

B. Derrida

Collège de France

Chaire de Physique Statistique 2016-2017

## Modèles stochastiques de particules en physique hors d'équilibre

Cours des 9, 16, 23, 30 Janvier et 6 et 13 Février 2017

### Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>La loi de Fourier, la loi de Fick</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>La formule de Kubo : une autre façon de mesurer la conductivité thermique ou la constante de diffusion</b>	<b>6</b>
<b>4</b>	<b>Les modèles de gaz ou de fluides</b>	<b>9</b>
4.1	Le gaz parfait . . . . .	11
4.2	Le gaz de particules en interaction . . . . .	11
<b>5</b>	<b>Les modèles de solides isolants</b>	<b>15</b>
5.1	Le flux de chaleur . . . . .	16
5.2	La chaîne harmonique ouverte . . . . .	17
5.3	Non équilibration de la chaîne harmonique . . . . .	18
5.4	Quelques exemples d'oscillateurs harmoniques couplés à des thermostats . . . . .	19
5.5	La chaîne harmonique désordonnée . . . . .	21
<b>6</b>	<b>Les chaînes anharmoniques</b>	<b>22</b>
6.1	La chaîne FPU . . . . .	22
6.2	Un exemple de système intégrable : la chaîne de Toda . . . . .	23
6.3	Les signatures de la loi de Fourier anormale . . . . .	25
<b>7</b>	<b>Les gaz sur réseau et les systèmes diffusifs</b>	<b>27</b>
<b>8</b>	<b>Les coefficients de transport</b>	<b>30</b>
8.1	Les modèles gradients . . . . .	31
8.2	Une autre façon de déterminer les coefficients de transport . . . . .	34
8.3	Principe de minimisation de la production d'entropie . . . . .	35
<b>9</b>	<b>L'hydrodynamique fluctuante</b>	<b>37</b>
9.1	Le changement d'échelle . . . . .	38
9.2	Le cas des marcheurs indépendants . . . . .	39
9.3	Les questions que l'hydrodynamique fluctuante permettent d'aborder . . . . .	41
<b>10</b>	<b>Le profil stationnaire et les corrélations</b>	<b>43</b>
<b>11</b>	<b>L'équation de Langevin dans la limite d'un faible bruit</b>	<b>47</b>

11.1	L'équation de Fokker Planck . . . . .	47
11.2	L'action . . . . .	48
11.3	Analogie avec la mécanique lagrangienne et le quasi-potentiel . . . . .	49
11.4	L'expression du quasi-potentiel . . . . .	50
11.5	L'équation de Hamilton Jacobi pour l'équation de Langevin . . . . .	54
<b>12</b>	<b>La théorie macroscopique des fluctuations [56, 82, 83, 84]</b>	<b>56</b>
12.1	Le quasi-potentiel . . . . .	57
12.2	La fonctionnelle de densité à l'équilibre . . . . .	58
12.3	L'équation de Hamilton Jacobi pour les systèmes étendus [56] . . . . .	59
12.4	Le modèle d'exclusion symétrique . . . . .	61
<b>13</b>	<b>La méthode matricielle pour l'exclusion symétrique</b>	<b>62</b>
13.1	Les poids dans l'approche matricielle . . . . .	63
13.2	Comment calculer avec la méthode matricielle . . . . .	64
13.3	Le profil stationnaire, le courant et la normalisation . . . . .	65
13.4	L'additivité pour la fonction de grandes déviations de la densité [57, 89, 90] . . . . .	65
13.5	Le quasi-potentiel . . . . .	68
<b>14</b>	<b>Le cas d'une mesure empirique pour un processus de Markov</b>	<b>70</b>
<b>15</b>	<b>La mesure empirique pour l'équation de Langevin</b>	<b>72</b>
15.1	L'équation de Fokker-Planck déformée . . . . .	73
15.2	Une borne simple pour la fonction de grande déviation $\phi_\epsilon(q_1)$ . . . . .	75
15.3	Le cas du double puits dans la limite d'un faible bruit . . . . .	76
15.4	La mesure empirique du courant sur le cercle . . . . .	78
<b>16</b>	<b>Fonction de grande déviation du courant</b>	<b>78</b>
16.1	La mesure empirique d'un profil de densité . . . . .	79
16.2	Fonction de grande déviation du courant pour les systèmes diffusifs . . . . .	80
16.3	Les transitions de phases . . . . .	82

## COURS 1

### 1 Introduction

Le but principal de la Physique Statistique est d'extraire des lois macroscopiques à partir de notre connaissance des interactions à l'échelle microscopique. Par exemple, dans le cadre d'une description classique, on se donne l'énergie des configurations d'un fluide sous la forme

$$E(\{q_i, p_i\}) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i,j} U(q_i - q_j) + \sum_i V(q_i)$$

où les  $q_i$  et  $p_i$  sont les positions et les impulsions des particules,  $U$  le potentiel d'interaction entre ces particules et  $V$  un potentiel dû aux forces extérieures comme par exemple le potentiel de confinement des particules dans une boîte et on voudrait en déduire des lois à grande échelle comme les équations hydrodynamiques qui décrivent l'évolution de champs continus comme la densité  $\rho(\vec{r})$ , le champ de vitesse  $\vec{v}(\vec{r})$ , la densité d'énergie  $e(\vec{r})$  et, à condition de pouvoir définir ces quantités dans certaines situations hors d'équilibre, (c'est à dire dans des conditions d'équilibre local) le champ de température  $T(\vec{r})$  ou le champ de pression  $p(\vec{r})$ .

modèle microscopique  $\rightarrow$  lois macroscopiques déterministes

Pour comprendre les corrélations temporelles ou spatiales, on souhaiterait même pouvoir déterminer, à partir de modèles microscopiques, les fluctuations de ces champs  $\rho(\vec{r}), v(\vec{r}), e(\vec{r}), T(\vec{r}), p(\vec{r})$  autour de leur évolution gouvernée par ces lois macroscopiques déterministes.

Hydrodynamique fluctuante = Lois déterministes + fluctuations

Essayer d'extraire des lois d'évolution macroscopiques à partir de modèles microscopiques ne se limite pas à la matière inerte et à des systèmes régis par une dynamique hamiltonienne. Par exemple on peut s'intéresser au mouvement collectif d'une foule, au trafic routier, à la matière active [9, 10] (mouvement collectifs de bactéries autopropulsées, bans de poissons, troupeaux), aux courants d'opinion, etc... et pour ces systèmes essayer de définir des variables macroscopiques et les lois d'évolution qui les régissent.

## 2 La loi de Fourier, la loi de Fick

La loi de Fourier et la loi de Fick sont sans doute les situations les plus simples pour lesquelles on peut essayer de déduire une loi macroscopique à partir d'un modèle microscopique : dans les deux cas on peut formuler ces lois pour une géométrie très simple et dans un régime stationnaire.

La loi de Fourier qui date du début du 19ème siècle (Théorie analytique de la chaleur publiée par Joseph Fourier en 1822) nous dit que le flux d'énergie  $J$  à travers un système de longueur  $L$  maintenu hors équilibre par contact avec deux thermostats à deux températures différentes  $T_a$  et  $T_b$  à ses extrémités comme sur la figure 1, est inversement proportionnel à la longueur  $L$

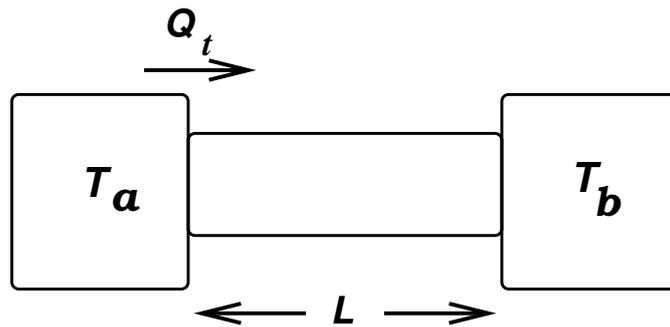


FIGURE 1: le courant de chaleur à travers un système en contact avec deux thermostats

$$J = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{Q_t}{t} \simeq \frac{F(T_a, T_b)}{L} \quad \text{pour } L \text{ grand}$$

où  $Q_t$  est l'énergie qui traverse le système pendant le temps  $t$ .

