compact $\mathcal X$ paramétrant les états d'un système physique. On se donne une fonction d'énergie sci $U:\mathcal X\to\mathbb R\cup\{+\infty\}$, de sorte que les états à l'équilibre sont les $x\in\mathcal X$ qui minimisent U.

Si l'on considère un état aléatoire $x \in \mathcal{X}$ de loi Γ_0 , l'aléa entre en compétition avec le principe de minimisation de l'énergie. À température inverse $\beta = T^{-1} > 0$ fixée, le *principe variationnel de Gibbs* nous dit qu'à l'équilibre, le système se place dans un nouvel état aléatoire, de loi Γ minimisant l'énergie libre

$$\langle U, \Gamma \rangle + \beta^{-1} H(\Gamma)$$
 (13)

où $\langle U, \Gamma \rangle$ est l'énergie moyenne et $H(\Gamma) = H(\Gamma|\Gamma_0)$ est l'entropie relative de Γ par rapport à Γ_0 , définie par

$$H(\Gamma|\Gamma_0) = \begin{cases} \int (f \ln f) \Gamma_0 \text{ si } \Gamma = f \Gamma_0 \text{ absolument continue;} \\ +\infty \text{ sinon.} \end{cases}$$

L'inégalité de Jensen implique que $H(\Gamma) \geqslant 0$, avec égalité si et seulement si $\Gamma = \Gamma_0$. L'entropie relative H est caractérisée comme la transformée de Legendre

$$H(\Gamma) = \sup_{\Phi \in C^{0}(\mathcal{X})} (\langle \Phi, \Gamma \rangle - L(\Phi))$$
 (14)

de la fonctionnelle convexe $L: C^0(\mathcal{X}) \to \mathbb{R}$ définie par $L(\Phi) := \ln \int e^{\Phi} d\Gamma_0$, ce qui montre en particulier que $H: \mathcal{P}(\mathcal{X}) \to [0, +\infty]$ est sci et strictement convexe, L étant Gâteaux dérivable.

On vérifie facilement que l'énergie libre (13) admet un unique minimiseur sur $\mathcal{P}(\mathcal{X})$, donné par la mesure de Gibbs (connue en mécanique statistique sous le nom de statistique de Maxwell-Boltzmann ou ensemble canonique)

$$\Gamma_{\beta} := \frac{1}{Z_{\beta}} e^{-\beta U} \Gamma_{0},$$

où $Z_{\beta}=\int {\rm e}^{-\beta U}\Gamma_0$ est un facteur de normalisation appelé fonction de partition. On a de plus

$$\inf_{\Gamma \in \mathcal{P}(\mathcal{X})} \left(\langle U, \Gamma \rangle + \beta^{-1} H(\Gamma) \right) = -\beta^{-1} \ln Z_{\beta}. \tag{15}$$

Lorsque $\beta \to +\infty$ (i.e. $T \to 0$), la mesure de Gibbs $\Gamma_{\!\beta}$ se concentre exponentiellement vite vers les minima de U via un principe de grandes déviations, et c'est donc l'ordre qui prédomine. Pour $\beta \to 0$, $\Gamma_{\!\beta}$ converge vers l'aléa original $\Gamma_{\!0}$, et c'est le désordre qui l'emporte.

6. Particules aléatoires en interaction

On se place maintenant dans le cadre du §3. On considère donc N particules identiques $P = (x_1,...,x_N) \in X^N$, qui interagissent via une énergie microscopique E_N , dont on suppose qu'elle admet une limite macroscopique $E: \mathcal{P} \to \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ lorsque $N \to \infty$.

On soumet chaque particule à un aléa interne, de loi $\mu_0 \in \mathcal{P}(X)$. Comme on l'a vu au §5, l'état microscopique à l'équilibre à température inverse $\beta > 0$ est une configuration aléatoire $P_N \in X^N$ de loi donnée par la mesure de Gibbs

$$\gamma_{\beta,N} := \frac{1}{Z_{\beta,N}} e^{-\beta N E_N} \mu_0^N. \tag{16}$$

On espère alors montrer que la loi de la mesure empirique $\delta_N(P_N)$ se concentre exponentiellement vite vers les minima d'une fonctionnelle, qui jouera le rôle de l'énergie libre macroscopique.

