

SÉMINAIRE DE PROBABILITÉS (STRASBOURG)

SYLVIE ROELLY

HANS ZESSIN

Sur la mécanique statistique d'une particule brownienne sur le tore

Séminaire de probabilités (Strasbourg), tome 25 (1991), p. 291-310

<http://www.numdam.org/item?id=SPS_1991__25__291_0>

© Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1991, tous droits réservés.

L'accès aux archives du séminaire de probabilités (Strasbourg) (<http://portail.mathdoc.fr/SemProba/>) implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

SUR LA MECANIQUE STATISTIQUE D'UNE PARTICULE BROWNIENNE SUR LE TORE

Sylvie ROELLY et Hans ZESSIN

0 INTRODUCTION ET NOTATIONS

Soit P la mesure de Wiener sur l'espace Ω des trajectoires càd-làg de $[0;+\infty[$ à valeurs dans le tore \mathbb{T} de \mathbb{R}^d . Nous nous intéressons au comportement asymptotique en temps du champ empirique

$$R_t(\omega) = \frac{1}{t} \int_0^t \delta_{\vartheta_s \omega} \, ds \quad ,$$

où δ est la mesure de Dirac (sur Ω), ω est une réalisation de P , et ϑ_s l'opérateur de translation temporelle usuel sur les trajectoires (notons que nous définissons au §1, pour des raisons de stationnarité, une version légèrement modifiée de R_t).

Dans cet article, nous donnons à nos résultats une présentation de type mécanique statistique classique, dans le sens de Boltzmann et Gibbs. Suivant l'idée de Boltzmann, nous nous fixons un potentiel V , fonction continue bornée sur l'espace des trajectoires, un niveau d'énergie e , et recherchons la loi de R_t sous la probabilité - ou ensemble micro-canonique - $P(\cdot \mid R_t(V)=e)$. Dans le contexte de systèmes de particules classiques, il découvre la célèbre relation faisant intervenir l'entropie moyenne $H(\cdot \mid P)$

$$(\mathcal{B}a) \quad P(R_t \cong Q \mid R_t(V)=e) \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \exp \left\{ -t \left(H(Q \mid P) - \inf_{Q'; Q'(V)=e} H(Q' \mid P) \right) \right\}.$$

Cette estimation, appelée **Principe de Boltzmann** (cf. §2), admet l'interprétation suivante : le champ empirique R_t réalise typiquement les états Q d'énergie moyenne $Q(V)$ égale à e et qui minimisent l'entropie moyenne. En thermodynamique ces états sont appelés **états d'équilibre** pour le potentiel V . De plus, de $(\mathcal{B}a)$, on déduit que les grandes déviations en dehors d'états d'équilibre sont possibles mais de probabilités exponentiellement petites.

Nous indiquons maintenant brièvement en quoi nos résultats sur le modèle ci-dessus illustrent, dans un certain sens, la dualité onde-particule en proposant une interprétation concrète de l'interaction entre ces deux aspects.

Considérons pour un temps t fixé très grand, et un niveau d'énergie e , les trajectoires ω à valeurs dans le tore satisfaisant $R_t(\omega)(V) \cong e$, et postulons comme loi de répartition sur Ω la probabilité $P(.|R_t(V) \cong e)$. La particule décrit donc un mouvement brownien restreint à un certain "niveau d'énergie".

D'autre part, nous associons à la particule l'effet ondulatoire (qu'elle crée) suivant : la trajectoire ω produit au cours du temps le champ empirique $R_t(\omega)$, qui contient en particulier l'information relative à la probabilité aléatoire sur le tore - onde aléatoire - $L_t(\omega) = \frac{1}{t} \int_0^t \delta_{\omega(s)} ds$. Cette dernière, appelée dans la littérature "taux d'occupation", définit la répartition au cours du temps de la particule dans les différentes régions de l'espace.

Ainsi, une onde représentant une réalité physique est liée à la particule. De plus, cette onde aléatoire fluctue autour d'une onde typique (dite d'équilibre) et nous démontrerons que, dans le cas d'un potentiel de la forme $V(\omega) = U(\omega(0))$, cette onde typique est caractérisée par une solution de l'équation stationnaire de Schrödinger associée au potentiel U .

Nous démontrerons de plus, que la loi P restreinte au niveau d'énergie e du champ empirique R_t , converge quand t tend vers l'infini, vers la loi d'une particule brownienne avec une dérive reliée à l'"onde typique" introduite ci-dessus.

En conclusion, la trajectoire brownienne est, sur le niveau d'énergie e , comme "déviée" par une force qui provient de l'onde qu'elle crée.

Nous considérons dans cet article le cas d'un potentiel V de la forme $V(\omega) = U(\omega(0))$, pour lequel le principe de Boltzmann nous permet de caractériser entièrement, pour un niveau d'énergie bien choisi, l'ensemble des états d'équilibre. Il se réduit à un seul élément, à savoir la loi du mouvement brownien avec dérive, cette dernière étant égale à $\frac{1}{2} \nabla (\log \varphi_1^2)$, où φ_1 est la fonction propre unitaire de l'opérateur de Schrödinger $\frac{1}{2} \Delta + U$ associée à la plus grande valeur propre. L'idée principale de la démonstration est, en suivant l'idée fondamentale de Gibbs, de chercher à définir tout état d'équilibre comme la loi d'une diffusion ayant une densité locale de type exponentiel par rapport à la mesure de Wiener (cf. §1 et §3). Nous concluons le §3 sur la relation de ces résultats avec l'"équivalence d'ensembles".

Nous nous posons au §4 les mêmes questions que précédemment mais en la présence de $n-1$ "forces" additionnelles, que nous définissons à l'aide des $n-1$

premières fonctions propres de l'opérateur de Schrödinger. Les états d'équilibre qui apparaissent sont alors les lois de processus de Nelson, i.e. de diffusions de crochets browniens et de dérive singulière de la forme $\frac{1}{2}\nabla(\log \psi^2)$, où la fonction ψ est vecteur propre de l'opérateur de Schrödinger associé à la $n^{\text{ème}}$ valeur propre, et admet des zéros. Nous perdons dans ce cas l'unicité des états d'équilibre que nous avons dans le cas $n=1$.

— Ω est l'espace des fonctions càd-làg $\omega : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{T}$, où \mathbb{T} est le tore de \mathbb{R}^d . Ω est muni de la topologie de Skorohod, et de la σ -algèbre canonique $(\mathcal{F}_t)_{t \geq 0}$ définie à partir des applications coordonnées. C'est un espace polonais.

— Pour $s \geq 0$, ϑ_s est l'opérateur de translation sur Ω défini par :

$$\begin{aligned} \vartheta_s : \Omega &\rightarrow \Omega \\ \omega &\rightarrow \omega(.+s) ; \end{aligned}$$

Si ω est t -périodique, nous pouvons encore définir $\vartheta_s \omega$ pour $s < 0$ par :

$$\vartheta_s \omega = \vartheta_{s-kt} \omega ,$$

où k est l'unique élément de \mathbb{Z} satisfaisant : $kt < s \leq (k+1)t$.