Pour de petites différences de température, l'amplitude  $F(T_a, T_b)$  s'annule linéairement, la loi de Fourier prend la forme

$$J \simeq D \frac{T_a - T_b}{L}$$

et comme le rapport  $\frac{T_a - T_b}{L}$  n'est rien d'autre que le gradient de température, la loi de Fourier peut s'écrire comme

$$\vec{J} = -\kappa \vec{\nabla} T$$

où  $\kappa$  est la conductivité thermique (à une dimension  $D = \kappa$  tandis que  $D = \kappa S$  en dimension 3 où  $S$  est la surface de la section du système)

La motivation de Fourier était de comprendre comment l'énergie conservée au centre de la terre depuis sa formation influe sur la température à sa surface [1]. Beaucoup de travaux depuis une vingtaine d'années [2, 3, 4, 5, 6] reviennent sur la loi de Fourier, en particulier pour tenter d'expliquer **la loi de Fourier anormale** observée dans des simulations numériques de nombreux modèles [2] et même dans certaines expériences en basse dimension [8] où le flux d'énergie prend la forme

$$J \simeq \frac{F(T_a, T_b)}{L^{1-\alpha}} \quad \text{avec } 0 < \alpha < 1$$

avec comme valeurs typiques de l'exposant  $\alpha$

$$\alpha \simeq \frac{1}{3} ; .4 ; \frac{1}{2} .$$

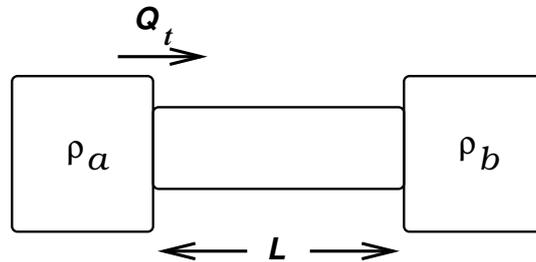


FIGURE 2: le courant de particules à travers un système en contact avec deux réservoirs

La loi de Fick qui date de 1855 et qui porte le nom d'Adolf Fick, un médecin et physiologiste allemand, est le pendant de la loi de Fourier pour le transport de matière. Pour un système de longueur  $L$  en contact à ses extrémités avec deux réservoirs de particules à des densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$  la loi de Fick prédit que le courant de particules est inversement proportionnel à sa longueur  $L$

$$J = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{Q_t}{t} \simeq \frac{F(\rho_a, \rho_b)}{L} \simeq D \frac{\rho_a - \rho_b}{L} \quad \text{pour } \rho_a - \rho_b \text{ petit}$$

qui s'écrit dans sa version milieu continu

$$\vec{J} = -D \vec{\nabla} \rho$$

où  $D$  est la constante de diffusion.

Si on complète la loi de Fick (comme la loi de Fourier) par l'équation de conservation du nombre de particules (ou celle de l'énergie dans le cas de la loi de Fourier)

$$\frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div}\vec{J} = 0$$

on aboutit à l'équation de diffusion

$$\frac{d\rho}{dt} = D \Delta\rho$$

(et à l'équation de la chaleur dans le cas de la loi de Fourier).

[ La loi de conservation  $\frac{d\rho}{dt} + \operatorname{div}\vec{J} = 0$  peut se comprendre facilement en faisant le bilan du nombre de particules à l'intérieur d'un petit volume : par exemple à une dimension si  $n(x, t)$  est le nombre de particules dans un intervalle  $(x, x + dx)$ , la variation de ce nombre pendant un intervalle de temps  $dt$  est

$$n(x, t + dt) - n(x, t) = [J(x, t) - J(x + dx, t)] dt .$$

En écrivant que  $n(x, t) = \rho(x)dx$ , on obtient facilement, à partir de là, la loi de conservation

$$\left. \frac{d\rho}{dt} = -\frac{dJ}{dx} \right] .$$

*Remarque* : en général la conductivité thermique  $\kappa$  ou la constante de diffusion  $D$  dépendent des caractéristiques du système, de sa composition, de sa température ou de sa densité. Dans un régime stationnaire comme celui de la figure 2, on a  $\frac{d\rho}{dt} = 0$ . Quand la différence de densité  $\rho_a - \rho_b$  est petite, la constante de diffusion varie peu et le profil de densité est solution de

$$\Delta\rho = 0$$

avec comme valeurs aux bords  $\rho_a$  et  $\rho_b$  ce qui conduit à un profil de densité linéaire

$$\rho(x) \simeq \frac{\rho_a(L - x) + \rho_b x}{L} .$$

Une conséquence de la loi de Fourier est donc un profil linéaire de température dans le régime stationnaire quand la différence de température  $T_a - T_b$  est petite.

Une des principales difficultés pour dériver la loi de Fourier ou la loi de Fick à partir d'une description microscopique est que (contrairement à l'équilibre où les poids statistiques des configurations sont donnés par des poids de Boltzmann  $P(\mathcal{C}) = Z^{-1} \exp -\frac{E(\mathcal{C})}{kT}$ ) on n'a pas d'expression explicite de la mesure stationnaire

$$P(\mathcal{C}) = ?$$

Une autre difficulté est que lorsqu'on écrit  $\vec{J} = -\kappa\vec{\nabla}T$ , on suppose qu'on peut définir localement une température, c'est à dire qu'on admet une forme d'équilibre local. Montrer qu'un modèle microscopique maintenu hors d'équilibre (par exemple par contact avec plusieurs thermostats) conduit à un équilibre local est en général difficile [11]. De plus l'équilibre local en soi n'est pas suffisant pour déduire la loi de Fourier ou la loi de Fick : c'est le petit écart à l'équilibre local qu'il est en général nécessaire de connaître pour prédire les propriétés de transport comme la conductivité thermique  $\kappa$  ou la constante de diffusion  $D$ .

Pour les situations proches de l'équilibre, c'est à dire lorsque la différence  $T_a - T_b$  ou  $\rho_a - \rho_b$  est petite, on peut utiliser, comme nous le verrons, une méthode variationnelle, le principe de

minimisation de la production d'entropie, pour déterminer la variation de  $P(\mathcal{C})$  due à un léger déséquilibre.

Une troisième difficulté est que même pour les modèles microscopiques les plus simples de conduction de la chaleur à travers un fluide ou un solide, il faut considérer en même temps le transport de plusieurs quantités conservées : l'énergie, l'impulsion, la densité dans les cas où ce sont les seules quantités conservées. Dans la plupart des modèles microscopiques où l'impulsion est conservée, on observe le plus souvent la loi de Fourier anormale en basse dimension ( $d = 1, 2$ ). Mais celle-ci se manifeste même dans certains modèles où l'impulsion n'est pas conservée [13, 14].

Une quatrième difficulté, d'ordre mathématique, est que les modèles partent le plus souvent d'une réalité discrète à l'échelle microscopique (atomes, particules sur un réseau, spins) et il faut trouver un moyen de passer à une description en termes de champs continus : densité  $\rho(\vec{r}), T(\vec{r}), \dots$ .

L'explication la plus ancienne de la loi de Fourier pour un gaz dilué remonte à Clausius et Maxwell [11]. Un gaz dilué peut être caractérisé par un libre parcours moyen  $\lambda$  qui représente la distance typique parcourue par un atome entre deux collisions successives. Pour un gaz de sphères dures on peut estimer  $\lambda$  par

$$\lambda \pi d^2 \rho = 1$$

où  $d$  est le diamètre des sphères et  $\rho$  est la densité de sphères. A une température  $T$  les vitesses des particules sont distribuées selon une maxwellienne

$$p(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi kT}} \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] \quad (\text{à une dimension})$$

et la vitesse  $v$  typique des particules est d'ordre

$$v \sim \sqrt{\frac{kT}{m}}.$$

Pour une géométrie comme celle de la figure 1, le flux de particules de la gauche vers la droite et de la droite vers la gauche est typiquement d'ordre

$$J_{\text{particules}} \sim \rho v \sim \rho \sqrt{\frac{kT}{m}}.$$

En supposant un équilibre local (et pour simplifier en se limitant à une dimension) les particules qui vont de la gauche vers la droite autour de la position  $x$  ont une énergie cinétique moyenne donnée par  $\frac{mv^2}{2} = \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \frac{kT(x-y)}{2} dy$  tandis que celles allant de la droite vers la gauche ont une énergie moyenne donnée par  $\frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \frac{kT(x+y)}{2} dy$ . Il en résulte un flux d'énergie

$$J_{\text{énergie}} = |J_{\text{particules}}| \left[ \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \frac{kT(x-y)}{2} dy - \frac{1}{\lambda} \int_0^\lambda \frac{kT(x+y)}{2} dy \right] \sim - \left( \rho \lambda \sqrt{\frac{kT}{m}} \frac{k}{2} \right) \frac{dT}{dx}$$

ce qui donne une loi de Fourier avec une conductivité proportionnelle à  $\sqrt{T}$

### 3 La formule de Kubo : une autre façon de mesurer la conductivité thermique ou la constante de diffusion

On a vu qu'on pouvait définir la conductivité thermique  $\kappa$  ou la constante de diffusion  $D$  pour des géométries comme celles des figures 1 ou 2 en imposant une petite différence de températures entre les deux thermostats ou une petite différence de densité entre les deux réservoirs.