D'après le §2, il suffit pour cela d'établir la convergence faible des capacités sur $\mathcal P$ définies par

$$c_{\beta,N}(B) := \frac{1}{\beta N} \ln \int_{\delta_N^{-1}(B)} e^{-\beta N E_N} \mu_0^N,$$

ou, de façon équivalente (proposition 2), la convergence simple sur $C^0(\mathcal{P})$ des fonctionnelles

$$\Lambda_{\beta,N}(\Phi) := -\frac{1}{\beta N} \ln \int_{X^N} e^{-\beta N(E_N + \Phi \circ \delta_N)} \mu_0^N.$$

Exemple 2 (Théorème de Sanov). Il s'agit du cas sans interactions, i.e. $E_N = 0$. On peut supposer que $\beta = 1$, par homogénéité. Pour toute observable interne $\phi \in C^0(X)$, on a alors

$$\Lambda_{1,N}(\langle \phi, \cdot \rangle) = -\frac{1}{N} \ln \int_{X^N} e^{-(\phi(x_1) + \dots + \phi(x_N))} \mu_0^N = -\ln \int_{X} e^{-\phi} \mu_0,$$

qui est Gâteaux dérivable sur $C^0(X)$. Le théorème de Gärtner-Ellis 1 montre donc que la loi $(\delta_N)_*(\mu_0^N)$ satisfait à un principe de grandes déviations à vitesse N, de fonction de taux donnée par la transformée de Legendre

$$\sup_{\phi \in C^0(X)} \left(-\ln \int_X e^{-\phi} \mu_0 - \langle \phi, \mu \rangle \right) = H(\mu | \mu_0),$$

cf. (14). Ceci est l'énoncé du théorème de Sanov (cf. [8, §5.2]), qui nous dit en termes plus imagés que $e^{-NH(\mu|\mu_0)}$ donne la probabilité que la mesure empirique de N points $P_N=(x_1,...,x_N)$ i.i.d. de loi μ_0 soit proche de μ , rendant quantitative la convergence en loi des mesures empiriques $\delta_N(P_N)$ vers la mesure déterministe μ_0 , garantie par la loi des grands nombres.

Dans le cas avec interaction, on dispose du résultat général suivant, qui couvre en particulier le cas des interactions d'ordre r, d'après le théorème 2.

Théorème 3. Supposons que l'énergie d'interaction microscopique E_N admet une limite macroscopique E, et que de plus l'énergie moyenne $\langle E_N, \mu^N \rangle$ converge vers $E(\mu)$ pour toute $\mu \in \mathcal{P}$. Pour toute mesure de référence μ_0 et toute température inverse $\beta > 0$, on a alors convergence

$$\Lambda_{\beta,N}(\Phi) \to \inf_{\mathcal{D}} (E + \beta^{-1}H + \Phi)$$

pour chaque $\Phi \in C^0(\mathcal{P})$, avec $H(\mu) = H(\mu|\mu_0)$ l'entropie relative.

Preuve. On commence par observer que les hypothèses sont aussi vérifiées par $\widetilde{E}_N := \beta E_N + \beta \Phi \circ \delta_N$ et $\widetilde{E} := \beta E + \beta \Phi$. On peut donc alléger les notations en supposant que $\beta = 1$ et $\Phi = 0$, et on cherche à montrer que la fonction de partition

$$Z_N = \int_{X^N} e^{-NE_N} \mu_0^N$$

satisfait à $\frac{1}{N} \ln Z_N \rightarrow -\inf_{\mathcal{P}} (E + H)$.

Comme H et E sont sci, étant donné $\varepsilon > 0$, on peut choisir un recouvrement fini de \mathcal{P} par p boules fermées $B_i = B(\mu_i, r_i)$ telles que $H(\mu_i) \leq \inf_{B_i} H + \varepsilon$ et $E(\mu_i) \leq \inf_{B_i} E + \varepsilon$. On a alors

$$\ln Z_N \leqslant \max_i \int_{\delta_N^{-1}(B_i)} e^{-NE_N} \mu_0^N + \ln p$$

avec pour chaque i

$$\ln \int_{\delta_N^{-1}(B_i)} e^{-NE_N} \mu_0^N \leqslant -N \inf_{\delta_N^{-1}(B_i)} E_N + \ln \int_{B_i \cap X^N} \mu_0^N.$$

Puisque E est la limite macroscopique des E_N , on a pour chaque i

$$\underline{\lim} \left(\inf_{\delta_N^{-1}(B_i)} E_N \right) \geqslant \inf_{B_i} E,$$

d'après (11). D'un autre côté, le théorème de Sanov (cas sans interaction) donne

$$\overline{\lim}_{N} \frac{1}{N} \ln \int_{B_{i} \cap X^{N}} \mu_{0}^{N} \leqslant -\inf_{B_{i}} H.$$

Pour chaque boule B_i on a donc

$$\overline{\lim_{N}} \left(\frac{1}{N} \ln \int_{\delta_{N}^{-1}(B_{i})} e^{-NE_{N}} \mu_{0}^{N} \right) \leq -\inf_{B_{i}} E - \inf_{B_{i}} H$$

$$\leq -E(\mu_i) - H(\mu_i) + 2\varepsilon \leq -\inf_{\mathcal{D}}(E+H) + 2\varepsilon,$$

et on en déduit $\overline{\lim} \frac{1}{N} \ln Z_N \leqslant -\inf_{\mathcal{P}} (E + H)$.

