Physique Statistique PHYS 338
2024-2025

Série 1: Laplace et Legendre

Pierre-Simon Laplace (1749-1827), mathématicien et astronome français, est célèbre pour ses travaux en mécanique céleste et en théorie des probabilités. Il fut brièvement ministre de l'Intérieur sous Napoléon, puis fait marquis sous la Restauration, illustrant sa capacité à naviguer les changements politiques de son époque. Adrien-Marie Legendre (1752-1833), également mathématicien français, est connu pour ses contributions en analyse et en théorie des nombres. Lorsqu'il découvrit que Gauss travaillait sur des théories similaires, il publia précipitamment ses résultats pour établir sa priorité, montrant que la compétition scientifique existait déjà à cette époque! Leurs travaux se révèlent fondamentaux en physique statistique.

* Exercise 1 Formule de Stirling

Avant de parler de Laplace, nous allons nous intéresser à James Stirling (1692-1770), un mathématicien écossais connu pour ses contributions significatives à l'analyse et à la théorie des nombres. On veut démontrer la célèbre formule de Stirling donnant le comportement de la fonction factoriel pour $N \gg 1$:

$$N! \simeq N^N e^{-N} \sqrt{2\pi N}\,. \tag{1}$$

Pour ce faire, on utilise la représentation intégrale de la factorielle avec la fonction Gamma:

$$N! = \Gamma(N+1) = \int_0^\infty e^{-t}\, t^N \, dt\ . \tag{2}$$

Q1. En utilisant un changement de variable, montrer que l'on peut écrire $N!$ sous la forme:

$$N! = e^{N \ln N} N \int_0^\infty e^{N f(t)}\, dt,$$

où $f(t)$ est une fonction que l'on précisera.

Q2. Comment se comporte la fonction $e^{Nf(t)}$ pour $N \gg 1$? Justifier que l'on peut approximer $f(t)$ par un développement de Taylor au second ordre autour de son maximum.

Q3. On rappelle la formule de l'intégrale Gaussienne

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2\Delta}} dx = \sqrt{2\pi\Delta}$$

Montrer alors la formule de Stirling pour l'approximation (1) de $N!$. Quelle est son erreur absolue et relative pour $N = 10,\ 100,\ 10^{23}$?

* Exercise 2 Méthode de Laplace

La méthode de l'exercice précédent est en fait très générale, et se nomme méthode de Laplace, formellement la cette méthode se résume au résultat suivant:

$$I_N = \int_a^b e^{Nf(x)} dx \approx e^{Nf(x^\star)} \text{ quand } N \gg 1$$

où $x^\star$ maximisant la fonction $f(x)$. Cette technique (qui permet de remplacer une intégration a priori difficile par une simple maximisation) est tellement fondamentale en physique statistique que nous allons devoir la démontrer proprement (et en particulier donner un sens précis au terme $\approx$). Pour simplifier le problème, on suppose dans la suite du problème l'hypothèse suivante:

Hyp: *$f \in C^2([a,b])$, $\exists!\, x^* \in (a,b)$ tel que $f'(x^*) = 0$ et de plus on suppose que $f''(x^*) \neq 0$.*
Pour obtenir le résultat voulu, considérons l'intégrale suivante :

$$\mathcal{I}_N := \frac{I_N}{e^{Nf(x^*)}} = \int_a^b e^{N(f(x)-f(x^\star))} dx = \int_{a-x^\star}^{b-x^\star} e^{N(g(x)-g(0))} dx$$

avec $g(x) = f(x - x^\star)$ qui a son maximum en 0.

Q1. Justifiez que l'on peut toujours, pour une certaine valeur de γ, diviser l'intervalle d'intégration en ne conservant qu'un intervalle $[-\delta, \delta]$ autour duquel la fonction $g(x)$ admet une dérivée seconde négative.

$$\exists \gamma, \delta > 0 : \int_{-\delta}^{\delta} e^{N(g(x)-g(0))} \leq \mathcal{I}_N \leq (b-a)e^{-\gamma N} + \int_{-\delta}^{\delta} e^{N(g(x)-g(0))} \tag{8}$$

Q2. Justifier (par exemple graphiquement) que l'on peut toujours écrire, dans l'intervalle $[-\delta, \delta]$, que

$$\frac{x^2}{2} g''(0)(1-\epsilon) \leq g(x) - g(0) \leq \frac{x^2}{2} g''(0)(1+\epsilon) \tag{9}$$

avec ϵ arbitrairement petit quand l'on rétrécie l'intervalle $[-\delta, \delta]$.

