

# Inéquivalence d'ensembles et interactions à longues portées

Paillusson Fabien

16 juillet 2007

## Résumé

Cet exposé est une synthèse de résultats généraux en mécanique statistique d'équilibre des systèmes avec des interactions longue portée tirés de l'étude de plusieurs articles de Julien Barré et al. et d'une partie de sa thèse sur les inéquivalences d'ensembles dans ces systèmes.

## 1 Introduction

En mécanique statistique d'équilibre, les contraintes imposées au système étudié (un ou plusieurs paramètres fixés par exemple) conduisent souvent à travailler dans un ensemble statistique choisi dans la plupart des cas pour des commodités de calcul. L'idée sous-jacente dans ce type de raisonnements est que la thermodynamique du système étudié est supposée être la même quel que soit l'ensemble choisi.

Pour être un peu plus précis, considérons les ensembles canonique ( $T, V, N$  fixés) et microcanonique ( $E, V, N$  fixés). Ces deux ensembles sont définis a priori indépendamment (dans un sens à préciser ultérieurement) l'un de l'autre, pourtant dans la majorité des cas il existe une relation bi-univoque entre ces deux ensembles qui implique que la thermodynamique d'un état d'équilibre canonique est la même que celle de l'état d'équilibre microcanonique correspondant ; on dit qu'il y a équivalence d'ensemble. La méthode usuelle[1] pour le montrer consiste à partir de l'ensemble microcanonique décrivant un système isolé  $\Sigma$  à énergie  $E$  donnée puis de partager ce système en deux sous-systèmes, disons  $\Sigma_1$  d'énergie  $E_1$  et  $\Sigma_2$  d'énergie  $E_2$  en supposant  $\Sigma_1$  très grand devant  $\Sigma_2$  de telle sorte que  $E_1$  soit très grand devant  $E_2$ . A présent si on appelle  $\Omega(E)$  le nombre de microétats de  $\Sigma$  à énergie comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$ , la probabilité d'un microétat  $\lambda$  dans l'ensemble microcanonique est définie par :

$$P_\lambda(E) = \frac{1}{\Omega(E)} \quad (1)$$

Si on s'intéresse ensuite à la probabilité que le sous système  $\Sigma_2$  soit dans l'état  $\lambda_2$  à énergie  $E_2$  on peut montrer, en supposant  $E = E_1 + E_2$  et  $\Sigma_1, \Sigma_2$  indépendants, que :

$$P_{\lambda_2} = \frac{\Omega(E_2, \lambda_2)}{\Omega(E)} = \frac{\Omega_1(E_1 = E - E_2)}{\sum_{E_1} \Omega(E_1 = E - E_2)} = \frac{e^{-\beta E_2}}{\sum_{\{\lambda_2\}} e^{-\beta E_2}} \quad (2)$$

où  $\Omega(E_2, \lambda_2)$  est le nombre de configurations du système  $\Sigma$  pour lesquels le sous système  $\Sigma_2$  est dans l'état  $\lambda_2$  d'énergie  $E_2$ ,  $\Omega_1(E_1 = E - E_2)$  est le nombre de microétats de  $\Sigma_1$  à énergie comprise entre  $E_1$  et  $E_1 + \delta E_1$  sachant que  $E_1 = E - E_2$  et  $k_B \beta = \frac{1}{T} \equiv \frac{\partial S_1}{\partial E_1} |_E$ .

On notera donc dans ce cas que la statistique d'équilibre microcanonique pour  $\Sigma$  implique une statistique d'équilibre canonique pour  $\Sigma_2$ . D'un autre point de vue, si on part directement de l'ensemble canonique pour la statistique du système  $\Sigma_2$  en introduisant un paramètre  $\beta$  qui impose l'énergie moyenne  $\langle E_2 \rangle$  du système, on peut montrer dans la limite thermodynamique ( $N \rightarrow \infty$ ) que la plupart des microétats  $\lambda_2$  de  $\Sigma_2$  dans l'ensemble canonique sont à la même énergie  $U_2 \approx \langle E_2 \rangle$  ce qui conduit à l'ensemble microcanonique ; les ensembles sont donc équivalents.