— Nous aurons besoin de périodiser les trajectoires ω de la façon suivante : pour $t > 0$, ω^t est la trajectoire périodique de période t qui coïncide avec ω sur l'intervalle $[0, t[$.

— ν est la mesure de Lebesgue sur \mathbb{T} .

— Pour toute fonction f mesurable et pour toute mesure μ sur le tore \mathbb{T} , $f \cdot \mu$ est la mesure sur \mathbb{T} de densité f par rapport à μ et $\mu(f)$ est l'intégrale de f par rapport à μ .

— X_t , $t \geq 0$, est l'habituelle projection canonique temporelle :

$$X_t : \Omega \rightarrow \mathbb{T}, \quad \omega \rightarrow \omega(t) .$$

— $\mathcal{C}(\Omega)$ (respectivement $\mathcal{C}(\mathbb{T})$) est l'espace des fonctions continues sur Ω (resp. sur \mathbb{T}).

— $\mathcal{P}(\Omega)$ (respectivement $\mathcal{P}(\mathbb{T})$) est l'espace des probabilités sur Ω (resp. sur \mathbb{T}) ; il est muni de la topologie de la convergence étroite.

$\mathcal{P}_s(\Omega)$ est le sous-espace de $\mathcal{P}(\Omega)$ formé par les probabilités stationnaires (i.e. invariantes sous l'action de ϑ_s , pour tout $s > 0$), et, pour $\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T})$, $\mathcal{P}_\mu(\Omega)$ est le sous-espace de $\mathcal{P}_s(\Omega)$ formé par les probabilités de marginale μ au temps 0.

— Pour $Q \in \mathcal{P}(\Omega)$ et $V \in \mathcal{C}(\Omega)$, on note $E_Q(V)$ l'espérance de V sous Q : $\int_\Omega V \, dQ$.

— Pour $Q \in \mathcal{P}(\Omega)$, on définit :

$$Q_t = Q \circ X_t^{-1} \in \mathcal{P}(\mathbb{T}) , \quad t \geq 0,$$

et $Q^x = Q(\cdot / Q_0 = \delta_x) \in \mathcal{P}(\Omega)$, $x \in \mathbb{T}$.

— $P^x \in \mathcal{P}(\Omega)$ est la mesure de Wiener sur Ω concentrée au temps 0 en $x \in \mathbb{T}$ (i.e. $P^x(X_0=x)=1$).

P est la mesure de Wiener stationnaire sur Ω :

$$(0.1) \quad P = \frac{1}{\nu(\mathbb{T})} \int_{\mathbb{T}} P^x \nu(dx) \quad (\in \mathcal{P}_s(\Omega)) .$$

— Pour toute fonction de classe \mathcal{C}^2 strictement positive f sur le tore \mathbb{T} , $P^{x,f} \in \mathcal{P}(\Omega)$ est la loi du mouvement brownien sur \mathbb{T} partant de x et de dérive $\frac{1}{2} \nabla(\log f)$.

P^f est la mesure stationnaire associée :

$$(0.2) \quad P^f = \frac{1}{f \cdot \nu(\mathbb{T})} \int_{\mathbb{T}} P^{x,f} f(x) \nu(dx) \quad (\in \mathcal{P}_{f \cdot \nu / (f \cdot \nu(\mathbb{T}))}(\Omega)) .$$

1 PRINCIPE DE GRANDES DÉVIATIONS POUR LE MOUVEMENT BROWNIEN SUR LE TORE

Nous définissons maintenant l'objet de notre étude, le **champ empirique** R_t , par

$$(1.0) \quad R_t(\omega) = \frac{1}{t} \int_0^t \delta_{\vartheta_s \omega^t} ds ,$$

et donc, pour tout $V \in \mathcal{C}(\Omega)$ et $t > 0$,

$$(1.1) \quad R_t(\omega)(V) = \frac{1}{t} \int_0^t V(\vartheta_s \omega^t) ds ;$$

R est un processus à valeurs $\mathcal{P}(\Omega)$, par construction stationnaire, donc, pour tout $t > 0$, $R_t \in \mathcal{P}_s(\Omega)$.

Dans ce paragraphe, nous précisons les liens entre la fonctionnelle d'action de grandes déviations du processus R , l'entropie moyenne d'un état par rapport à la mesure de Wiener, et l'état d'équilibre associé à un potentiel donné.

L'entropie moyenne $H(Q|\tilde{Q})$ d'une mesure $Q \in \mathcal{P}_s(\Omega)$ par rapport à une mesure $\tilde{Q} \in \mathcal{P}_s(\Omega)$ est définie par :

$$(1.2) \quad H(Q|\tilde{Q}) = \int_{\Omega} H_1(Q^{\omega(0)}|\tilde{Q}^{\omega(0)}) Q(d\omega) ,$$

où H_t , l'entropie moyenne usuelle au temps t , vaut

$$(1.3) \quad H_t(Q^x | \tilde{Q}^x) = \begin{cases} \int_{\Omega} \log \frac{dQ^x|_{\mathcal{F}_t}}{d\tilde{Q}^x|_{\mathcal{F}_t}} dQ^x & \text{si } Q^x|_{\mathcal{F}_t} \ll \tilde{Q}^x|_{\mathcal{F}_t} \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}.$$

L'expression (1.2) devient donc :

$$H(Q | \tilde{Q}) = \int_{\mathbb{T}} H_1(Q^x | \tilde{Q}^x) Q_0(dx)$$

c'est-à-dire

$$(1.4) \quad H(Q | \tilde{Q}) = \begin{cases} \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dQ^x|_{\mathcal{F}_1}}{d\tilde{Q}^x|_{\mathcal{F}_1}} \right) Q_0(dx) & \text{si } Q^x|_{\mathcal{F}_1} \ll \tilde{Q}^x|_{\mathcal{F}_1} \text{ pour } Q_0\text{-p.t. } x \\ +\infty & \text{sinon} \end{cases}.$$

Notons que, pour \tilde{Q} fixé, $H(\cdot | \tilde{Q})$ est affine.

Rappelons maintenant le théorème fondamental de grandes déviations pour le champ empirique R_t , dû à Donsker et Varadhan [Do-Va IV ; Th. 4.6 et 5.4] :

Théorème 1 : Pour tout $x \in \mathbb{T}$, la famille $(P^x \circ R_t^{-1})_{t>0}$ de probabilités sur $\mathcal{P}_s(\Omega)$ satisfait à un principe de grandes déviations, de fonctionnelle d'action $H(\cdot | P)$ défini ci-dessus en (1.4).

On remarquera que notre espace de base Ω est légèrement différent de l'espace Ω défini dans [Do-Va IV], dans lequel les trajectoires ω sont définies aussi pour les temps t négatifs. On peut donc considérer notre Ω comme un sous-espace de celui de Donsker et Varadhan et leurs résultats sont applicables à notre contexte par simple projection.