Q3. Montrez que l'on peut par ailleurs écrire, en utilisant la borne de Hoeffding pour l'intégrale Gaussienne[1]

$$\int_{-\delta}^{\delta} e^{-NC\frac{x^2}{2}} \mathrm{d}x = \sqrt{\frac{2\pi}{NC}} + O(e^{-N}) \tag{10}$$

Q4. Finalement montrer que cela implique que pour tout ϵ on a:

$$O(e^{-N}) + \sqrt{\frac{2\pi}{-Ng''(0)(1+\epsilon)}} \leq \mathcal{I}_N \leq O(e^{-N}) + \sqrt{\frac{2\pi}{-Ng''(0)(1-\epsilon)}}$$

Q5. Cela nous permet d'écrire plus rigoureusement la signification de la méthode de Laplace, que l'on peut formuler de deux façons : la première, la plus utile en physique statistique, étant

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log \int_a^b e^{Nf(x)} dx = f(x^\star) = \max_x f(x) \tag{11}$$

et la seconde, un peu plus précise :

$$\lim_{N\to\infty} \frac{\int_a^b e^{Nf(x)} dx}{e^{Nf(x^\star)}} = \sqrt{\frac{2\pi}{-Nf''(x^\star)}} \tag{12}$$

[1] Nous verrons en effet dans le prochain cours une formule très utile pour une variable Gaussienne de moyenne nulle :

$$\mathbb{P}(X > k) = \frac{1}{2\pi\Delta} \int_k^\infty e^{-x^2/2\Delta} \leq e^{-k^2/2\Delta}$$

Q6. Argumenter pourquoi si le maximum x^* n'est plus unique mais qu'il existe un nombre fini de supremum, on peut écrire a la place, en somment sur tout les supremum x_i^*, que

$$I_N = \int_a^b e^{Nf(x)}dx \approx \sum_i \sqrt{\frac{2\pi}{f''(x_i^\star)}}e^{Nf(x_i^\star)} \text{ quand } N \to \infty \tag{13}$$

et que

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \log \int_a^b e^{Nf(x)}dx = \sup_x f(x) \tag{14}$$

* Exercise 3 De Laplace à Legendre

Appliquons la méthode de Laplace à des fonctions de type $f(x,\lambda) = -e(x) + \lambda x$. On définit la séquence de fonctions

$$s_N(\lambda) = \frac{1}{N} \log \int_a^b e^{N(-e(x)+\lambda x)}\, dx \text{ et } s(\lambda) = \lim_{N\to\infty} s_N(\lambda)$$

Q1. Montrer que $s_N(\lambda)$ est une fonction convexe, en montrant que sa dérivée seconde est toujours positive.

Q2. Montrer en utilisant la méthode de Laplace que $s(\lambda)$ est la transforme de Legendre (ou plus précisément de Legendre-Fenchel [2]) de la fonction $e(x)$. Pourquoi est-elle forcement convexe?

$$s(\lambda) = \sup\left[-e(x) + x\lambda\right] = -e(x^\star) + x^\star\lambda \tag{28}$$

Q3. Montrer le résultat fondamental des Transformée $s(.)$ de Legendre (Attention! $x^\star$ est une fonction de λ! On devrai plutôt écrire $s(\lambda) = -e(x^\star(\lambda)) + x^\star(\lambda)\lambda$ pour être correct):

$$\frac{d}{d\lambda}s(\lambda) = x^\star \tag{29}$$

Nous allons voir bientôt que le fait que les Transformées de Legendre apparaissent partout en physique statistique (et par conséquent, en thermodynamique) est une conséquence de la formule de Laplace pour les intégrales.

* Exercise 4 Tranformée et double-tranformée de Legendre-Fenchel

On définit la *transformée de Legendre-Fenchel* de la fonction $e(x)$ par

$$s(\lambda) = \overline{e}(\lambda) = \sup_x\left[-e(x) + x\lambda\right] = -e(x^\star) + x^\star\lambda \tag{37}$$

On peut aussi calculer la transformée de la transformée :

$$\overline{\overline{e}}(x) = \overline{s}(\lambda) = \sup_\lambda\left[-s(\lambda) + x\lambda\right] . \tag{38}$$

On va se poser la question de la relation entre la double Transformée $\overline{\overline{e}}(.)$ et la fonction originale $e(.)$.

Q1. Est-il est possible que $\overline{\overline{e}}(x) = e(x)$ pour toute fonction $e(.)$? Donner un contre-exemple évident en utilisant la question $3-1$.

[2] Il faut rendre justice à Fenchel qui a explicitement généralisé les travaux de Legendre qui étaient restreints aux fonctions convexes. C'est Fenchel qui a étendu ces concepts aux fonctions non différentiables et non convexes.

Q2. Montrer que si $e(.)$ est strictement convexe, alors il ne peut y a qu'un seul maximum, et que la relation entre λ et x^* est unique et inversible [3].

Q3. Montrer que pour toute fonction convexe $e(.)$ (et seulement dans ce cas) on a bien $\overline{\overline{e}}(x) = e(x)$.

Q4. Vérifier numériquement que si $e(.)$ n'est pas convexe, la double Transformée $\overline{\overline{e}}(.)$ donne l'enveloppe convexe de la fonction $e(x)$.

[3] On rappelle le théorème suivant qui qui explicite la dérivée de la réciproque d'une fonction bijective et dérivable en fonction de la dérivée:

$$\left[f^{-1}\right]'(a) = \frac{1}{f'\left(f^{-1}\left(a\right)\right)}$$

.