L'intégration gaussienne

calculo ergo sum

Tant en physique statistique qu'en théorie quantique des champs, pour faire des prédictions observables, le calcul de valeurs moyennes, de diagrammes ou de fonctions de partition fait intervenir des intégrales du type :

$$\int d\phi \, e^{-\text{forme quadratique en } \phi + \text{termes linéaires}}\,, \qquad \text{(Intégrale gaussienne)}$$

où la forme quadratique représente souvent l'énergie (cinétique, magnétique, ...) du système que l'on étudie, mais peut également provenir d'une manipulation formelle où l'on a ramené la résolution d'un problème au calcul d'une intégrale gaussienne.

Le résultat de ces intégrales varie en fait peu suivant la nature de la variable d'intégration (nombre, vecteur, fonction).

Le cas à une variable

$$\boxed{\begin{aligned} \int dx \; \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2\right) &= \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \\ \int dx \, x^2 \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2\right) &= \sqrt{\frac{2\pi}{a}}\frac{1}{a} \\ \int dx \; \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2 + bx\right) &= \sqrt{\frac{2\pi}{a}} \exp\left(\frac{1}{2}\frac{b^2}{a}\right) \end{aligned}} \qquad (\text{pour } a > 0)$$

La dernière relation est utile, par exemple, dans un problème où intervient une exponentielle du type $\exp(b^2)$ dans laquelle on veut linéariser le terme en b^2, ce qui est possible en introduisant un paramètre supplémentaire, x, variable muette d'intégration. Cette dernière relation permet surtout de démontrer facilement la deuxième relation en écrivant :

$$\int dx \, x^2 \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2\right) = \partial_j^2 \int dx \; \exp\left(-\frac{1}{2}ax^2 + jx\right) \Bigg|_{j=0} .$$

Le cas à n variables, première version

A désigne une matrice, b, x des vecteurs réels en dimension n, et l'on utilise les notations évidentes :

$$bx = \sum_i b_i x_i \qquad xAy = \sum_{ij} x_i A_{ij} y_i \qquad dx = dx_1 \dots dx_n \,,$$

qui permettent d'écrire les relations d'intégration sans faire apparaître explicitement la dimension.

Si A est symétrique définie positive :

$$\boxed{\begin{aligned}
\int dx\ \exp\left(-\frac{1}{2}xAx\right) &= \sqrt{\det\frac{2\pi}{A}}\\
\int dx\ x_i x_j \exp\left(-\frac{1}{2}xAx\right) &= \sqrt{\det\frac{2\pi}{A}}\ (A^{-1})_{ij}\\
\int dx\ \exp\left(-\frac{1}{2}xAx+bx\right) &= \sqrt{\det\frac{2\pi}{A}}\ \exp\left(\tfrac{1}{2}\,bA^{-1}b\right)
\end{aligned}}$$

Remarques :

- Toute forme quadratique en x peut se mettre sous la forme xAx, où A est symétrique. Si B n'est pas symétrique, on peut toujours écrire :

$$xBx = x\underbrace{\frac{B+B^T}{2}}_{\text{symétrique}}x + \underbrace{x\frac{B-B^T}{2}x}_{=0}$$

- Si la matrice A est fixée et que l'on pose :

$$\langle f(x)\rangle = \frac{\int dx\ f(x)e^{\frac{1}{2}xAx}}{\int dx\ e^{\frac{1}{2}xAx}}\ ,$$

alors, d'après les trois relations encadrées :

$$\Big\langle \exp\left(ibx\right)\Big\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}\Big\langle (bx)^2\Big\rangle\right)\ .$$

Autrement dit : les seuls cumulants non-nuls d'une loi gaussienne (centrée[1]) sont les cumulants d'ordre 2. Réciproquement, si une loi de probabilité centrée P vérifie cette propriété, alors elle est gaussienne. En effet (par exemple en dimension 1) :

$$\begin{aligned}
P(\tilde{x}) &= \int dx\ P(x)\delta(x-\tilde{x})\\
&= \big\langle \delta(x-\tilde{x})\big\rangle\\
&= \int \frac{dk}{2\pi}\ \left\langle e^{ik(x-\tilde{x})}\right\rangle\\
&= \int \frac{dk}{2\pi}\ e^{-ik\tilde{x}}\left\langle e^{ikx}\right\rangle\\
&= \int \frac{dk}{2\pi}\ \exp\Big(-ik\tilde{x}+\frac{1}{2}(ik)^2\langle x^2\rangle_c + \underbrace{\frac{1}{3!}(ik)^3\langle x^3\rangle_c+\dots\Big)}_{=0}\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\langle x^2\rangle_c}}\exp\left(-\frac{1}{2}\frac{\tilde{x}^2}{\langle x^2\rangle_c}\right)\ .
\end{aligned}$$

[1] centrée, *i.e.* vérifiant $\langle x\rangle$=0.