$$J_{\text{énergie}} \simeq -D_{\text{énergie}} \frac{T_a - T_b}{L} \quad ; \quad J_{\text{particules}} \simeq -D_{\text{particules}} \frac{\rho_a - \rho_b}{L} .$$

Une autre façon d'obtenir les constantes de diffusion  $D$  est de se placer à l'équilibre ( $T_a = T_b$ ) et de mesurer les fluctuations de courant :

$$\frac{\langle Q_t^2 \rangle}{t} = \frac{2kT^2}{L} D_{\text{énergie}}$$

Cela résulte d'une relation de fluctuation dissipation (voir le cours de l'an dernier [15]) qui s'obtient facilement à partir du théorème de fluctuation. [ Dans la limite des temps longs on a

$$\langle e^{\lambda Q_t} \rangle \sim e^{\mu(\lambda)t}$$

où  $\mu(\lambda)$  vérifie la symétrie du théorème de fluctuation

$$\mu(\lambda) = \mu\left(-\lambda - \frac{1}{kT_b} + \frac{1}{kT_a}\right) .$$

Pour  $T_a$  proche de  $T_b$  on a

$$\mu'(0) = -\mu'\left(-\frac{1}{kT_b} + \frac{1}{kT_a}\right) \simeq -\mu'(0) + \frac{T_a - T_b}{kT^2} \mu''(0)$$

Il est alors facile de voir à partir de la définition même de  $\mu(\lambda)$  que

$$\mu'(0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_t \rangle}{t} \quad \text{et} \quad \mu''(0) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_t^2 \rangle_c}{t}$$

On en déduit que pour une petite différence de température  $T_a - T_b$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_t \rangle}{t} = \mu'(0) \simeq \frac{T_a - T_b}{2kT^2} \mu''(0) = \frac{T_a - T_b}{2kT^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_t^2 \rangle_c}{t} . \quad ]$$

Dans le cas du transport de particules entre deux réservoirs à des potentiels chimiques  $\mu_a$  et  $\mu_b$  on peut montrer de même, à partir d'une relation de fluctuation dissipation qui découle facilement du théorème de fluctuation, que

$$\mu(\lambda) = \mu\left(-\lambda + \frac{\mu_a - \mu_b}{kT}\right)$$

Pour  $\mu_a - \mu_b$  petit cela donne

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_t \rangle}{t} \simeq \frac{\mu_a - \mu_b}{2kT} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle Q_t^2 \rangle_c}{t} \simeq (\rho_a - \rho_b) \frac{1}{2kT \rho^2 \kappa(\rho)} \frac{\langle Q_t^2 \rangle_c}{t}$$

où  $\kappa(\rho)$  est la compressibilité du système à l'équilibre à la densité  $\rho$ . On en déduit pour les fluctuations du courant intégré dans le cas de particules

$$\frac{\langle Q_t^2 \rangle}{t} = \frac{2kT \rho^2 \kappa(\rho)}{L} D_{\text{particules}} .$$

[ La compressibilité d'équilibre apparaît parce qu'à l'équilibre, la dérivée du potentiel chimique  $\mu(\rho)$  est reliée à la compressibilité par

$$\frac{d\mu}{d\rho} = \frac{1}{\rho^2 \kappa(\rho)}$$

ce qui peut se comprendre facilement par exemple en supposant que pour un grand volume  $V$  et un grand nombre  $N$  de particules, l'énergie libre est extensive

$$F = V f\left(\frac{N}{V}\right)$$

où  $f(\rho)$  est l'énergie libre par unité de volume ce qui donne pour le potentiel chimique, la pression et la compressibilité

$$\mu = \frac{dF}{dN} = f'(\rho) \quad ; \quad p = -\frac{dF}{dV} = -f(\rho) + \rho f'(\rho) \quad ; \quad \kappa(\rho) = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dp} = \frac{1}{\rho^2 f''(\rho)}$$

et permet ainsi de voir que

$$\frac{d\mu}{d\rho} = \frac{1}{\rho^2 \kappa(\rho)} \quad . \quad ]$$

Comme les fluctuations de  $Q_t$  à l'équilibre permettent de déterminer les constantes de diffusion on peut même s'affranchir de la présence de thermostats comme sur la figure 3 et déterminer  $D_{\text{énergie}}$  en mesurant les fluctuations du flux de chaleur à travers une section.

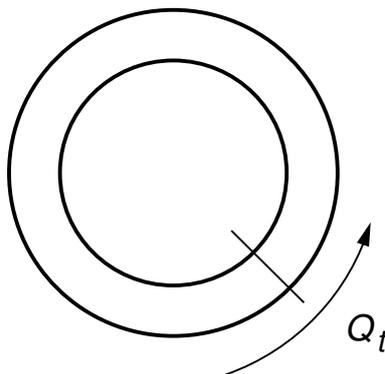


FIGURE 3: le courant de chaleur à travers la section d'un système confiné dans un anneau ou un tore avec conditions périodiques

*Remarque* : quand on veut mesurer les fluctuations du courant intégré à l'équilibre dans une géométrie comme celle de la figure 3, on a plusieurs options :

1. la première consiste à mesurer  $Q_t$  un grand nombre de fois, en choisissant chaque fois, une nouvelle condition initiale d'équilibre. Si on s'intéresse à la distribution de  $Q_t$ , et qu'au delà de la variance on souhaite mesurer des cumulants plus élevés comme  $\langle Q_t^4 \rangle_c$ , cette méthode conduit en général à des cumulants qui croissent plus vite que linéairement en temps. Par exemple on obtiendrait

$$\langle Q_t^4 \rangle_c \sim t^2 .$$

[ Cela peut se comprendre facilement dans l'exemple d'un gaz de sphères dures à une dimension. Le courant intégré à travers un point  $x$  sur le cercle est donné par

$$Q_t = \int_0^t d\tau \sum_i \frac{mv_i^3(\tau)}{2} \delta(q_i(\tau) - x)$$

où  $q_i(t)$  et  $v_i(t)$  sont les positions et vitesses des particules au temps  $t$ . On voit ainsi que si l'énergie de la condition initiale varie, la valeur de  $Q_t$  sera de la forme

$$Q_t = E^{\frac{3}{2}} \eta$$

où  $\eta$  a une distribution gaussienne de variance proportionnelle à  $t$  (à condition que la dynamique soit suffisamment chaotique pour qu'il existe dans le système un temps caractéristique  $\tau$  au delà duquel la condition initiale est oubliée et que  $t \gg \tau$ ). Il est alors facile de voir que

$$\langle Q_t^4 \rangle_c = \langle Q_t^4 \rangle - 3\langle Q_t^2 \rangle^2 \simeq \langle E^6 \rangle \langle \eta^4 \rangle - 3\langle E^3 \rangle^2 \langle \eta^2 \rangle^2 = 3 \frac{\langle E^6 \rangle - \langle E^3 \rangle^2}{\langle E^3 \rangle^2} \langle Q_t^2 \rangle^2$$

2. La seconde option consiste, à partir d'une seule condition initiale, de faire une très longue simulation et d'extraire un grand nombre de valeurs de  $Q_t$  en découpant des fenêtres de temps  $t$  le long de cette longue simulation. On évite ainsi les fluctuations de l'énergie  $E$  et si le système est suffisamment chaotique on obtient des cumulants de  $Q_t$  qui sont tous linéaires en  $t$ .