Il est important de remarquer que le résultat précédent n'est valable que si il y a additivité des

énergies et si les sous-systèmes peuvent être considérés comme indépendants, ce qui est le cas pour des systèmes usuellement étudiés comme les réseaux de spins avec interactions entre proches voisins, gaz et liquides de VDW par exemple mais qui n'est a priori pas correct pour des systèmes avec interaction gravitationnelle ou Coulombienne pour ne citer qu'eux. En effet, de façon tout à fait générale, l'énergie  $E$  du système  $\Sigma$  est reliée aux énergies de ses deux sous-systèmes  $E_1$  et  $E_2$  via  $E = E_1 + E_2 + E_I$  où  $E_I$  est l'énergie d'interaction entre  $\Sigma_1$  et  $\Sigma_2$ . Si  $E_I \ll E_{1,2}$  alors on a additivité des énergies et les sous systèmes peuvent être sous certaines conditions considérés comme indépendants, en revanche si  $E_I \sim E_{1,2}$  alors il n'y a pas additivité des énergies et le résultat précédent sur l'équivalence canonique-microcanonique n'est pas valable a priori. Ainsi, on appellera *interactions à courte portée*, des interactions pour lesquelles  $E_I \ll E_{1,2}$  et a contrario *interactions à longue portée* des interactions pour lesquelles  $E_I \sim E_{1,2}$ .

Dans toute la suite, on s'intéressera à la caractérisation des ensembles canonique et microcanonique ainsi qu'à la généralisation des concepts d'équivalence et d'inéquivalence d'ensembles dans le cadre des interactions longues portées.

## 2 Mécanique statistique pour les interactions longue portée

### 2.1 Théorie des larges déviations

On considère  $N$  variables aléatoires  $\{\xi_i\}_{i=1..N}$  de moyenne nulle, indépendantes et de même loi de probabilité dont on évalue la moyenne arithmétique  $S_N$  définie par :

$$S_N \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (3)$$

On sait d'après la loi des grands nombres que si  $\xi_i$  est de variance finie  $S_N$  tend vers  $\langle \xi_i \rangle = 0$  quand  $N \rightarrow \infty$  avec un écart type  $\sqrt{\langle (S_N - \langle \xi_i \rangle)^2 \rangle} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$ . On cherche à avoir plus d'informations sur la probabilité d'avoir  $S_N$  dans l'intervalle  $[x, x + dx]$  avec  $x$  a priori différent de zéro, autrement dit, on cherche la probabilité  $P(S_N \in [x, x + dx])$ .

Typiquement, si on s'intéresse à la probabilité d'avoir  $S_N$  supérieur à  $\alpha$  avec  $\alpha > 0$ , l'inégalité de Bienaymé-Tchebychev nous conduit à

$$P(S_N > \alpha) \leq \frac{Var(S_N)}{\alpha^2} = \frac{Var(\xi)}{\alpha^2 N} \quad (4)$$

où  $Var(\cdot)$  désigne la variance de la variable aléatoire en argument. Notamment, dans le cas d'une grande déviation par rapport à la moyenne i.e. si  $\alpha > \sqrt{\frac{Var(\xi)}{N}}$  on peut s'attendre à une décroissance exponentielle de la distribution de  $S_N$ . Ce dernier raisonnement constitue une approche intuitive de ce que l'on appelle le *principe de grande déviation*[6].

Aussi, on dira (de façon non rigoureuse au sens des mathématiques mais convenable d'un point de vue physique) qu'une suite de variables aléatoires  $(\mu_n)_{n=1.. \infty}$  dépendant d'un paramètre  $n$  vérifie le principe des grandes déviations si il existe une *fonction de taux*  $I(x)$  ( $I : \mathbf{R}^d \rightarrow [0; \infty[$ ) telle que :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln P(\mu_n \in [x, x + dx]) = -I(x) \quad (5)$$

En particulier, le théorème de Cramér montre que la moyenne empirique  $S_N$  (qui est une suite de variables aléatoires) définie précédemment vérifie le principe des grandes déviations et permet une évaluation de la fonction de taux  $I(x)$  de la façon suivante :

On considère nos  $N$  variables aléatoires de départ  $\{\xi_i\}_{i=1..N}$  définies cette fois sur  $\mathbf{R}^d$  et on définit la fonction  $\psi$  par :

$$\psi(\lambda) = \langle e^{\lambda \cdot \xi} \rangle \quad (6)$$

où le “.” correspond au produit scalaire usuel dans  $\mathbf{R}^d$  et  $\langle \rangle$  est la moyenne associée aux variables aléatoires  $\xi_i$ . D’après le théorème de Cramér, si  $\psi(\lambda) < \infty \forall \lambda$  alors on a :

$$\begin{aligned} i) \ln P(S_N \in [x, x + dx]) &\sim -NI(x), \\ ii) I(x) &\equiv \sup_{\lambda \in \mathbf{R}^d} \{\lambda \cdot x - \ln \psi(\lambda)\} \end{aligned} \quad (7)$$

Nous disposons à présent d’un outil qui va s’avérer très utile pour définir une mécanique statistique d’équilibre pour les interactions longue portée.