Formellement, du théorème 1 découle l'estimation suivante :

$$(1.5) \quad P^x(R_t \approx Q) \underset{t \rightarrow +\infty}{\sim} \exp \left(-t H(Q | P) \right).$$

Le principe variationnel qui suit est une conséquence directe du Théorème 1 (Dans [Va] il est énoncé dans un cadre très général ; nous l'adaptions ici à notre situation) :

Théorème 2 : Pour tout potentiel borné $V \in \mathcal{C}(\Omega)$, la quantité suivante

$$(1.6) \quad p(V) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \left(\int_{\Omega} \exp \left(t R_t(V) \right) dP^x \right)$$

(dénommée, dans le contexte de la mécanique statistique, pression associée au potentiel V) est bien définie, est indépendante de x , et satisfait :

$$(1.7) \quad p(V) = \sup_{Q \in \mathcal{P}_s(\Omega)} \left(E_Q(V) - H(Q | P) \right).$$

Nous cherchons dorénavant à identifier et construire les mesures (ou états) G de $\mathcal{P}_g(\Omega)$, qui représentent un équilibre pour le potentiel V , c'est-à-dire qui maximisent la fonction d'énergie libre :

$$Q \longrightarrow E_Q(V) - H(Q|P).$$

Pour celles-ci, leur énergie libre est donc égale à la pression.

Dans cette article, nous étudierons plus particulièrement les potentiels de la forme :

$$(1.8) \quad V = U \circ X_0, \quad U \in \mathcal{C}(\mathbb{T});$$

(La généralisation des résultats qui suivent à d'autres potentiels est en cours d'étude ; ainsi, pour plus de clarté, nous garderons la notation V dans tous les énoncés dans lesquels cela a un sens).

On aimerait définir tout état d'équilibre G comme une mesure de Gibbs, c'est-à-dire une mesure ayant une densité locale par rapport à la mesure de Wiener proportionnelle à $\exp\left(\int_0^t R_s(V) ds\right)$, qui, dans notre contexte, vaut $\exp\int_0^t U(\omega(s))ds$. Pour expliciter cette densité, considérons l'opérateur de Schrödinger $\frac{1}{2} \Delta + U$ associé au potentiel U . L'on sait que l'espace propre associé à sa plus grande valeur propre λ_1 est unidimensionnel, engendré par une fonction propre strictement positive, de norme 1 dans $L^2(d\nu)$, que nous noterons φ_1 (la dépendance de φ_1 et de λ_1 par rapport à U est implicite). Par définition donc,

$$(1.9) \quad \frac{1}{2} \Delta \varphi_1 + U \varphi_1 = \lambda_1 \varphi_1,$$

ce qui permet de relier U et φ_1 ; en particulier, sous P^x ,

$$Z_t =: \exp(-\lambda_1 t) \frac{\varphi_1(X_t)}{\varphi_1(X_0)} \exp\left(\int_0^t R_s(V) ds\right)$$

est une martingale, qui nous permet de définir sur Ω la mesure G^x par

$$(1.10) \quad G^x|_{\mathcal{F}_t} = Z_t \cdot P^x|_{\mathcal{F}_t}.$$

G est alors la probabilité stationnaire construite à partir de G^x :

$$(1.11) \quad G = \int_{\mathbb{T}} G^x \lambda(dx),$$

où λ est la mesure invariante sur \mathbb{T} associée au processus de loi G^x .

Nous pouvons maintenant énoncer et démontrer le

Théorème 3: L'égalité suivante, appelée formule de translation, est satisfaite pour tout $Q \in \mathcal{P}_s(\Omega)$:

$$(1.12) \quad H(Q|G) = H(Q|P) - E_Q(V) + p(V) .$$

La probabilité G définie par (1.11) maximise donc l'énergie libre associée à V , i.e. G est un état d'équilibre.

Preuve : Remarquons que, grâce à la propriété de stationnarité des mesures que nous étudions, l'entropie $H(Q|\tilde{Q})$ définie en (1.4) est aussi égale, quand elle est finie, à

$$H(Q|\tilde{Q}) = \frac{1}{t} \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dQ^x|_{\mathcal{F}_t}}{d\tilde{Q}^x|_{\mathcal{F}_t}} \right) Q_0(dx) ,$$

pour tout temps $t > 0$. (cf [Do-Va IV ; Th 3.1] pour plus de détails sur la linéarité de H_t en tant que fonction du temps). D'où, pour tout $t > 0$ et $Q \in \mathcal{P}_s(\Omega)$,

$$\begin{aligned} H(Q|P) &= \frac{1}{t} \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dQ^x|_{\mathcal{F}_t}}{dP^x|_{\mathcal{F}_t}} \right) Q_0(dx) \\ &= \frac{1}{t} \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dQ^x|_{\mathcal{F}_t}}{dG^x|_{\mathcal{F}_t}} \right) Q_0(dx) + \frac{1}{t} \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dG^x|_{\mathcal{F}_t}}{dP^x|_{\mathcal{F}_t}} \right) Q_0(dx) \\ &= H(Q|G) - \lambda_1 + \frac{1}{t} E_Q \left(\log \frac{\varphi_1(X_t)}{\varphi_1(X_0)} \right) + E_Q(R_t(V)) \end{aligned}$$

Puisque φ_1 est bornée inférieurement et supérieurement, le troisième terme du membre de droite ci-dessus tend vers 0 quand t tend vers l'infini. Le dernier terme vaut, lui :

$$\begin{aligned} E_Q(R_t(V)) &= E_Q \left(\frac{1}{t} \int_0^t V(\vartheta_s \omega^t) ds \right) \\ &= E_Q(V(\omega)) \quad (\text{par stationnarité}). \end{aligned}$$

Enfin le résultat célèbre de Kac, ([Ka]; formule (5.16)) :

$$p(V) = \lambda_1$$

nous permet de conclure que

$$H(Q|P) = H(Q|G) - p(V) + E_Q(V) .$$

Donc l'énergie libre d'un état Q , $E_Q(V) - H(Q|P)$, vaut $p(V) - H(Q|G)$ qui est maximum quand $H(Q|G)$ est nul, ce qui est le cas si $Q=G$. ■

En notant $\mathcal{G}(V)$ l'ensemble des états d'équilibre pour le potentiel V , (1.13)

$$\mathcal{G}(V) = \{Q \in \mathcal{P}_s(\Omega), E_Q(V) - H(Q|P) = p(V)\},$$

le théorème 3 nous dit que $G \in \mathcal{G}(V)$.

2 LE PRINCIPE DE BOLTZMANN

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons à un principe de grandes déviations "conditionnées" pour R_t , où la condition consiste à forcer "l'énergie potentielle" moyenne sur l'intervalle de temps $[0, t]$, $R_t(V)$, à être constante à travers le temps (et pour toutes les réalisations).

Plus précisément, fixons un potentiel V borné de $\mathcal{E}(\Omega)$; soit $\mathcal{E}_1(e)$ le niveau d'énergie défini comme suit

$$(2.1) \quad \mathcal{E}_1(e) = \{Q \in \mathcal{P}_s(\Omega), E_Q(V) = e\}, \quad e \in \mathbb{R}.$$

Cet ensemble est convexe et fermé ; nous aurons besoin de l'"épaissir" de δ de la manière suivante : pour $\delta > 0$,

$$\mathcal{E}_1^\delta(e) = \{Q \in \mathcal{P}_s(\Omega), d(Q, \mathcal{E}_1(e)) < \delta\}$$

où d est une distance fixée sur $\mathcal{P}_s(\Omega)$ qui engendre la topologie de la convergence étroite. $\mathcal{E}_1^\delta(e)$ est ainsi un voisinage ouvert de $\mathcal{E}_1(e)$.