On voit donc qu'on peut mesurer les constantes de diffusion en se limitant à l'étude de systèmes à l'équilibre. Pour cette géométrie la distribution  $P(\mathcal{C})$  est connue puisqu'elle est donnée par un poids de Boltzmann. La difficulté n'en est pas moindre car pour déterminer la variance de courant intégré  $Q_t$ , il faut connaître les corrélations temporelles de courant  $J(t)$  à l'équilibre (qui sont en général difficiles à déterminer) comme cela apparaît dans la formule de Kubo :

$$\frac{\langle Q_t^2 \rangle}{t} = 2 \int_0^\infty \langle J(0)J(t) \rangle dt .$$

[ Cette relation découle de l'expression du courant intégré

$$Q_t = \int_0^t J(t') dt'$$

et du fait qu'à l'équilibre  $\langle J(t')J(t'') \rangle = \langle J(0)J(t'' - t') \rangle$  ce qui conduit à

$$\langle Q_t^2 \rangle = 2 \int_0^t (t - \tau) \langle J(0)J(\tau) \rangle d\tau$$

La formule de Kubo s'obtient alors en prenant la limite  $t \rightarrow \infty$  (à condition que les intégrales sur  $\tau$  convergent, c'est à dire que les corrélations du courant décroissent suffisamment vite à l'équilibre). ]

## 4 Les modèles de gaz ou de fluides

Pour décrire un gaz ou un fluide dans le cadre de la physique classique on se donne en général un hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \mathcal{U}(\{q_i\})$$

où l'énergie potentielle  $\mathcal{U}$  représente les interactions entre les particules ou celles avec les parois du récipient. Il est de plus nécessaire de représenter l'effet des thermostats aux extrémités du système comme sur la figure 1. Comme on l'a vu l'an dernier [15] il y a plusieurs possibilités :

1. Des thermostats déterministes comme le thermostat de Nosé Hoover où on modifie la dynamique des particules dans les régions  $A$  et  $B$  du système comme sur la figure 4. Dans le cas unidimensionnel on a alors

$$m \ddot{q}_i = - \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial q_i} - \xi_i \dot{q}_i$$

avec  $\xi_i = 0$  si  $i \in C$ , et

$$\xi_i = \frac{1}{\Theta^2} \left( \frac{m \dot{q}_i^2}{2kT_i} - 1 \right) \quad \text{avec} \quad \begin{cases} T_i = T_a & \text{si } i \in A \\ T_i = T_b & \text{si } i \in B \end{cases}$$

Ces thermostats déterministes sont en général les plus difficiles à utiliser car la mesure stationnaire est une mesure de type SRB, comme on l'a discuté l'an dernier [15], qu'on ne connaît pas le plus souvent de façon suffisamment explicite pour se prêter à des calculs.

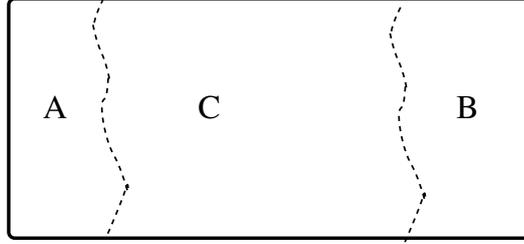


FIGURE 4: Les thermostats de Nosé et Hoover consistent à rajouter une force de frottement aux particules des régions  $A$  et  $B$  de façon à maintenir leur énergie cinétique proche de sa valeur d'équilibre à la température  $T_a$  pour les particules dans la région  $A$  et proche de de l'équilibre à la température  $T_b$  pour les particules dans la région  $B$

- Des thermostats stochastiques : par exemple chaque fois qu'une particule heurte la paroi droite ou gauche du récipient elle est réfléchiée avec une vitesse choisie selon une loi qui correspond à une distribution maxwellienne de vitesse à la température du thermostat en contact avec cette paroi. A une dimension cela donne pour la distribution des vitesses de la particule réfléchiée par la paroi gauche :

$$p(v) = \frac{mv}{kT_a} \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT_a}\right] \theta(v)$$

et

$$p(v) = -\frac{mv}{kT_b} \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT_b}\right] \theta(-v)$$

pour la paroi droite. En dimension 3, ces expressions sont remplacées par

$$\frac{m^2 v_x}{2\pi(kT_a)^2} \exp\left[-\frac{m\vec{v}^2}{2kT_a}\right] \theta(v_x) \quad \text{et} \quad -\frac{m^2 v_x}{2\pi(kT_b)^2} \exp\left[-\frac{m\vec{v}^2}{2kT_b}\right] \theta(-v_x)$$

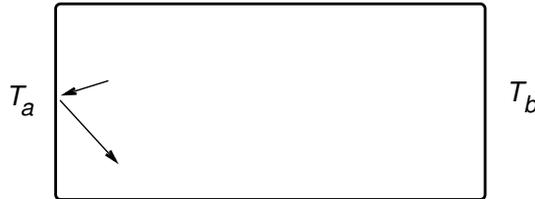


FIGURE 5: Une façon d'introduire des thermostats stochastiques : chaque fois qu'une particule heurte une paroi en contact avec un thermostat, elle est renvoyée avec une vitesse distribuée selon l'équilibre de Maxwell à la température du thermostat

*Remarque* : en fait pour des systèmes suffisamment chaotiques et susceptibles d'atteindre un équilibre local, la forme précise des distribution de vitesses avec lesquelles les particules sont renvoyées importe peu car dès qu'on s'éloigne un peu de la paroi, on devrait observer un équilibre local. Il suffit donc de maintenir d'une manière ou d'une autre le voisinage des deux parois à des énergies différentes.

## 4.1 Le gaz parfait

Le modèle le plus simple de fluide est bien sûr le gaz parfait. Mais c'est un modèle qui n'est pas du tout réaliste pour décrire le transport : les particules vont de gauche à droite et de droite à gauche sans subir d'autres collisions que celles avec les parois. Le transport est balistique et cela conduit à une conductivité thermique infinie. La distribution de vitesses est indépendante de l'espace et elle est de la forme

$$p(v) = X_a \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT_a}\right] \theta(v) + X_b \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT_b}\right] \theta(-v)$$

où les constantes  $X_a$  et  $X_b$  peuvent être déterminées facilement en écrivant que la densité de particules a une valeur donnée  $\rho$  et que le flux de particules est nul.

$$\int p(v) dv = \rho \quad ; \quad \int p(v) v dv = 0$$

Pour  $T_a \neq T_b$ , cette distribution ne dépend pas de la position et donc le profil d'énergie est plat. De plus comme  $p(v)$  n'est pas proche d'une gaussienne, il n'y a pas d'équilibre local.

A partir de la distribution  $p(v)$  on peut obtenir le courant d'énergie

$$J = \int p(v) v dv \frac{mv^2}{2} = \rho \sqrt{\frac{2}{\pi m}} k^{\frac{3}{2}} \sqrt{T_a} \sqrt{T_b} (\sqrt{T_a} - \sqrt{T_b})$$

qui exprime simplement que la seule contribution au flux d'énergie est due à l'énergie cinétique transportée par les particules. Le transport est bien balistique puisque le courant ne dépend pas de la taille du système.

On peut remarquer que cette expression coïncide avec l'expression obtenue à la fin de la section 2 si on choisit  $T_a = T(x)$  et  $T_b = T(x+\lambda) \simeq T(x) + \lambda T'(x)$  (à un facteur numérique sans importance qui tient au niveau des approximations faites dans la section 2). La raison en est évidemment que sur des distances plus petites que le libre parcours moyen  $\lambda$ , le transport est le même que pour le gaz parfait.

## 4.2 Le gaz de particules en interaction

Ce qui rend difficile la compréhension des propriétés de transport des systèmes en basse dimension est la décroissance lente des corrélations temporelles. Si on considère un gaz de particules en interaction et qu'on s'intéresse au mouvement d'une particule marquée, la théorie la plus simple consiste à écrire une équation de Langevin pour la vitesse

$$m \frac{dv}{dt} = -\gamma v + \eta(t)$$

où  $\eta(t)$  est un bruit blanc gaussien. Cela conduit à une décroissance exponentielle des corrélations

$$\langle v(0) v(t) \rangle \sim e^{-\frac{\gamma}{m} t}$$

et à une constante de diffusion finie

$$D = 2 \int_0^\infty \langle v(0) v(t) \rangle dt$$

(ce lien entre corrélations de vitesse et constante de diffusion peut se comprendre exactement de la même façon que pour la formule de Kubo [12] qui relie les fluctuations et les corrélations de courant que nous avons vue dans la section 3.)

En fait cette théorie est trop simpliste et la véritable décroissance des corrélations de vitesse d'une particule marquée est algébrique

$$\langle v(0)v(t) \rangle \sim t^{-\frac{d}{2}}$$

Cette décroissance lente fut découverte à la fin des années 60 par Alder et Wainright [16] à la suite de simulations numériques de dynamique moléculaire pour des systèmes de quelques centaines de disques durs ou de sphères dures. Elle conduit à des propriétés de transport anormales puisque la constante de diffusion devient infinie en dimension 1 et 2.

La raison de cette décroissance lente est due au fait que les changements successifs de vitesse de la particule marquée ne sont pas indépendants : il faut prendre en compte les recollisions ce qui demande une analyse plus compliquée [17]. Une explication qualitative simple [18] part du fait que, lors des collisions, l'impulsion (c'est à dire la vitesse si toutes les particules sont de même masse) est une quantité conservée. Si à l'instant  $t = 0$  la particule marquée a une fluctuation de vitesse  $v(0)$ , et si on suppose que cette fluctuation de vitesse diffuse (comme le fait en général une quantité conservée, elle va se répartir sur une région de taille  $\sqrt{t}$  au bout d'un temps  $t$ ). Si on suppose que la fluctuation  $v(0)$  se répartit à peu près uniformément sur toutes les particules de cette région de taille  $\sqrt{t}$  on aboutit à

$$v(t) \sim v(0)t^{-\frac{d}{2}}$$

ce qui conduit à la décroissance des corrélations en loi de puissance.