## 2.2 Lien avec les interactions longue portée

On cherche à définir et à utiliser une mécanique statistique d’équilibre dans le cadre des interactions longue portée. Ainsi, bien que la propriété d’additivité et d’indépendance de sous-systèmes ne soit a priori pas vérifiées, les systèmes ayant des interactions longue portée ont l’avantage qu’à la limite thermodynamique les approximations de *champ moyen* sont très bonnes voire exactes dans le cas de réseaux complètement connectés par exemple. Pour en tirer profit, on considère un système de  $N$  particules auquel on associe l’espace des phases  $\Sigma_N$ . On appelle  $\lambda_N \in \Sigma_N$  un microétat de ce système auquel on associe un Hamiltonien  $H_N(\lambda_N)$ . On s’intéresse alors à une variable globale  $\gamma(\lambda_N)$  associée à chaque microétat  $\lambda_N$  tel que a priori, un état  $\gamma$  donné puisse correspondre à plusieurs microétats différents<sup>1</sup>. On peut alors séparer le Hamiltonien en deux contributions : l’une provenant de la variable globale  $\gamma$  et l’autre étant un reste ne pouvant être exprimé qu’en termes du microétat  $\lambda_N$  :

$$H_N(\lambda_N) = \tilde{H}_N(\gamma(\lambda_N)) + R_N(\lambda_N) \quad (8)$$

la partie  $R_N(\lambda_N)$  étant supposée négligeable dans le cas de “particules” distribuées sur les noeuds d’un réseau et interagissant via des interactions longue portée. Ce genre d’arguments n’étant en général pas vérifiable a priori et nécessitant en pratique une justification a posteriori apportée par le calcul explicite du hamiltonien, on ne considérera alors que les systèmes pour lesquels  $R_N$  s’annule à la limite thermodynamique.

La probabilité d’être dans l’état global  $\gamma$  s’écrit

$$P(\gamma) \equiv \frac{\Omega_N(\gamma)}{\mathcal{N}^N} = \frac{\Omega_N(\gamma)}{\int d\gamma \Omega_N(\gamma)} \quad (9)$$

où  $\Omega_N(\gamma)$  est le nombre de microétats permettant la réalisation du macroétat  $\gamma$  et  $\mathcal{N}^N$  est le nombre total de microétats.

En considérant la variable  $\gamma$  comme un état “moyen” semblable à la moyenne empirique  $S_N$  définie plus haut, le théorème de Cramér indique qu’il existe une fonction de taux  $I(\gamma)$  telle que :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln P(\gamma(N)) = -I(\gamma) \quad (10)$$

et donne une méthode pour calculer  $I(\gamma)$  (Eq.(7)). Dans l’ensemble microcanonique, l’entropie d’une configuration  $\gamma$  à énergie  $\tilde{H}_N(\gamma)$  est définie par  $s(\gamma) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \Omega_N(\gamma)$  (où on travaille dans un système d’unité dans lequel  $k_B \equiv 1$ ) ce qui conduit à :

$$s(\gamma) \equiv -I(\gamma) + \ln \mathcal{N} \quad (11)$$

En outre, la configuration la plus probable dans l’ensemble microcanonique étant celle qui maximise l’entropie pour une densité d’énergie  $h(\gamma) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\tilde{H}_N}{N} \equiv e$  fixée, l’entropie de l’état d’équilibre microcanonique vérifie donc le principe variationnel :

$$s(e) \equiv \sup_{\gamma} \{s(\gamma) | h(\gamma) = e\} \equiv s(\gamma_m) \quad (12)$$

<sup>1</sup>cela peut être le nombre de spins up, ou une densité par exemple

De la même façon, définissons la fonction de partition dans l'ensemble canonique :

$$Z(\beta, N) \equiv \sum_{\{\lambda_N\}} e^{-\beta H_N(\lambda_N)} \quad (13)$$

où  $\sum_{\{\lambda_N\}}$  est une somme sur les microétats du système. De façon usuelle, le coarse-graining relatif à  $\gamma$  est effectué en décomposant la somme sur les microétats en une somme sur les différentes réalisations de la variable globale  $\gamma$  puis sur les microétats permettant chaque réalisation, c'est à dire :

$$Z(\beta, N) = \int d\gamma \sum_{\{\lambda_N\} \rightarrow \gamma} e^{-\beta H_N(\lambda_N)} \quad (14)$$