Dorénavant, la valeur e sera choisie de telle sorte que $\mathcal{E}_1(e)$ contienne au moins un élément Q d'entropie moyenne $H(Q|P)$ finie.

Nous sommes donc dans une situation où le principe abstrait de Boltzmann s'applique, c'est-à-dire que l'on connaît explicitement la fonctionnelle d'action de R_t conditionnée par son appartenance à $\mathcal{E}_1(e)$:

Théorème 4 : Le champ empirique R_t restreint au niveau d'énergie $\mathcal{E}_1(e)$ satisfait un principe de grandes déviations de fonctionnelle d'action

$$H(\cdot|P) - \inf_{Q' \in \mathcal{E}_1(e)} H(Q'|P),$$

i.e. on a symboliquement l'équivalence suivante :

$$(2.2) \quad P^x(R_t \cong Q \mid R_t \in \mathcal{E}_1^\delta(e)) \underset{\substack{t \rightarrow +\infty \\ \delta \rightarrow +\infty}}{\sim} \exp -t \left(H(Q|P) - \inf_{Q' \in \mathcal{E}_1(e)} H(Q'|P) \right),$$

la limite en temps devant précéder celle en δ .

La formulation dans un cadre très général du principe de Boltzmann et sa démonstration se trouve dans [Ze ; Theorem 3].

Notre préoccupation dans les paragraphes qui suivent est de déterminer quels sont les états typiques réalisés par le champ empirique R_t sur un niveau d'énergie bien précis ; en d'autres termes, vue l'estimation (2.2), identifier les probabilités Q qui minimisent sur $\mathcal{E}_1(e)$ l'entropie moyenne par rapport à la mesure de Wiener P :

$$(2.3) \quad H(Q|P) = \inf_{Q' \in \mathcal{E}_1(e)} H(Q'|P),$$

quand e est l'énergie moyenne d'un état d'équilibre.

Proposition 5 : Soit Q un état d'équilibre pour V . Alors Q minimise l'entropie moyenne (par rapport à la mesure de Wiener P) sur son niveau d'énergie, i.e.

$$Q \in \mathcal{G}(V) \quad \Rightarrow \quad H(Q|P) = \inf_{Q' \in \mathcal{E}_1(E_Q(V))} H(Q'|P).$$

Preuve : Tout d'abord, remarquons que le théorème 3 nous assure que $\mathcal{G}(V)$ n'est pas vide. Soit donc $Q \in \mathcal{G}(V)$;

d'après (1.12), puisque $H(Q'|G)$ est positif ou nul pour tout $Q' \in \mathcal{P}_s(\Omega)$,

$$H(Q'|P) \geq E_{Q'}(V) - p(V),$$

$$\Rightarrow \forall Q' \in \mathcal{E}_1(E_Q(V)), \quad H(Q'|P) \geq E_Q(V) - p(V)$$

$$\Rightarrow \inf_{Q' \in \mathcal{E}_1(E_Q(V))} H(Q'|P) \geq E_Q(V) - p(V);$$

Mais puisque Q est un état d'équilibre

$$E_Q(V) - p(V) = H(Q|P),$$

$$\text{donc} \quad \inf_{Q' \in \mathcal{E}_1(E_Q(V))} H(Q'|P) \geq H(Q|P).$$

L'égalité en découle immédiatement car $Q \in \mathcal{E}_1(E_Q(V))$. ■

Remarquons que la réciproque de cette dernière proposition se formule de la façon suivante : soit Q un état dont l'énergie est égale à l'énergie d'un état d'équilibre ; si Q minimise l'entropie sur son niveau d'énergie, alors c'est un état d'équilibre.

Nous avons ainsi transformé la question posée au paragraphe 1 en la recherche d'un état qui minimise l'entropie moyenne sur un certain niveau d'énergie.

3 L'ÉTAT D'ÉQUILIBRE DU CHAMP EMPIRIQUE R_T

Dans ce paragraphe nous donnons une description explicite des états d'équilibre dans le cas où V est de la forme définie en (1.8) ; nous prouvons que $\mathcal{G}(V)$ se réduit à un seul élément, la loi d'un mouvement brownien avec dérive, cette dernière étant reliée à la fonction d'onde $(\varphi_1)^2$, solution de l'équation de Schrödinger.

Fixons pour le moment e , le niveau d'énergie, égal à e_1 , l'énergie moyenne de V pour un certain état d'équilibre $\tilde{Q} \in \mathcal{G}(V)$. Par définition,

$$e_1 = E_{\tilde{Q}}(V) ,$$

qui devient par (1.8)

$$(3.1) \quad e_1 = \tilde{Q}_0(U) .$$

Observons alors que

$$(3.2) \quad \inf_{\{Q \in \mathcal{E}_1(e_1)\}} H(Q|P) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T}), \mu(U)=e_1\}} \inf_{\{Q \in \mathcal{P}_\mu(\Omega)\}} H(Q|P) .$$

Nous allons donc procéder en deux étapes pour minimiser l'entropie $H(Q|P)$

La première va consister à fixer μ , la marginale au temps 0 de Q , et la deuxième à faire varier μ dans l'hyperplan affine défini par U et e_1 .

Première étape :

La proposition suivante permet, par projection, de ramener notre situation à celle, bien connue, du calcul de la fonctionnelle d'action à un niveau inférieur ; on retrouve alors l'intégrale de Dirichlet associée au Brownien.

Proposition 6 : Pour toute probabilité μ sur le tore \mathbb{T} ,

$$\inf_{\{Q ; Q_0=\mu\}} H(Q|P) =: I(\mu) = \begin{cases} \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}} |\nabla \sqrt{d\mu/d\nu}|^2 d\nu & \text{si } \mu \in \mathcal{P}_1(\mathbb{T}), \\ +\infty & \text{sinon ,} \end{cases}$$

où $\mathcal{P}_1(\mathbb{T}) = \{\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T}), \mu = \psi^2 \cdot \nu, \psi \text{ élément de l'espace de Dirichlet}\}$.

Rappelons que l'espace de Dirichlet est l'espace des fonctions de $L^2(\mathbb{T})$, dérivables au sens des distributions et dont le gradient est aussi dans $L^2(\mathbb{T})$.

Preuve : C'est un cas particulier du Theorem 6.1 de [Do-Va IV] ; Donsker et Varadhan prennent pour mesure P la loi d'un processus de Markov très général, tandis que nous avons restreint notre étude à la mesure de Wiener comme mesure de référence, pour pouvoir expliciter plus les calculs.

Rappelons brièvement les grandes lignes de la démonstration :

Le "principe de contraction" permet de reconnaître dans $\inf_{\{Q ; Q_0=\mu\}} H(Q|P)$ la

valeur en μ de la fonctionnelle d'action I associée aux grandes déviations du "taux d'occupation" (dans la terminologie de Varadhan) $L_t = R_t \circ X_0^{-1}$.