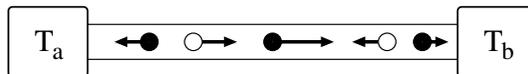


FIGURE 6: Le type de gaz de points durs avec des masses alternées utilisé dans les simulations

De nombreuses simulations numériques ont été faites pour mesurer le courant d'énergie de gaz de particules ponctuelles avec collisions élastiques à une dimension [19, 20, 21, 22] : les particules sont simplement des points durs qui, après une collision, ont leurs vitesses modifiées de façon à assurer la conservation de l'énergie et de l'impulsion :

$$v'_1 = v_2 + \frac{(m_1 - m_2)}{(m_1 + m_2)}(v_1 - v_2) \quad ; \quad v'_2 = v_1 + \frac{(m_1 - m_2)}{(m_1 + m_2)}(v_1 - v_2)$$

où  $m_1, m_2$  sont les masses des deux particules,  $v_1, v_2$  leurs vitesses avant la collision et  $v'_1, v'_2$  leurs vitesses après la collision. Quand toutes les masses sont égales, les particules échangent simplement leurs vitesses lors des collisions, les trajectoires sont les mêmes que pour un gaz parfait et le transport est balistique. Pour éviter cet inconvénient, la plupart des simulations sont faites avec une série de masses alternées comme sur la figure 6.

Le résultat, comme on peut le voir sur la figure 7, est une loi de Fourier anormale où les cumulants mesurés de  $Q_t$  donnent tous une loi de Fourier anormale

$$\frac{\langle Q^n \rangle_c}{t} \sim \frac{1}{L^{1-\alpha}} \quad \text{avec} \quad \alpha \simeq \frac{1}{3}$$

avec apparemment le

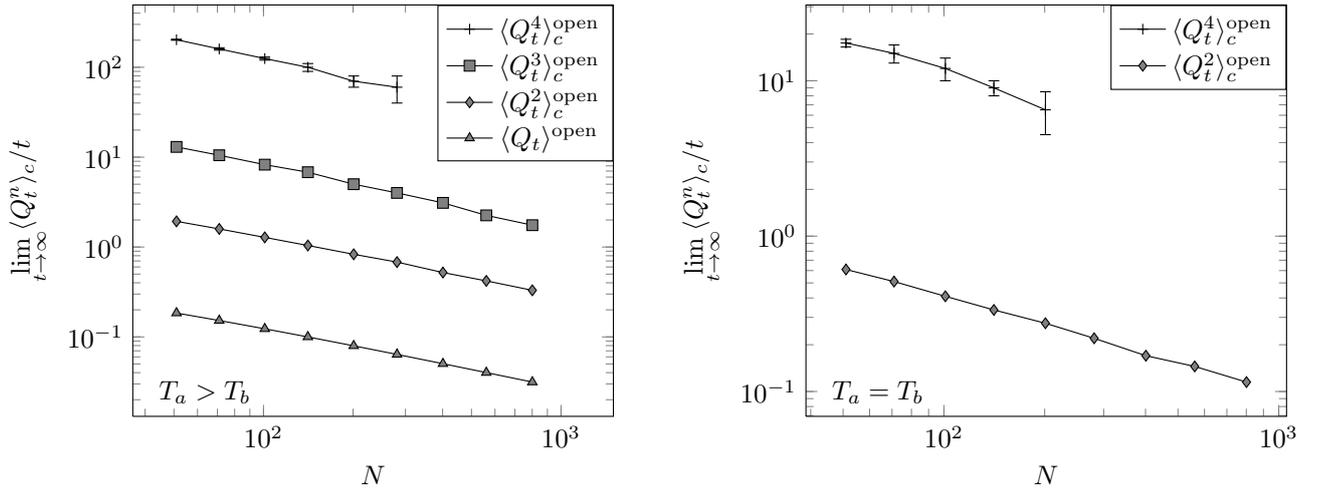


FIGURE 7: Les cumulants du courant intégré pour un gaz de  $N$  points durs avec des masses alternées sur un segment de longueur  $L = N$  comme celui de la figure 6 : à gauche un cas où  $T_a > T_b$ , à droite le cas où  $T_a = T_b$  [23]

De manière surprenante si on répète le calcul sur un cercle de longueur  $L$  comme sur la figure 3, on observe encore une fois une loi de Fourier anormale mais avec des exposants différents de ceux du système ouvert et différents d'un cumulant à l'autre :

$$\frac{\langle Q^2 \rangle_c}{t} \sim \frac{1}{\sqrt{L}} \quad ; \quad \frac{\langle Q^4 \rangle_c}{t} \sim \sqrt{L}$$

comme on peut le voir sur la figure 8.

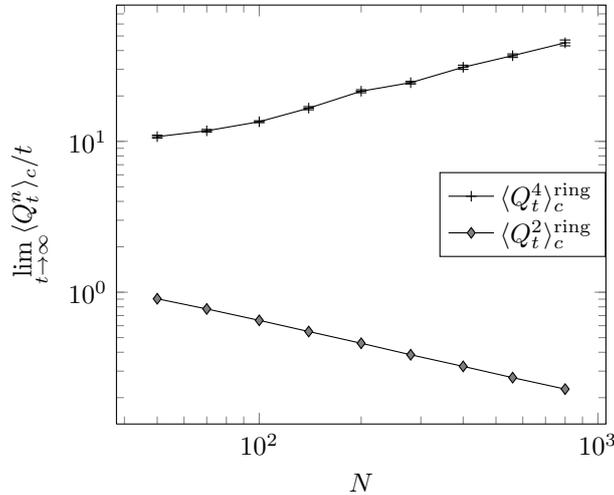


FIGURE 8: Les mêmes cumulants pour un gaz de  $N$  points durs avec des masses alternées mais cette fois-ci sur un cercle [23, 24]

A l'heure actuelle on ne dispose pas encore d'une théorie permettant d'expliquer la loi de Fourier anormale observée pour ces cumulants. Les travaux récents de Herbert Spohn [6] sur les chaînes d'oscillateurs anharmoniques sont certainement les plus prometteurs mais ne permettent pas encore de calculer des différents cumulants. Qualitativement, le transport anormal est dû aux ondes sonores

dont le temps d'amortissement diverge dans la limite des grandes longueurs d'onde. On peut utiliser cette image pour essayer d'expliquer la différence d'exposant entre l'intervalle ouvert et le cercle : sur l'intervalle ouvert, l'amortissement est plus fort à cause de l'interaction avec les thermostats.

La plupart de modèles microscopiques pour lesquels on observe une loi de Fourier anormale sont des modèles où l'impulsion est conservée. On peut cependant l'observer aussi dans des modèles où l'impulsion n'est pas conservée comme dans le modèle de Ianiro Lebowitz [13, 14] dans lequel les règles de collision sont les suivantes

$$\begin{aligned} v'_1 = v_2 & \quad ; \quad v'_2 = v_1 & \quad \text{si} \quad v_1 v_2 > 0 \\ v'_1 = -v_1 & \quad ; \quad v'_2 = -v_2 & \quad \text{si} \quad v_1 v_2 < 0 \end{aligned}$$

autrement dit lors d'une collision les particules échangent leurs vitesses quand elles vont dans le même sens et elles les renversent quand elles vont dans des directions opposées. Bien que l'impulsion ne soit pas conservée, le module de la vitesse l'est et c'est sans doute la raison pour laquelle on observe aussi pour ce modèle la loi de Fourier anormale. Une motivation pour étudier ce type de modèle artificiel est qu'il permet de résoudre exactement l'équation de Boltzmann [25]. Comme on peut le voir sur la figure 9 celle-ci se révèle être cependant une bien mauvaise approximation puisqu'elle donne un profil linéaire pour la densité d'énergie bien différent de celui qu'on observe dans les simulations.