En admettant qu'à la limite thermodynamique ( $N \rightarrow \infty$ ) l'Eq.(8) est vérifiée avec  $R_N \rightarrow 0$ , l'Eq.(14) devient donc :

$$Z(\beta, N) \approx \int d\gamma \Omega_N(\gamma) e^{-\beta \tilde{H}_N(\gamma)} = \int d\gamma e^{-N(-s(\gamma) + \beta h(\gamma))} \quad (15)$$

En évaluant l'intégrale via la méthode du col, on obtient finalement

$$Z(\beta, N) \approx e^{-NF(\beta)} \quad (16)$$

où l'énergie libre de l'équilibre canonique vérifie le problème variationnel :

$$F(\beta) = \inf_{\gamma} \{\beta h(\gamma) - s(\gamma)\} \equiv \beta h(\gamma_c) - s(\gamma_c) \quad (17)$$

La recherche d'extrema dans les Eq.(12) et (17) est usuelle en mécanique statistique d'équilibre mais dans notre cas il est à noter que les états d'équilibre dans les ensembles respectifs sont a priori différents ( $\gamma_m \neq \gamma_c$ ). En outre, les interactions longue portée permettent l'utilisation d'une méthode systématique pour dériver l'entropie via l'Eq.(7).

### 3 Equivalence et inéquivalence d'ensembles

Nous avons vu que la recherche des états d'équilibre de certains systèmes avec interactions longue portée revient à résoudre les problèmes variationnels (12) et (17). En fait, l'extremum du problème (12) (resp.(17)) n'est a priori pas unique et cela permet de définir plusieurs classes d'états d'équilibre. Ainsi, on dira qu'une solution d'un des problèmes (12) ou (17) est stable, métastable ou instable si c'est un extremum global, local ou un point col respectivement. Cette notion de stabilité est ici fondamentale puisqu'elle permet en pratique de savoir dans quel état d'équilibre est réellement le système via le théorème de Katz que nous ne présenterons pas ici [5]. Pour en revenir à la comparaison des deux ensembles, définissons la *transformée de Fenchel-Legendre* de  $f(x)$  :

$$f^*(\beta) \equiv \inf_x \{x\beta - f(x)\} \quad (18)$$

afin de relier les solutions canonique et microcanonique. Pour cela, écrivons la définition de la solution canonique en deux temps en minimisant d'abord sur les surfaces d'énergie constante :

$$F(\beta) = \inf_e \inf_{\mu} \{\beta h(\mu) - s(\mu) | h(\mu) = e\} \quad (19)$$

En se rappelant de la définition de la solution microcanonique, on obtient que  $F \equiv s^*$ . En outre pour qu'un état de l'ensemble canonique soit un état microcanonique d'énergie  $e$ , il faut que l'on ait  $s(\gamma_c) = s(e)$ . Or, par définition  $s(e) \geq s(\gamma_c)$  et  $F(\beta) = \beta e - s(\gamma_c)$ . Comme  $F \equiv s^*$  on a également,  $F(\beta) \leq \beta e - s(e)$  ce qui implique que  $s(\gamma_c) \geq s(e)$  donc  $s(\gamma_c) = s(e)$ . En associant ce résultat à d'autres raisonnements semblables basés sur l'analyse convexe, qui permettent de dériver deux règles supplémentaires, on obtient les propositions suivantes[5] :

- 1 Un état d'équilibre canonique à  $\beta$  donné est toujours un état d'équilibre microcanonique pour une certaine énergie  $E$ .
- 2 Considérant une énergie  $E$  pour laquelle  $s$  est au moins deux fois dérivable, alors un état d'équilibre microcanonique d'énergie  $E$  est un état d'équilibre canonique stable ou métastable pour un certain  $\beta$  si et seulement si la fonction  $s$  est localement concave autour du point  $E$  (c'est-à-dire localement en dessous de sa tangente).
- 3 Le deuxième point implique qu'un état d'équilibre microcanonique d'énergie  $E$  quelconque est aussi un état d'équilibre canonique avec un certain  $\beta$  si l'entropie  $s$  coïncide avec son enveloppe concave<sup>2</sup>.

Les premier et troisième points soulignent le fait que la thermodynamique dans l'ensemble microcanonique est plus riche que dans l'ensemble canonique<sup>3</sup>. Le deuxième point est assez surprenant dans le sens où il montre que l'équivalence d'ensembles n'est pas une propriété globale mais qu'elle peut être aussi locale. En particulier si il y a inéquivalence d'ensemble la solution canonique devient instable (dans le cas d'une chaleur spécifique négative par exemple) auquel cas la connaissance de la stabilité de l'équilibre canonique est directement associée à la convexité de l'entropie.