I est identifiée pour un processus de Markov très général dans [Do-Va]. Dans le cas du mouvement brownien on trouve l'expression ci-dessus, que l'on peut calculer directement facilement si la mesure μ admet une densité f par rapport à ν suffisamment régulière pour pouvoir utiliser les techniques de calcul

stochastique (i.e. si f est strictement positive et de classe \mathcal{C}^2 , ensemble de fonctions que nous noterons $\mathcal{C}_+^2(\mathbb{T})$). Nous ébaucherons un calcul similaire dans la démonstration du théorème 7.

La principale difficulté est finalement d'étendre la définition de $I(\mu)$ de la classe des mesures à densité dans $\mathcal{C}_+^2(\mathbb{T})$ à la classe de mesures la plus grosse possible ; cela se fait grâce à la "continuité" (dans un sens précisé dans [Do-Va ; formule (4.18)) de la fonction $\mu \rightarrow I(\mu)$, qui permet de conclure que $\mathcal{P}_1(\mathbb{T})$ est exactement la classe de mesures sur laquelle I est finie. ■

Cette même continuité de I permet de ne considérer dans l'égalité (3.2) que les probabilités μ de la forme $f \cdot \nu$ avec $f \in \mathcal{C}_+^2(\mathbb{T})$: Ainsi (3.2) devient :

$$(3.3) \quad \inf_{\{Q \in \mathcal{E}_1(e_1)\}} H(Q|P) = \inf_{\{f \in \mathcal{C}_+^2(\mathbb{T}), f \cdot \nu(U) = e_1\}} \inf_{\{Q \in \mathcal{P}_{f \cdot \nu}(\Omega)\}} H(Q|P).$$

Maintenant que nous connaissons la valeur minimale, $I(\mu)$, de l'entropie moyenne d'un état quand sa projection au temps 0 est fixée égale à μ , il nous faut examiner quand ce minimum est réalisé. C'est l'objet du théorème suivant:

Théorème 7 : Pour tout $f \in \mathcal{C}_+^2(\mathbb{T})$ vérifiant $\nu(f)=1$, et tout $Q \in \mathcal{P}_{f \cdot \nu}(\Omega)$, la formule de translation suivante est satisfaite :

$$(3.4) \quad H(Q|P) = H(Q|P^f) + I(f \cdot \nu),$$

où P^f a été définie en (0.2).

Donc le mouvement brownien stationnaire avec dérive $1/2 \nabla(\log f)$ admet pour loi l'unique probabilité de $\mathcal{P}_s(\Omega)$ qui minimise l'entropie moyenne H sur le sous-espace $\mathcal{P}_{f \cdot \nu}(\Omega)$.

Preuve :

$$\begin{aligned} H(Q|P) &= \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dQ^x|_{\mathcal{F}_1}}{dP^x|_{\mathcal{F}_1}} \right) Q_0(dx) \\ &= \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dQ^x|_{\mathcal{F}_1}}{dP^{x,f}|_{\mathcal{F}_1}} \right) Q_0(dx) + \int_{\mathbb{T}} E_{Q^x} \left(\log \frac{dP^{x,f}|_{\mathcal{F}_1}}{dP^x|_{\mathcal{F}_1}} \right) Q_0(dx) \end{aligned}$$

Le premier terme du membre de droite est égal par définition à $H(Q|P^f)$.

Par le théorème de Girsanov puis la formule d'Ito appliquée à la fonction $\log f$, on a :



$$\begin{aligned}
E_{Q^x} \left(\log \frac{dP^{x,f}|_{\mathcal{F}_1}}{dP^x|_{\mathcal{F}_1}} \right) &= \\
&= E_{Q^x} \left(\frac{1}{2} \log \frac{f(X_1)}{f(X_0)} - \frac{1}{4} \int_0^1 \frac{\Delta f(X_s)}{f(X_s)} ds + \frac{1}{8} \int_0^1 \frac{|\nabla f(X_s)|^2}{|f(X_s)|^2} ds \right)
\end{aligned}$$

Par stationnarité de $Q = \int Q^x Q_0(dx)$, le premier terme du membre de droite disparaît quand on réintègre par rapport à Q_0 , et le reste devient :

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{4} \int_{\mathbb{T}} \frac{\Delta f(x)}{f(x)} f(x) \nu(dx) + \frac{1}{8} \int_{\mathbb{T}} \frac{|\nabla f(x)|^2}{|f(x)|^2} f(x) \nu(dx) \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{T}} \frac{1}{4} \frac{|\nabla f(x)|^2}{|f(x)|} \nu(dx) \\
&= I(f, \nu) .
\end{aligned}$$

On en déduit (3.4) et, par positivité de $H(Q|P^f)$, il est clair que P^f réalise le minimum de l'entropie sur la classe d'états considérée.

De plus, c'est l'unique élément de $\mathcal{P}_{f,\nu}(\Omega)$ qui a pour entropie moyenne $I(f, \nu)$:

soit $Q \in \mathcal{P}_{f,\nu}(\Omega)$ vérifiant $H(Q|P) = I(f, \nu)$;

alors

$$H(Q|P^f) = 0 ,$$

ce qui entraîne que

$$Q^x = P^{x,f}$$

pour Q_0 -presque tout x .

Comme, de plus, $Q_0 = (P^f)_0 = f, \nu$, on a $Q = P^f$. ■

Nous arrivons à la deuxième étape :

Pour trouver la mesure μ qui permet de minimiser le second membre de l'égalité (3.3), nous allons déduire des deux formules de translation

(1.12) et (3.4) une nouvelle démonstration du **principe de Rayleigh-Ritz** relatif à la valeur propre λ_1 (cf [Co-Hi ; p.346] pour une formulation dans le cadre du calcul des variations).

Théorème 8 : Soit U un potentiel continu sur le tore ; alors

$$(3.5) \quad \sup_{\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T})} \left(\mu(U) - I(\mu) \right) = \lambda_1$$

où le suprémum n'est atteint que pour une seule valeur de μ , à savoir pour $\mu = (\varphi_1)^2, \nu$ (λ_1 et φ_1 ont été définis en (1.9)).

Preuve : La formule (1.12) associée avec la proposition 6 entraînent :

$$(3.6) \quad \forall \mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T}), \quad I(\mu) - \mu(U) + \lambda_1 = \inf_{\{Q \in \mathcal{P}_\mu(\Omega)\}} H(Q|G) .$$

Puisque l'entropie moyenne est toujours positive, cela implique

$$\forall \mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T}), \quad \mu(U) - I(\mu) \leq \lambda_1, \\ \text{et donc} \quad \sup_{\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T})} \left(\mu(U) - I(\mu) \right) \leq \lambda_1;$$

Explicitons les mesures μ qui satisfont l'égalité

$$\mu(U) - I(\mu) = \lambda_1.$$

Tout d'abord, puisque $I(\mu)$ est finie, cela entraîne que μ appartient à $\mathcal{P}_1(\mathbb{T})$; en particulier elle admet une densité, que nous noterons f , qui appartient à l'espace de Dirichlet.