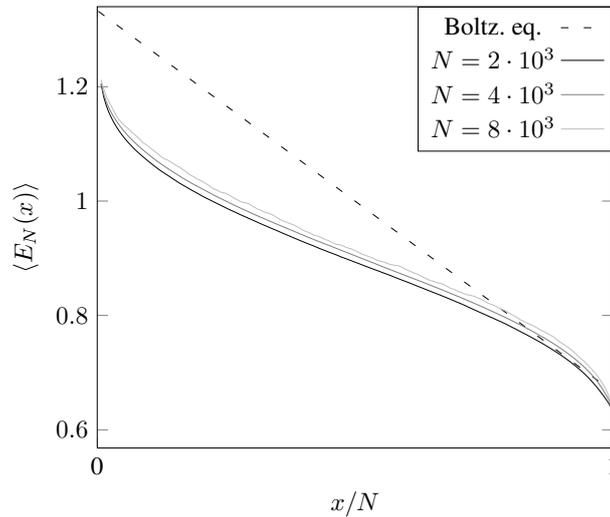


FIGURE 9: Profil de la densité d'énergie du modèle de Ianiro Lebowitz mesuré dans des simulations comparé au profil linéaire prédit par l'équation de Boltzmann [14]

# COURS 2

## 5 Les modèles de solides isolants

Le transport à travers des solides isolants de basse dimension a suscité un grand nombre de travaux au cours des vingt dernières années en particulier pour essayer d'expliquer la loi de Fourier anormale observée dans les simulations numériques [5, 4, 2]. (Pour les solides isolants, le transport d'énergie est dû aux vibrations du réseau cristallin ; une description réaliste nécessiterait de traiter aussi la présence d'impuretés qui modifient les modes de vibration du réseau ; pour les solides conducteurs il faudrait aussi prendre en compte le transport électronique).

Une façon simple de décrire un solide isolant (sans impureté) est de représenter une configuration à l'échelle microscopique par les impulsions  $p_n$  et par les écarts  $q_n$  des positions des atomes par rapport à leurs positions d'équilibre ( $q_n = 0$ ) et de se donner un potentiel d'interaction  $U(q)$  entre paires  $(n, m)$  d'atomes voisins sur le réseau qui constitue le solide

$$\mathcal{H} = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + \sum_{m \neq n} U(q_n - q_m) .$$

Les  $p_n$  et les  $q_n$  évoluent alors selon une dynamique hamiltonienne

$$\dot{q}_n = \frac{d\mathcal{H}}{dp_n} \quad ; \quad \dot{p}_n = -\frac{d\mathcal{H}}{dq_n} .$$

Il est facile de vérifier que lorsque le potentiel d'interaction  $U$  est harmonique, les modes propres de vibration sont des ondes planes qui n'interagissent pas entre elles. Par exemple pour une chaîne de  $L$  sites avec conditions périodiques et un potentiel harmonique de la forme

$$U(q) = \frac{m\Omega^2 q^2}{4}$$

les modes de vibration du solide (les phonons) sont des ondes planes (ou des combinaisons d'ondes planes) de la forme

$$q_n = Q_k \sin(kn + \omega_k t + \phi) \quad ; \quad p_n = m \omega_k Q_k \cos(kn + \omega_k t + \phi)$$

où les vecteurs d'onde prennent les valeurs  $k = 0, \frac{2\pi}{L}, \frac{4\pi}{L} \dots \frac{2\pi(L-1)}{L}$  limitées à la zone de Brillouin

$$0 \leq k < 2\pi ,$$

la fréquence  $\omega_k$  associée à un nombre d'onde  $k$  est

$$\omega_k = \Omega \sqrt{1 - \cos k}$$

et l'énergie est donnée par

$$e_k = m \frac{L Q_k^2 \omega_k^2}{2} .$$

A température finie, l'amplitude  $Q_k$  de chacun de ces modes est distribuée selon une loi gaussienne, dont la largeur est donnée par le poids de Boltzmann  $\exp\left(-\frac{e_k}{k_B T}\right)$ .

*Remarque :* nous discutons ici le transport à travers une chaîne classique : les amplitudes  $Q_k$  et les énergies  $e_k$  associées prennent toutes les valeurs possibles. (Dans la description quantique les

positions  $q_n$  et les impulsion  $p_n$  ne commutent pas et les niveaux d'énergie deviennent quantifiés : les modes de vibrations peuvent alors être vus comme des particules, les phonons, dont l'impulsion correspond au nombre d'onde  $k$ . Pour un potentiel harmonique, on peut se représenter les configurations à température finie comme un gaz parfait de phonons).

Pour un potentiel  $U$  anharmonique, lorsque l'anharmonicité est faible (ce qui est toujours une bonne approximation à suffisamment basse énergie ou température), les différents modes de Fourier interagissent faiblement et une question est de savoir si les interactions entre ces modes permettent au système de s'équilibrer. (Dans la description quantique, l'anharmonicité induit des interactions entre les phonons, avec des règles de collisions un peu plus subtiles que dans le cas d'un gaz de particules : le nombre de phonons peut ne pas être conservé lors de "la collision" entre phonons et la somme des impulsions  $k$  n'est conservée qu'à un vecteur du réseau réciproque près (processus Umklapp)).

Comme nous allons le voir brièvement, la question du transport de chaleur dans les chaînes anharmoniques classiques touche un grand nombre de domaines :

- La théorie des systèmes dynamiques : une question essentielle qui fut soulevée dès le milieu des années 50 par les expériences numériques de Fermi Pasta Ulam [26, 27] est de savoir si l'anharmonicité rend la dynamique suffisamment chaotique pour permettre au système d'atteindre l'équilibre.
- La théorie des systèmes intégrables : comme nous le verrons, pour certains choix du potentiel d'interaction comme dans le cas de la chaîne de Toda [39], la dynamique devient intégrable et donc le système ne s'équilibre pas.
- Les systèmes désordonnés si on veut prendre en compte la présence d'impuretés ou de défauts dans le solide.
- La théorie des équations stochastiques car le plus souvent on représente l'effet des thermostats par des forces de Langevin.
- L'équation KPZ (Kardar Parisi Zhang 1986) qui apparait dans la description des chaînes anharmoniques par une théorie hydrodynamique non linéaire avec fluctuations [6, 28, 29].

## 5.1 Le flux de chaleur

Pour une chaîne dont l'énergie est donnée par

$$\mathcal{H} = \sum_{n=1}^L \frac{p_n^2}{2m} + \sum_{n=1}^{L-1} U(q_{n+1} - q_n)$$

les équations de la dynamique hamiltonienne sont pour  $2 \leq n \leq L-1$

$$\dot{p}_n = m\ddot{q}_n = F(q_n - q_{n-1}) - F(q_{n+1} - q_n) + (-\gamma \dot{q}_1 + \eta_a(t)) \delta_{n,1} + (-\gamma \dot{q}_L + \eta_b(t)) \delta_{n,L}$$

et pour  $n=1$  et  $n=L$

$$\dot{p}_1 = m\ddot{q}_1 = -F(q_2 - q_1) - \gamma \dot{q}_1 + \eta_a(t)$$

$$\dot{p}_L = m\ddot{q}_L = F(q_L - q_{L-1}) - \gamma \dot{q}_L + \eta_b(t)$$

où  $F(q) = -U'(q)$  et  $\eta_a$  et  $\eta_b$  sont des bruits blancs gaussiens

$$\langle \eta_a(t) \rangle = \langle \eta_b(t) \rangle = 0 \quad ; \quad \langle \eta_a(t) \eta_a(t') \rangle = 2\gamma k T_a \quad ; \quad \langle \eta_b(t) \eta_b(t') \rangle = 2\gamma k T_b$$

et  $T_a$  et  $T_b$  les températures des deux thermostats qui agissent aux deux extrémités de la chaîne. Pour obtenir le courant de chaleur instantané, on peut considérer la partie de l'énergie  $E_{n_0}$  à droite du  $n_0$ -ième atome

$$E_{n_0} = \sum_{n \geq n_0} \frac{p_n^2}{2m} + U(q_{n+1} - q_n)$$

qui, une fois dérivée par rapport au temps, donne des sommes télescopiques (ici pour simplifier on considère une chaîne infinie sans thermostat), qui se réduisent à un seul terme

$$\begin{aligned} \frac{dE_{n_0}}{dt} &= \sum_{n \geq n_0} \frac{p_n}{m} \dot{p}_n + \sum_{n \geq n_0} (\dot{q}_n - \dot{q}_{n+1}) F(q_{n+1} - q_n) \\ &= \sum_{n \geq n_0} \dot{q}_n (F(q_n - q_{n-1}) - F(q_{n+1} - q_n)) + \sum_{n \geq n_0} (\dot{q}_n - \dot{q}_{n+1}) F(q_{n+1} - q_n) \\ &= \dot{q}_{n_0} F(q_{n_0} - q_{n_0-1}) \end{aligned}$$

Ce résultat ne dit rien d'autre que la variation de l'énergie  $E_{n_0}$  est due au travail de la force  $F(q_0 - q_{n_0+1})$  (la seule force agissant sur la partie droite du système) sur la particule  $n_0$ . (pour une chaîne finie en présence de thermostats il y aurait un terme supplémentaire dû au travail de la force de Langevin exercée par le thermostat de droite).