De façon plus générale, par définition les transitions de phase microcanonique seront caractérisées par un manque d'analyticité de l'entropie microcanonique  $s(E)$  alors qu'une transition de phase canonique ou une inéquivalence d'ensemble seront dues à un changement de convexité de l'entropie. Ce dernier point impliquant des comportements qualitativement différents entre les deux ensembles, du point de vue des transitions de phase, puisque l'on peut avoir une transition de phase du second ordre dans l'ensemble canonique et aucune transition dans l'ensemble microcanonique par exemple.

Le paragraphe précédent souligne un point important en pratique lorsque l'on veut connaître la thermodynamique d'un système avec des interactions à longue portée, qui est de savoir quel est l'ensemble qui prédit la physique effectivement observable expérimentalement ?

De façon presque évidente, en revenant aux premiers principes, pour un système hamiltonien ergodique, le meilleur ensemble statistique est l'ensemble microcanonique quelques soient les interactions en jeu dans le système [1, 5]. En revanche, pour des expériences à température fixée, l'ensemble microcanonique n'est pas le bon ensemble de travail et il se peut que l'ensemble canonique ne convienne pas non plus. Dans tous les cas d'éventuels résultats expérimentaux sur ce sujet restent attendus ce qui permettrait de changer, à mon sens, notre façon d'appréhender la mécanique statistique d'équilibre.

## 4 Conclusion

Au cours de cette brève présentation, nous avons montré que les états d'équilibre canonique et microcanonique peuvent être caractérisés par les problèmes variationnels (12) et (17) pour certains systèmes avec interactions longue portée. En outre, bien qu'il n'y ait pas additivité, nous avons vu que l'équivalence de ces ensembles (i.e. coïncidence entre leur état d'équilibre) pouvait être locale et que, plus généralement, la recherche de l'équivalence de ces deux ensembles revenait à étudier la concavité de l'entropie microcanonique. Cette dernière grandeur habituellement difficile à évaluer, ce qui privilégie les calculs dans l'ensemble canonique, pouvant être déterminée systématiquement pour certaines interactions longue portée en utilisant la théorie des grandes déviations.

Ce sujet est important en pratique dans le sens où il présente une méthode pour dériver à la fois l'ensemble canonique et microcanonique pour des interactions longue portée dont des applications sont données pour des systèmes auto-gravitants, un modèle de laser à électrons libres et certains "modèles jouets" dans [2, 3, 5]. Ces résultats sont aussi fondamentaux pour la mécanique statistique d'équilibre puisqu'ils généralisent le concept d'équivalence d'ensembles (en le rendant local) et

<sup>2</sup>Pour rappel, l'enveloppe concave d'une fonction  $f$  est la plus petite fonction concave qui soit supérieure à  $f$

<sup>3</sup>Le fait que la chaleur spécifique ne soit pas définie positive dans l'ensemble microcanonique en est un bon exemple

permet la dérivation d'une thermodynamique tout à fait nouvelle et générale, visible uniquement dans l'ensemble microcanonique, pour les interactions longue portée[4, 5].

## Références

- [1] Leticia Cugliandolo *Mécanique statistique et processus stochastique : applications à la physique de particules et cosmologie (2006)* [www.lpt.ens.fr/~leticia/enseignement.html](http://www.lpt.ens.fr/~leticia/enseignement.html)
- [2] Julien Barré, F. Bouchet, T. Dauxois, S. Ruffo *Large deviation techniques applied to systems with long-range interactions* J. Stat. Phys. 119, 677, 2005
- [3] F. Bouchet, J.Barré *Statistical mechanics of systems with long range interactions* Journal of Physics : Conference Series 31, 18 (2006)
- [4] Freddy Bouchet, Julien Barré *Classification of phase transitions and ensemble inequivalence, in systems with long range interactions* J. Stat. Phys. 118, 1073 (2005)
- [5] Julien Barré, Thèse de doctorat : *Mécanique Statistique et Dynamique Hors Equilibre de Systèmes avec Interactions à Longue Portée* <http://math1.unice.fr/~jbarre/>
- [6] Sophie Rainero et Mathilde Weill, Mémoire de Maîtrise : *Introduction à la théorie des grandes déviations* [www.ceremade.dauphine.fr/~rainero/maitrise\\_rainero\\_weill.pdf](http://www.ceremade.dauphine.fr/~rainero/maitrise_rainero_weill.pdf)