Nous verrons dans la proposition 12 que la définition de P^f et la formule de translation (3.4) peuvent se généraliser à toutes les fonctions f de l'espace de Dirichlet. On a alors par (3.4)

$$H(P^f|P) = I(\mu), \text{ et} \\ \text{par (1.12)} \quad H(P^f|P) = H(P^f|G) + I(\mu).$$

$$\text{Cela implique} \quad H(P^f|G) = 0,$$

$$\text{i.e.} \quad P^{x,f} = G^x \quad \mu\text{-presque sûrement en } x.$$

Mais le lecteur aura reconnu depuis longtemps que $G = P^{(\varphi_1)^2}$:

la densité Z_t définie en (1.10) de G^x par rapport à P^x s'écrit aussi

$$\begin{aligned} Z_t &= \exp(-\lambda_1 t) \frac{\varphi_1(X_t)}{\varphi_1(X_0)} \exp\left(t R_t(V)\right) \\ &= \frac{\varphi_1(X_t)}{\varphi_1(X_0)} \exp\left(\int_0^t (U(X_s) - \lambda_1) ds\right) \\ &= \frac{\varphi_1(X_t)}{\varphi_1(X_0)} \exp\left(-\frac{1}{2} \int_0^t \frac{\Delta \varphi_1(X_s)}{\varphi_1(X_s)} ds\right) \\ &= \exp\left(\int_0^t \nabla(\log \varphi_1)(X_s) dX_s - \frac{1}{2} \int_0^t |\nabla(\log \varphi_1)(X_s)|^2 ds\right) \end{aligned}$$

qui correspond exactement, d'après le théorème de Girsanov, à la densité de $P^{x,(\varphi_1)^2}$ par rapport à P^x .

Pour en revenir à l'identification de la fonction f ci-dessus,

$$P^{x,f} = G^x \quad \text{devient} \quad P^{x,f} = P^{x,(\varphi_1)^2},$$

d'où, par unicité de la mesure invariante associée à chacune de ces deux lois,

$$f \cdot \nu = (\varphi_1)^2 \cdot \nu.$$

Ceci prouve que l'unique mesure réalisant (3.7) est la mesure $\mu = (\varphi_1)^2 \cdot \nu$; le théorème est alors démontré. ■

La formule (3.3) s'écrit maintenant

$$\begin{aligned} \inf_{\{Q \in \mathcal{E}_1(e_1)\}} H(Q|P) &= \inf_{\{f \in \mathcal{E}_+^2(\mathbb{T}), f \cdot \nu(U) = e_1\}} I(f \cdot \nu) \\ &= \inf_{\{f \in \mathcal{E}_+^2(\mathbb{T}), f \cdot \nu(U) = \tilde{Q}_0(U)\}} I(f \cdot \nu) \quad (\text{d'après (3.1)}). \end{aligned}$$

Le principe de Rayleigh-Ritz présenté ci-dessus va nous permettre de conclure que \tilde{Q} , état d'équilibre choisi arbitrairement au début du paragraphe, est déterminé de façon unique (ainsi, par conséquence, que le niveau d'énergie e_1 qu'il définit).

Par la proposition 5, \tilde{Q} , état d'équilibre, satisfait

$$H(\tilde{Q}|P) = \inf_{\{Q, Q_0(U) = e_1\}} H(Q|P),$$

qui devient, grâce à la proposition 6,

$$H(\tilde{Q}|P) = \inf_{\{\mu, \mu(U) = e_1\}} I(\mu).$$

Comme, pour tout $Q \in \mathcal{P}_s(\Omega)$, $I(Q_0) \leq H(Q|P)$,

$$I(\tilde{Q}_0) \leq H(\tilde{Q}|P) \leq I(\tilde{Q}_0).$$

Ces deux dernières inégalités sont, en fait, des égalités, et donc, puisque \tilde{Q} satisfait

$$\tilde{Q}_0(U) = H(\tilde{Q}|P) + \lambda_1,$$

cela devient

$$\tilde{Q}_0(U) = I(\tilde{Q}_0) + \lambda_1;$$

Ainsi \tilde{Q}_0 réalise le suprémum dans l'égalité (3.5), ce qui n'est possible d'après le théorème 8 que si $\tilde{Q}_0 = (\varphi_1)^2 \cdot \nu$. Ceci implique déjà que le niveau d'énergie e_1 défini en (3.1) n'est autre que $((\varphi_1)^2 \cdot \nu)(U)$. Le théorème 7 et la formule (3.8) permettent de conclure que $\tilde{Q} = P^{(\varphi_1)^2}$. Nous venons de démontrer le

Théorème 9 : Le seul état d'équilibre correspondant à un potentiel $V = U \circ X_0$ est la loi d'un mouvement brownien avec dérive, cette dernière valant $\nabla(\log \varphi_1)$ où $(\varphi_1)^2$ est la fonction d'onde unitaire associée à la plus grande valeur propre de l'opérateur de Schrödinger $\frac{1}{2} \Delta + U$.

Ainsi, pour relier ce résultat avec le principe de Boltzmann cité au paragraphe 2, l'on constate que le champ empirique R_t , sous la loi $P(\cdot | R_t(V) = e_1)$ prend typiquement la valeur $P^{(\varphi_1)^2}$. Le niveau d'énergie e_1 détermine donc la valeur de toutes les observations, dans le sens que pour tout potentiel W sur Ω , $R_t(W)$ réalise typiquement le réel $\int_{\Omega} W dP^{(\varphi_1)^2}$.

L'on peut déduire du théorème 9 une convergence plus forte que celle de la loi du champ empirique conditionné. C'est l'objet de la

Proposition 10: La probabilité de $\mathcal{P}_s(\Omega)$ $P(.| R_t \in \mathcal{E}_1^\delta(e_1))$, appelée souvent ensemble micro-canonique, converge quand t tend vers l'infini puis δ vers 0 vers $P^{(\varphi_1)^2}$, défini au théorème 9.

Des résultats de ce type sont dénommés dans la littérature : **Equivalence d'ensembles.**

Preuve : L'idée est essentiellement la même que dans [De-St-Zel, Theorem 3.5.

Soit ϕ une fonction bornée de $\mathcal{C}(\Omega)$. Par stationnarité de R_t

$$\begin{aligned} \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \delta \rightarrow 0}} \int_{\Omega} \phi(\omega) dP(\omega | R_t \in \mathcal{E}_1^\delta(e_1)) &= \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \delta \rightarrow 0}} \int_{\Omega} R_t(\omega)(\phi) dP(\omega | R_t \in \mathcal{E}_1^\delta(e_1)) \\ &= \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \delta \rightarrow 0}} \int_{\mathcal{P}_s(\Omega)} Q(\phi) P(. | R_t \in \mathcal{E}_1^\delta(e_1) \circ R_t^{-1}(dQ)) \\ &= \int_{\Omega} \phi dP^{(\varphi_1)^2}. \end{aligned}$$

4 ETATS D'ÉQUILIBRE POUR LE CHAMP EMPIRIQUE EN PRÉSENCE DE FORCES SUPPLÉMENTAIRES

Nous considérons maintenant le champ empirique sous de nouvelles lois caractérisant l'addition de forces extérieures dans le modèle précédent.