On en déduit que le courant de chaleur dans le régime stationnaire est

$$J = \langle \dot{q}_{n_0} F(q_{n_0} - q_{n_0-1}) \rangle$$

où la moyenne est à effectuer avec la mesure stationnaire. La difficulté est qu'on ne dispose pas d'une expression de cette mesure stationnaire

$$P(\mathcal{C}) = ?$$

pour en déduire à partir de cette expression le courant de chaleur  $J$ .

## 5.2 La chaîne harmonique ouverte

Le calcul du courant de chaleur par Rieder, Lebowitz et Lieb [30] le long d'une chaîne harmonique remonte à une cinquantaine d'années [30]. Pour

$$U(q) = \frac{m\Omega^2}{4} q^2$$

les équations du mouvement sont de la forme

$$\begin{aligned} \dot{q}_n &= \frac{p_n}{m} \\ \dot{p}_n &= \frac{m\Omega^2}{2} (q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) + \delta_{n,1} (-\gamma \dot{q}_1 + \eta_a(t)) + \delta_{n,L} (-\gamma \dot{q}_L + \eta_b(t)) \end{aligned}$$

Si on introduit le vecteur  $\vec{W}(t)$  à  $2L$  composantes qui contient toutes les impulsions  $p_n$  et tous les déplacements  $q_b$  et le vecteur  $\vec{\text{Bruit}}(t)$  qui contient les bruits  $\eta_a$  et  $\eta_b$

$$\vec{W}(t) = \begin{pmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_L \\ q_1 \\ \vdots \\ q_L \end{pmatrix} ; \quad \vec{\text{Bruit}}(t) = \begin{pmatrix} \eta_a(t) \\ \vdots \\ \eta_b(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

la dynamique peut s'écrire sous forme matricielle

$$\frac{d\vec{W}(t)}{dt} = -M \vec{W}(t) + \overrightarrow{\text{Bruit}}(t) .$$

La solution en est

$$\vec{W}(t) = e^{-tM} \vec{W}(0) + \int_0^t e^{-(t-t')M} \overrightarrow{\text{Bruit}}(t') dt' .$$

En l'absence de bruit (ce qui correspond à avoir  $T_a = T_b = 0$ ) le système se vide de son énergie et ce qui revient à dire que  $e^{-tM} \rightarrow 0$  dans la limite  $t \rightarrow \infty$ .

Dans le régime stationnaire l'état du système s'écrit donc

$$\vec{W}(t) = \int_0^\infty e^{-\tau M} \overrightarrow{\text{Bruit}}(t - \tau) d\tau .$$

On voit donc que les  $p_n$  et  $q_n$  sont des fonctions linéaires du bruit. Ce sont donc des variables gaussiennes et leur distribution de la forme

$$\text{Prob}(\{q_n, p_n\}) \sim \exp \left[ - \sum_{n,m} A_{n,m} q_n q_m + B_{n,m} q_n p_m + C_{n,m} p_n p_m \right]$$

est entièrement déterminée par les matrices de covariances  $A_{n,m}, B_{n,m}, C_{n,m}$ . Le calcul de ces covariances est faisable (mais fastidieux puisqu'il faut exprimer la dépendance linéaire des  $q_n$  et des  $p_n$  ce qui peut se faire par exemple en diagonalisant la matrice  $M$ ) [31, 32]. Il permet de montrer que

1. Le transport est balistique, c'est à dire que le courant d'énergie est indépendant de  $L$  (pour  $L$  grand). Par exemple pour  $\gamma \ll \Omega$  Lepri, Livi et Politi obtiennent [31]

$$J \simeq \frac{\gamma}{2} k (T_a - T_b) .$$

2. Le profil de température (c'est à dire d'énergie cinétique moyenne) est plat, en dehors de la proximité immédiate des extrémités comme on peut le voir sur la figure 10.

Le comportement est donc très semblable à celui du gaz parfait. On peut ainsi dire que le transport balistique est dû aux phonons qui transportent l'énergie à travers le système sans interagir entre eux comme le font les particules du gaz parfait qui traversent l'échantillon sans être diffusés.

### 5.3 Non équilibration de la chaîne harmonique

Comme pour le gaz parfait la dynamique hamiltonienne de la chaîne harmonique ne permet pas d'atteindre l'équilibre. Cela peut se voir facilement dans le cas d'une chaîne avec conditions périodiques comme sur la figure 11.

Si on part d'une condition initiale où toute l'énergie est concentrée sur un mode propre, l'énergie reste alors indéfiniment concentrée sur ce mode propre,

$$q_n = Q_k(t) \sin(kn + \omega_k t + \phi) \quad ; \quad p_n = P_k(t) \cos(kn + \omega_k t + \phi)$$

où  $k = \frac{2\pi}{L} \times$  un entier. On vérifie en effet facilement que la dynamique des deux amplitudes  $Q_k$  et  $P_k$  est celle d'un oscillateur harmonique

$$\dot{Q}_k = \frac{P_k}{m} \quad ; \quad \dot{P}_k = -m \omega_k^2 Q_k$$

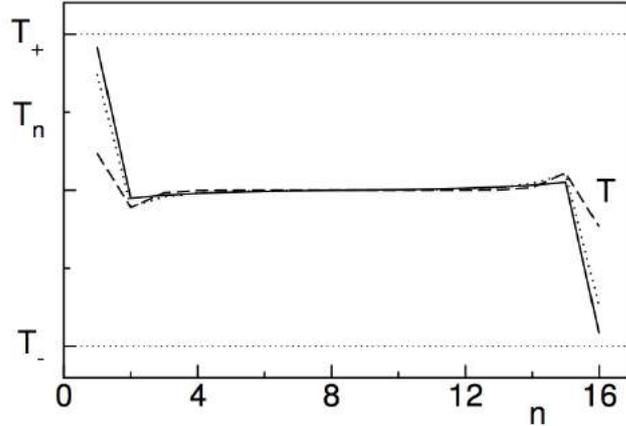


FIGURE 10: le profil de température d'une chaîne harmonique [31]

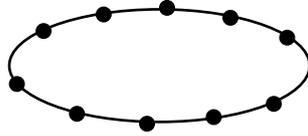


FIGURE 11: une chaîne d'oscillateurs avec conditions périodiques

dont la fréquence  $\omega_k$  est, comme on l'a vu plus haut,  $\omega_k = \Omega\sqrt{1 - \cos k}$ .

La dynamique de la chaîne harmonique se résume donc à la dynamique des  $L$  oscillateurs harmoniques que constituent ces modes propres. C'est le cas le plus simple d'un système intégrable : Contrairement à une dynamique suffisamment chaotique qui équilibrerait le système avec pour seules quantités conservées l'énergie et l'impulsion totales, la chaîne harmonique conserve l'énergie  $e_k(t)$

$$e_k = \frac{L}{2} \left( \frac{P_k^2}{2m} + m\omega_k^2 Q_k^2/2 \right)$$

de chaque mode : Il y a donc  $L$  quantités conservées.

#### 5.4 Quelques exemples d'oscillateurs harmoniques couplés à des thermostats

Dans un article de 2003, Eckmann et Zabey [33] donnent quelques exemples d'oscillateurs couplés à des thermostats dont les propriétés sont un peu surprenantes. (Tous les exemples qu'ils donnent sont faciles à analyser puisque, comme on l'a vu, la dynamique est linéaire).

Dans le premier exemple que l'on voit sur la figure 12, seules les masses 1 et 2 sont reliées à des thermostats. La dynamique des masses 3 et 4 est donnée simplement par

$$m\ddot{q}_3 = \frac{m\Omega^2}{2}(q_1 + q_2 - 2q_3) \quad ; \quad \ddot{q}_4 = \frac{m\Omega^2}{2}(q_1 + q_2 - 2q_4)$$

et on voit bien que la différence  $q_3 - q_4$  est un oscillateur harmonique autonome dont l'amplitude et la phase ne peuvent pas s'équilibrer sous l'action des thermostats.

Dans l'exemple de la figure 13, il y a 6 masses et deux types de ressorts. De manière surprenante, on observe dans la partie inférieure une flux stationnaire d'énergie de la source froide à la

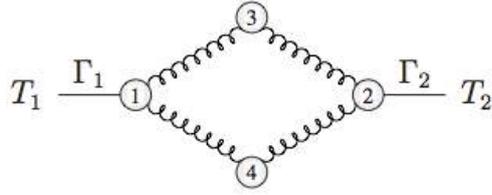


FIGURE 12: Un système de 4 masses reliées par des ressorts [33] : malgré le couplage des masses 1 et 2 à des thermostats, la mesure stationnaire n'est pas unique et le système ne s'équilibre pas

température  $T_4$  vers une source plus chaude à la température  $T_3$  bien que le flux d'énergie entre la partie supérieure et la partie inférieure est nul. Ce phénomène est simplement dû aux corrélations des fluctuations : cela montre en particulier que dans le régime stationnaire de la figure 13 il n'y a pas d'équilibre local (et qu'il est faux de penser que les masses 5 et 6 sont à la même température).