Considérons maintenant la réciproque. Par le principe variationnel de Gibbs (15), on a

$$\inf_{\gamma \in \mathcal{P}(X^N)} \left(\langle E_N, \gamma \rangle + N^{-1} H(\gamma | \mu_0^N) \right) = -\frac{1}{N} \ln Z_N.$$

En appliquant ceci avec $\gamma = \mu^N$, on obtient

$$\langle E_N, \mu^N \rangle + H(\mu|\mu_0) \geqslant -\frac{1}{N} \ln Z_N$$

en utilisant l'identité triviale $H(\mu^N|\mu_0^N)=NH(\mu|\mu_0)$. Puisqu'on suppose que $\langle E_N,\mu^N\rangle \to E(\mu)$, on obtient l'inégalité souhaitée $E(\mu)+H(\mu)\geqslant -\underline{\lim}_N\frac{1}{N}\ln Z_N$ pour toute $\mu\in\mathcal{P}$.

Corollaire 1. Supposons que l'énergie d'interaction E_N est d'ordre r, et soit $P_N \in X^N$ une configuration aléatoire suivant la loi de Gibbs (16). La loi des mesures empiriques $\delta_N(P_N)$ satisfait alors à un principe de grandes déviations à vitesse βN et fonction de taux $E + \beta^{-1}H$.

En particulier, s'il existe une unique mesure $\mu_{\beta} \in \mathcal{P}$ telle que

$$E(\mu_\beta)+\beta^{-1}H(\mu_\beta)=\inf_{\mathcal{D}}(E+\beta^{-1}H)<+\infty,$$

alors $\delta_N(P_N)$ converge en loi vers l'état déterministe μ_R .

Dans le cas de l'électrostatique dans un compact $X \subset \mathbb{R}^d$, l'existence d'un unique minimiseur μ_β est satisfaite dès que la mesure de référence μ_0 est d'énergie finie, E et H étant toutes deux strictement convexes. Fait remarquable, μ_β est alors elle-même une mesure de Gibbs sur X, de la forme

$$\mu_{\beta} = \frac{1}{7} e^{-\beta U} \mu_0 \tag{17}$$

avec $V = -\frac{1}{2}U$ satisfaisant à l'équation « champ moyen de type Liouville »

$$\Delta V = \frac{e^{2\beta V} \mu_0}{\int e^{2\beta V} \mu_0}.$$
 (18)

En admettant l'existence d'un potentiel V solution de (18) (ce qui peut être établi par un argument variationnel), voyons pourquoi $v := \Delta V$ doit nécessairement minimiser $E + \beta^{-1}H$, et donc coïncider avec μ_{β} .

Rappelons que le potentiel V_{μ} de toute mesure $\mu \in \mathcal{P}(X)$ d'énergie finie satisfait à $E(\mu) = -\langle V_{\mu}, \mu \rangle$. Puisque G_d est majorée sur X, le théorème de Fubini-Tonelli donne la propriété de symétrie

$$\langle V_{\mu}, \nu \rangle = \iint G_{d}(x, y) \mu(dx) \nu(dy) = \langle V_{\nu}, \mu \rangle,$$

qui implique

$$\frac{d}{dt}|_{t=0}E(t\mu+(1-t)\nu)=-2\langle V_{\nu},\mu-\nu\rangle.$$

Par convexité de E, on a donc

$$E(\mu) \geqslant E(\nu) - 2\langle V_{\nu}, \mu - \nu \rangle$$
,

qui se réécrit $E(\mu) + 2\langle V_{\nu}, \mu \rangle \geqslant E(\nu) + 2\langle V_{\nu}, \nu \rangle$. D'un autre côté, puisque $\nu = \gamma_{\beta,U}$ est une mesure de Gibbs avec $U = -2V_{\nu}$, le principe variationnel de Gibbs (15) donne

$$-2\langle V_{\nu}, \mu \rangle + \beta^{-1}H(\mu) \geqslant -2\langle V_{\nu}, \nu \rangle + \beta^{-1}H(\nu),$$

et on obtient bien $E(\mu) + \beta^{-1}H(\mu) \ge E(\nu) + \beta^{-1}H(\nu)$.