Soit n un entier supérieur à 1, que nous fixons pour la suite du paragraphe. Généralisant le niveau d'énergie $\mathcal{E}_1(e)$, soit $\mathcal{E}_n(e)$ défini comme suit :

$$(4.1) \quad \mathcal{E}_n(e) = \{Q \in \mathcal{P}_s(\Omega), Q(V) (= Q_0(U)) = e, Q_0 \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T})\}$$

où

$$\mathcal{P}_n(\mathbb{T}) = \{\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{T}), \mu = \psi^2 \cdot \nu, \psi \text{ élément de l'espace de Dirichlet et } (\psi, \varphi_1) = (\psi, \varphi_2) = \dots = (\psi, \varphi_{n-1}) = 0\}$$

avec $(\varphi_n)_{n \geq 1}$, une base orthonormée de $L^2(d\nu)$ composée de vecteurs propres de l'opérateur de Schrödinger $\frac{1}{2} \Delta + U$ associés respectivement à la suite des valeurs propres $(\lambda_n)_{n \geq 1}$ ordonnée en décroissant : $\lambda_1 > \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \dots$

Dans tout le paragraphe, e sera fixé égal à $e_n = \mu_n(U)$ où

$$(4.2) \quad \mu_n = \psi_n^2 \cdot \nu \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T}) \quad \text{et}$$

$$(4.3) \quad \mathcal{P}_n(\mathbb{T}) = \{\mu \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T}) : \mu = \psi^2 \cdot \nu, (\frac{1}{2} \Delta + U)\psi = \lambda_n \psi\}.$$

Remarquons que l'espace propre associé à λ_n est, pour $n > 1$, de dimension quelconque finie. $P_n(T)$ contient bien sûr $(\varphi_n)^2 \cdot \nu$, mais peut aussi contenir d'autres éléments qui ne lui sont pas proportionnels.

Le principe de Boltzmann s'applique encore dans ce cadre et nous dit que

$$P^*(R_t \cong \tilde{Q} | R_t \in \mathcal{E}_n^\delta(e_n)) \underset{\substack{t \rightarrow +\infty \\ \delta \rightarrow +\infty}}{\sim} \exp -t \left(H(\tilde{Q}|P) - \inf_{Q \in \mathcal{E}_n(e_n)} H(Q|P) \right) .$$

La question naturelle découlant de cette estimation est la suivante :

Quels sont les états \tilde{Q} d'énergie e_n qui réalisent le minimum de l'entropie moyenne sur ce niveau d'énergie?

Cela nous amène à définir $\mathcal{G}_n(V)$, l'ensemble des états d'équilibre de R_t sous ce nouveau conditionnement, de la façon suivante

$$(4.4) \quad \mathcal{G}_n(V) = \{ \tilde{Q} \in \mathcal{E}_n(e_n), H(\tilde{Q}|P) = \inf_{Q \in \mathcal{E}_n(e_n)} H(Q|P) \} .$$

Comme en (3.2), l'on peut écrire :

$$(4.5) \quad \inf_{\{Q \in \mathcal{E}_n(e_n)\}} H(Q|P) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{P}_n(T), \mu(U)=e_n\}} \inf_{\{Q \in \mathcal{P}_n(\Omega)\}} H(Q|P) , \\ = \inf_{\{\mu \in \mathcal{P}_n(T), \mu(U)=e_n\}} I(\mu) \text{ (d'après la proposition 6).}$$

Nous cherchons donc

- 1) les mesures $\tilde{\mu} \in \mathcal{P}_n(T)$ telles que $\tilde{\mu}(U)=e_n$, et $I(\tilde{\mu}) = \inf_{\{\mu \in \mathcal{P}_n(T), \mu(U)=e_n\}} I(\mu) < +\infty$
- 2) les processus ayant pour loi les mesures \tilde{Q} , telles que $H(\tilde{Q}|P) = I(\tilde{\mu})$.

Réponse à 1)

Le principe variationnel de Rayleigh relatif à la $n^{\text{ième}}$ valeur propre λ_n joue un rôle fondamental pour résoudre la question ci-dessus. Nous l'énonçons dans le Théorème 11 tel qu'il est écrit dans [Co-Hi], p. 346 ; malheureusement, nous ne pouvons plus (comme dans le cas $n=1$) en fournir une démonstration directe, car la martingale Z_t définie en (1.10) à partir de φ_1 n'a plus de sens si l'on remplace les indices "1" par des indices "n", la fonction ϕ_n admettant des zéros. La formule de translation (1.12) n'est donc apparemment pas généralisable à ce nouveau cadre.

Théorème 11 : Soit U un potentiel continu sur le tore ; alors

$$(4.6) \quad \sup_{\mu \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T})} \left(\mu(U) - I(\mu) \right) = \lambda_n$$

où le suprémum n'est atteint que pour les mesures admettant comme densité une fonction d'onde associée à la valeur propre λ_n (en particulier $\mu = (\varphi_n)^2 \cdot \nu$ réalise l'infimum).

Remarque : Une différence fondamentale avec le cas $n=1$ traité dans le théorème 8, est que nous perdons l'unicité des probabilités qui atteignent le suprémum

De la formule (4.6), on déduit que

$$\sup_{\{\mu \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T}), \mu(U)=e_n\}} \left(\mu(U) - I(\mu) \right) \leq \lambda_n,$$

$$\text{soit encore} \quad e_n - \inf_{\{\mu \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T}), \mu(U)=e_n\}} I(\mu) \leq \lambda_n,$$

qui est équivalent à

$$(4.7) \quad \inf_{\{\mu \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T}), \mu(U)=e_n\}} I(\mu) \geq e_n - \lambda_n.$$

Or, d'après la définition (4.3), tout élément μ de $\mathcal{P}_n(\mathbb{T})$ satisfait

$$\mu(U) - I(\mu) = \lambda_n;$$

donc, tout élément $\tilde{\mu}$ de $\mathcal{P}_n(\mathbb{T})$ d'énergie e_n (il existe au moins un élément satisfaisant ces conditions, c'est μ_n définie en (4.2)), satisfait

$$I(\tilde{\mu}) = e_n - \lambda_n.$$

Replacé dans (4.7), on obtient

$$\forall \tilde{\mu} \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T}), \quad \tilde{\mu}(U)=e_n, \quad \inf_{\{\mu \in \mathcal{P}_n(\mathbb{T}), \mu(U)=e_n\}} I(\mu) = I(\tilde{\mu}).$$

De plus, d'après le théorème 11, ces mesures $\tilde{\mu}$ sont les seules mesures satisfaisant $\tilde{\mu}(U)=e_n$ qui atteignent l'infimum de la fonctionnelle I sur $\mathcal{P}_n(\mathbb{T})$.

La question 1 est donc résolue :

les probabilités $\tilde{\mu}$ recherchées sont les mesures satisfaisant $\tilde{\mu}(U)=e_n$ qui ont pour densité le carré d'une fonction propre de l'opérateur de Schrödinger, associée à la valeur propre λ_n , et orthogonale à l'espace propre engendré par les $n-1$ premières fonctions propres $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$.