- Pour une loi gaussienne non centrée, l'égalité s'écrit :

$$\big\langle \exp\ bx \big\rangle = \exp\left(b\langle x\rangle + \frac{1}{2}\big\langle (bx)^2 \big\rangle_c \right) .$$

  Cette relation permet d'accéder à $\langle x^2 \rangle_c$ si l'on sait facilement calculer $\big\langle \exp\ bx \big\rangle$, ce qui est souvent le cas. Ainsi, une loi (centrée ou non) est gaussienne si, et seulement si ses seuls cumulants non-nuls sont d'ordre ≤ 2.

- La deuxième relation encadrée s'écrit :

$$\langle x_i x_j \rangle = (A^{-1})_{ij}.$$

  Autrement dit : la fonction à deux points $\langle x_i x_j \rangle$ (le "*propagateur*") s'obtient à partir de l'inverse de la partie quadratique xAx de l'"*action*".

Le cas à n variables, deuxième version

On notera $x_1, \ldots, x_n, \bar{x}_1, \ldots, \bar{x}_n$ des variables réelles indépendantes. De même, on notera b et $\bar{b}$ des vecteurs complexes qui ne sont pas forcément conjugés l'un à l'autre. Pour une matrice A définie positive (mais pas nécessairement symétrique) :

$$\boxed{\begin{aligned} \int dx d\bar{x}\ \exp\big(-\bar{x}Ax \big) &= \det\left(\frac{2\pi}{A}\right) \\ \int dx d\bar{x}\ x_i \bar{x}_j \exp\big(-\bar{x}Ax \big) &= \det\left(\frac{2\pi}{A}\right)\ (A^{-1})_{ij} \\ \int dx d\bar{x}\ \exp\big(-\bar{x}Ax + \bar{b}x + b\bar{x} \big) &= \det\left(\frac{2\pi}{A}\right)\ \exp\big(\bar{b}A^{-1}b \big) \end{aligned}}$$

Le cas à continu

On s'intéresse à des poids du type :

$$\langle F(\phi) \rangle = \int \mathcal{D}\phi\ F(\phi) \exp\left(-\frac{1}{2}\int dxdy\ \phi(x)\Gamma(x,y)\phi(y) \right) ,$$

c'est-à-dire faisant intervenir une intégrale fonctionnelle, pour laquelle on prendra une mesure d'intégration normalisée, suivant le contexte, selon :

$$\int \mathcal{D}\phi\ \exp\left(-\frac{1}{2}\int dxdy\ \phi(x)\Gamma(x,y)\phi(y) \right) = 1,$$
$$\int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\bar{\phi}\ \exp\left(-\int dxdy\ \bar{\phi}(x)\Gamma(x,y)\phi(y) \right) = 1.$$

Pour généraliser les relations à n variables, on a besoin de définir l'inverse de l'opérateur $\Gamma(x,y)$. Il doit vérifier les deux conditions :

$$\int dz\ \Gamma^{-1}(x,z)\Gamma(z,y) = \delta(x-y),$$
$$\int dz\ \Gamma(x,z)\Gamma^{-1}(z,y) = \delta(x-y).$$

Par exemple :

$$\begin{aligned}
\big[a\delta(t-s)\big]^{-1} &= \frac{1}{a}\delta(t-s) \\
\big[\delta(t-s)(\partial_t+\gamma)\big]^{-1} &= \theta(t-s)e^{-\gamma(t-s)} \\
\big[\delta(x-y)(\partial_x^2-m^2)\big]^{-1} &= -\frac{1}{2m}e^{-m|x-y|}
\end{aligned}$$

Les relations d'intégration sont :

$$\boxed{\begin{aligned}
&\int \mathcal{D}\phi\ \phi(x_1)\phi(x_2)\exp\left(-\frac{1}{2}\int dxdy\ \phi(x)\Gamma(x,y)\phi(y)\right) = \Gamma^{-1}(x_1,x_2) \\
&\qquad\int \mathcal{D}\phi\ \exp\left(-\frac{1}{2}\int dxdy\ \phi(x)\Gamma(x,y)\phi(y)\right. \\
&\qquad\qquad\left.+\int dx\ \phi(x)b(x)\right) = \exp\left(\frac{1}{2}\int dxdy\ b(x)\Gamma^{-1}(x,y)b(y)\right)
\end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned}
&\int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\bar{\phi}\ \phi(x_1)\bar{\phi}(x_2)\exp\left(-\int dxdy\ \bar{\phi}(x)\Gamma(x,y)\phi(y)\right) = \Gamma^{-1}(x_1,x_2) \\
&\qquad\int \mathcal{D}\phi\mathcal{D}\bar{\phi}\ \exp\left(-\int dxdy\ \bar{\phi}(x)\Gamma(x,y)\phi(y)\right. \\
&\qquad\qquad\left.+\int dx\ \left(\bar{\phi}(x)b(x)+\phi(x)\bar{b}(x)\right)\right) = \exp\left(\int dxdy\ \bar{b}(x)\Gamma^{-1}(x,y)b(y)\right)
\end{aligned}}$$