Dans le cadre de la répulsion déterminantale dans \mathbb{C}^n , on peut également montrer que l'unique minimiseur μ_β de l'énergie libre $E+\beta^{-1}H$ est une mesure de Gibbs de la forme (17), où $V=-\frac{1}{2}U$ est maintenant une fonction plurisousharmonique sur \mathbb{C}^n à croissance logarithmique satisfaisant à une version non-linéaire de l'équation « champ moyen de type Liouville » (18) dans laquelle le laplacien est remplacé par l'opérateur de Monge-Ampère complexe.

Notons cependant que l'hypothèse de convergence de l'énergie moyenne dans le théorème 3 n'est pas établie à ce jour pour l'interaction déterminantale dans \mathbb{C}^n , de sorte qu'on ne peut pas encore conclure la convergence en loi vers μ_β comme dans le corollaire 1.

Dans un tour de force s'appuyant sur la géométrie de comparaison, Robert Berman a néanmoins réussi dans [2] à établir les conclusions de ce corollaire dans le cas où X est une variété complexe compacte, obtenant en particulier pour les variétés complexes projectives canoniquement polarisées la convergence en loi de certains processus déterminantaux canoniques vers la forme volume de l'unique métrique de Kähler-Einstein à courbure négative.

Références

- [1] R. J. Berman. « Determinantal point processes and fermions on complex manifolds: large deviations and bosonization » (déc. 2008). eprint: 0812.4224.
- [2] R. J. Berman. « Kähler-Einstein metrics, canonical random point processes and birational geometry » (juil. 2013). eprint: 1307.3634.
- [3] R. J. Berman. « Statistical mechanics of permanents, real-Monge-Ampere equations and optimal transport » (fév. 2013). eprint: 1302.4045.

- [4] R. J. Berman et al. « A variational approach to complex Monge-Ampère equations ». *Publ. Math. Inst. Hautes Études Sci.* 117 (2013), p. 179–245.
- [5] R. Berman et S. Boucksom. «Growth of balls of holomorphic sections and energy at equilibrium ». *Invent. Math.* 181, n° 2 (2010), p. 337–394. ISSN: 0020-9910. DOI: 10.1007/s00222-010-0248-9. URL: http://dx.doi.org/10.1007/s00222-010-0248-9.
- [6] R. Berman, S. Boucksom et D. Witt Nyström. « Fekete points and convergence towards equilibrium measures on complex manifolds ». *Acta Math.* 207, n° 1 (2011), p. 1–27.
- [7] A. Dembo et O. Zeitouni. Large deviations techniques and applications. 38. Stochastic Modelling and Applied Probability. Springer-Verlag, Berlin, 2010.
- [8] F. RASSOUL-AGHA et T. SEPPÄLÄINEN. A course on Large Deviations with an Introduction to Gibbs Measures. 162. American Mathematical Soc., 2015.



Sébastien Bouckson

CNRS, Centre de Mathématiques Laurent Schwartz, École olytechnique, Palaiseau. sebastien.boucksom@polytechnique.edu

Sébastien Boucksom est directeur de recherche en mathématiques. Sa spécialité est la géométrie complexe (algébrique et kählérienne), avec quelques incursions en géométrie non-archimédienne.

Le point de vue développé dans ce texte est fortement influencé par les travaux remarquables de Robert Berman sur les processus déterminantaux [1, 3, 2], valables dans le contexte très général de la théorie du pluripotentiel sur les variétés complexes compactes. Ils font suite aux travaux en commun [5, 6, 4], et je tiens à remercier très chaleureusement mes collaborateurs et amis Robert Berman, Vincent Guedj, Ahmed Zeriahi et David Witt-Nyström pour ces collaborations croisées aussi fructueuses qu'enrichissantes. Je tiens enfin à remercier chaleureusement Julie Déserti, Vincent Guedj et Benjamin Texier pour leur lecture attentive de ce texte.

Mémoires de la Société Mathématique de France - Nouveauté 2015



Vol. 142

A Stability Criterion for High-Frequency Oscillations

Y. Lu, B. Texier

ISBN 978-2-85629-812-1 2015 - 138 pages - Softcover. 17 x 24 Public: 30 € - Members: 21 €

Authors show that a simple Levi compatibility condition determines stability of WKB solutions to semilinear hyperbolic initial-value problems issued from highly oscillating data. If this condition is satisfied, the solutions are defined over time intervals independent of the wavelength, and the associated WKB solutions are stable under a large class of initial perturbations. If it is not satisfied arbitrarily small initial perturbations can destabilize the WKB solutions in small time. Examples include coupled Klein-Gordon systems, and systems describing Raman and Brillouin instabilities.

Société Mathématique de France

Disponible sur sur le site de la SMF : http://smf.emath.fr

*frais de port non compris