Réponse à 2):

Ce problème est équivalent à celui de la construction de la loi d'un Brownien avec dérive singulière, celle-ci étant de type $\frac{1}{2} \nabla(\log \psi^2)$, où ψ , élément de l'espace de Dirichlet, admet des zéros. Le cas stationnaire a été considéré en

premier par Alberverio et Hoegh-Krohn [Al-Ho], puis a eu de nombreux développements jusqu'à maintenant (cf par exemple [Al-Bi-Ho], [Bi-Go]. Dans ce dernier, on trouvera un sommaire très clair de la littérature sur ce sujet.)

C'est une question centrale de la mécanique stochastique de Nelson [Ne], quand la fonction ψ est une fonction propre d'ordre $n > 1$ de l'opérateur de Schrödinger. Nous utiliserons les résultats de Meyer et Zheng [Me-Zh], que nous rappelons brièvement ;

si ψ est une fonction propre de l'opérateur de Schrödinger associée à la valeur propre λ_n , l'on peut construire une diffusion appelée

processus de Nelson, de loi P^{ψ^2} ayant les propriétés suivantes :

(4.8) $P^{\psi^2}(\{\omega, \zeta(\omega) < +\infty\}) = 0$ où ζ est le temps de mort du processus. Cela signifie que les trajectoires du processus de loi P^{ψ^2} ne rencontre jamais l'ensemble $N = \{x \in \mathbb{T}, \psi(x) = 0\}$.

En d'autres termes, les surfaces nodales sur lesquelles ψ s'annulent sont des barrières infranchissables pour les trajectoires.

(4.9) le processus de loi P^{ψ^2} est stationnaire et de marginale $\psi^2 \cdot \nu$

(4.10) pour $\psi^2 \cdot \nu$ -presque tout $x \in N^c$, P^{x, ψ^2} est la loi d'un mouvement brownien sur \mathbb{T} partant de x et de dérive $\frac{1}{2} \nabla(\log \psi^2)$.

Cette construction est faite plus généralement dans [Me-Zh] pour tout ψ tel que $\psi^2 \cdot \nu \in \mathcal{P}_1(\mathbb{T})$. Nous pouvons donc démontrer la généralisation suivante de la formule (3.4) :

Proposition 12 : Si f est une fonction telle que $f \cdot \nu \in \mathcal{P}_1(\mathbb{T})$ alors, pour tout $Q \in \mathcal{P}_{f \cdot \nu}(\Omega)$,

$$(4.11) \quad H(Q|P) = H(Q|P^f) + I(f \cdot \nu) .$$

(En particulier, cette dernière égalité est satisfaite quand $f = (\varphi_n)^2$).

Preuve: Quand $f \cdot \nu \in \mathcal{P}_1(\mathbb{T})$, l'égalité (4.11) a bien un sens car d'après [Me-Zh] P^f existe et $I(f \cdot \nu)$ est finie ; sa démonstration se déroule alors comme celle de (3.4) .

Pour toute fonction propre ψ de l'opérateur de Schrödinger, ψ et $\nabla\psi$ appartiennent à $L^2(\mathbb{T})$, ce qui revient à dire que $\psi^2 \cdot \nu$ appartient à $\mathcal{P}_1(\mathbb{T})$. Donc $I(\psi^2 \cdot \nu)$ est finie, égale à $\frac{1}{2} \int |\nabla\psi|^2 d\nu$.

En conclusion, sur $\mathcal{P}_{f \cdot \nu}(\Omega)$, l'entropie minimale n'est réalisée que par P^f . ■

Nous avons donc la réponse à la question 2), qui nous permet d'expliciter l'ensemble $\mathcal{G}_n(V)$ des états d'équilibre de R_t sur le niveau d'énergie $\mathcal{E}_n(e_n)$.

$\mathcal{G}_n(V)$ est formé de lois de processus de Nelson P^{ψ^2} , où $\psi^2 \cdot \nu(U) = e_n$ ($=\psi_n^2 \cdot \nu(U)$, défini en (5.2)) et ψ est une fonction propre de l'opérateur de Schrödinger $\frac{1}{2}\Delta + U$ associée à la $n^{\text{ème}}$ valeur propre et orthogonale aux $n-1$ premières fonctions propres $\varphi_1, \dots, \varphi_{n-1}$.

Si $\mathcal{G}_n(V)$ admet plusieurs éléments (i.e. il y a non-unicité des états d'équilibre), nous retrouvons un phénomène semblable à celui dénommé en mécanique statistique par **transition de phase**.

BIBLIOGRAPHIE

- [Al-Ho] S. Albeverio, R. Hoegh-Krohn : A remark on the connection between stochastic mechanics and the heat equation, J. Math. Phys. 15, 1745 (1974)
- [Al-BI-Ho] S. Albeverio, Ph. Blanchard, R. Hoegh-Krohn : Newtonian diffusions and planets, with a remark on a non-standart Dirichlet forms and polymers, "Stoch. Anal. and Appl.", Truman, Williams (eds) LN in Math. 1095, Springer (1984)
- [Bl-Go] Ph. Blanchard, S. Golin : Diffusion processes with singular drift fields, Comm. Math. Phys. 109 (1987) 421-435
- [Co-Hi] R. Courant, D. Hilbert : *Methoden der Mathamatischen Physik I*, Springer Verlag, (1968)
- [De-St-Ze] J.-D. Deuschel, D.W. Stroock, H. Zessin : Microcanonical distributions for lattice gases, à paraitre dans Comm. Math. Phys.
- [Do-Va] M.D. Donsker, S.R.S. Varadhan : Asymptotic evaluation of certain Wiener integrals for large time, Functional Integration and its Applic., Proc. International Conference Cumberland Lodge, London 1974, A.M. Arthurs (Ed.), Clarendon Press (1975)
- [Do-Va IV] M.D. Donsker, S.R.S. Varadhan : Asymptotic evaluation of certain Markov process expectations for large time, Comm. Pure Appl. Math. 36 (1983) p.183-212
- [Ka] M. Kac : On some connections between probability theory and differential

and integral equations, Proc. 2nd Berkeley Symp. (1950) p.189-215

- [Me-Ze] P.A. Meyer, W.A. Zheng : Construction de processus de Nelson réversibles, Séminaire de Probabilités XVIII, L.N. in Math. Springer Verlag (1985) p.12-26
- [Ne] E. Nelson : Critical diffusions, Séminaire de Probabilités XVIII, L.N. in Math. Springer Verlag (1985) p.1-11
- [Va] S.R.S. Varadhan : Asymptotic probabilities and differential equations, Comm. Pure Appl. Math. 19 (1966) p.261-286
- [Ze] H. Zessin : Boltzmann's principle for Brownian motion on the torus, Prépublication (1990)

Nous remercions Reinhard Lang dont les idées ont en grande partie inspiré ce travail.

Y. R. tient à remercier les membres de BiBoS et du laboratoire de physique de l'université de Bielefeld qui l'ont accueillie chaleureusement et ainsi, ont favorisé la réalisation de ce travail.

S.R.: U.A. CNRS 224, Laboratoire de Probabilités, Université Paris 6, Tour 56, 4 place Jussieu, F-75252 Paris Cedex 05

Adresse temporaire : BiBoS, Institut für Physik, Universität Bielefeld, D-4800 Bielefeld 1

H.Z.: Institut für Mathematik, Universität Bielefeld, D-4800 Bielefeld 1