Evidemment si on déconnectait les parties inférieures et supérieures en supprimant le ressort qui relie les masses 5 et 6, le flux d'énergie dans la branche inférieure serait inversé comme le prévoit le second principe.

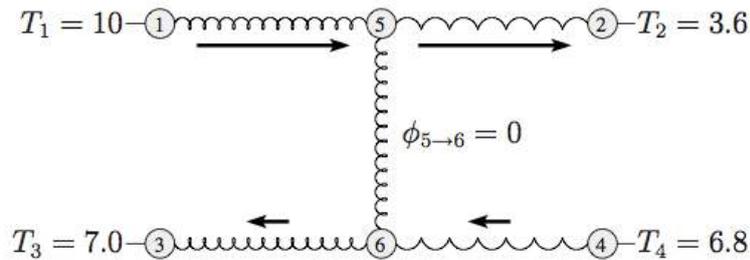


FIGURE 13: Un système de 6 masses couplées par des ressorts. Dans cet exemple il y a 2 types de ressorts de raideur différente. En ajustant correctement les raideurs des ressorts, on observe un flux d'énergie du froid vers le chaud du thermostat  $T_4$  vers le thermostat  $T_3$  bien qu'en moyenne le flux d'énergie est nul entre la partie supérieure et la partie inférieure du schéma [33].

*Remarque* : on voit dans cet exemple qu'on ne peut pas supprimer des éléments à travers lesquels le flux d'énergie est nul sans modifier tous les autres courants.

Pour des raisons analogues, il a été montré par Bonetto, Lebowitz et Lukkarinen [34], qu'une chaîne harmonique couplée à deux thermostats à des températures  $T_a$  et  $T_b$  à ses extrémités donne une loi de Fourier normale lorsqu'on relie chaque particule  $n$  à un thermostat dont la température  $T_n$  est choisie de manière auto consistante pour que le courant d'énergie entre le système et chacun de ces thermostats supplémentaires soit nul en moyenne. Comme pour l'exemple de la figure 13 des liens supplémentaires traversés par des courants d'énergie de moyenne nulle changent complètement les autres courants et aboutissent à une loi de Fourier normale (en présence de ces thermostats) au lieu du transport balistique de la chaîne harmonique (en l'absence de ces thermostats auto consistants) [34].

## 5.5 La chaîne harmonique désordonnée

Une façon de modéliser l'effet des impuretés est de considérer le cas où les masses  $m_n$  des particules le long de la chaîne ne sont plus toutes identiques mais sont aléatoires (ce serait par exemple le cas si le solide était constitué de deux types d'isotopes). Les équations du mouvement deviennent alors :

$$m_n \ddot{q}_n = \frac{\Omega^2}{2} (q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) + \delta_{n,1} (-\gamma \dot{q}_1 + \eta_a(t)) + \delta_{n,L} (-\gamma \dot{q}_L + \eta_b(t))$$

Pour un échantillon donné, c'est à dire pour une séquence donnée des masses  $m_n$ , le problème est encore une fois linéaire. Cela rend possible de tout calculer numériquement pour des chaînes pas trop longues (de quelques centaines de particules), en manipulant la matrice  $M$  et ses vecteurs propres. La figure 14 donne le profil de température d'une telle chaîne désordonnée [31, 35].

Une différence importante par rapport au cas sans désordre est qu'il n'est plus possible d'obtenir l'expression analytique des modes propres de la chaîne. On peut cependant montrer que les modes propres sont des ondes localisées, c'est à dire que chaque mode propre est essentiellement concentré sur une petite région d'espace et donc sur un petit nombre de particules (contrairement au cas où toutes les masses sont égales et où les modes propres sont des ondes planes ou des arches de sinus qui sont délocalisées, c'est à dire réparties de manière pratiquement uniforme sur tous les atomes). A cause cette localisation des modes, la plupart des modes excités par un thermostat sont ceux qui sont localisés près de l'extrémité reliée à ce thermostat et ne permettent pas de transférer d'énergie à l'autre extrémité.

Cependant on peut montrer que la longueur de localisation (la taille des régions sur lesquelles les modes sont localisés) augmente quand la fréquence du mode diminue si bien que les modes de très basse fréquence ont une longueur de localisation comparable à la taille du système. C'est par ces modes de basse fréquence que le transfert d'énergie s'effectue et cela donne un courant qui dépend de la longueur du système en loi de puissance [31]

$$J \sim \frac{1}{\sqrt{L}} \quad \text{ou} \quad J \sim \frac{1}{L^{\frac{3}{2}}}$$

selon les conditions que l'on impose aux bords ( $q_0 = q_1$  et  $q_L = q_{L+1}$  : bords libres ou  $q_0 = q_{L+1} = 0$  : bords fixes).

Pour trouver les modes propres  $q_n$  et les fréquences propres  $\omega$ , il faut résoudre l'équation aux valeurs propres

$$-m_n \omega^2 q_n = \frac{\omega^2}{2} (q_{n+1} + q_{n-1} - 2q_n)$$

Ce problème est très voisin de celui d'une équation de Schrödinger avec un potentiel aléatoire  $V_n$ ,

$$(E - V_n) \psi_n = -\psi_{n+1} - \psi_{n-1} + 2\psi_n$$

qui modélise la fonction d'onde d'un électron quantique en présence d'impuretés. Anderson a montré en 1958 que, même quand le potentiel aléatoire  $V_n$  est très faible, toutes les ondes sont localisées [36] : c'est la localisation d'Anderson. Le calcul des propriétés de localisation des modes propres de la chaîne harmonique est donc identique à celui des états propres d'une équation de Schrödinger avec un potentiel aléatoire.

On sait que, quand l'amplitude du désordre diminue, la longueur de localisation augmente et qu'elle diverge dans la limite d'un désordre nul comme l'inverse de la variance des  $V_n$ . On voit bien que ce qui joue le rôle du potentiel  $V_n$  dans le cas de la chaîne harmonique est le produit  $m_n \omega^2$ ,

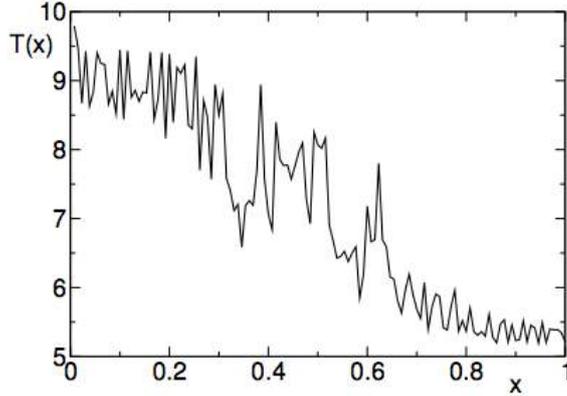


FIGURE 14: Le profil de températures d’une chaîne harmonique désordonnée : les masses  $m_n$  ne sont plus toutes identiques, mais tirées au hasard [31]

ce qui montre que les modes les moins localisés sont les modes de basse fréquence  $\omega$ . Lorsque la longueur de localisation de ces modes devient comparable à la taille  $L$  du système ces modes contribuent au courant d’énergie entre les deux thermostats aux extrémités du système.

## 6 Les chaînes anharmoniques

La théorie devient beaucoup plus difficile lorsque le potentiel  $U(q)$  n’est pas harmonique.

### 6.1 La chaîne FPU

Dans les années 50, avec l’accès aux premiers ordinateurs, les résultats d’une expérience numérique (programmée par Mary Tsingou) d’une chaîne anharmonique de 32 sites publiés par Fermi Pasta Ulam [26] avec un potentiel

$$U_{\text{FPU}}(q) = \frac{k_2}{2}q^2 + \frac{k_3}{3}q^3 + \frac{k_4}{4}q^4$$

ont montré que la présence de l’anharmonicité ne rendait pas la dynamique suffisamment chaotique pour permettre au système d’atteindre l’équilibre thermodynamique.

Contrairement à ce qu’on pouvait croire l’anharmonicité ne suffisait apparemment pas à équilibrer le système comme on peut le voir sur la figure 15.

Plusieurs explications [27, 38] ont été avancées pour justifier ces observations :

1. D’abord on sait, d’après le théorème de Kolmogorov, Arnold, Moser (Théorème KAM) [37] qui date des années 60, que pour presque toute condition initiale, une perturbation suffisamment petite d’un système intégrable n’est pas ergodique. Et donc pour une chaîne finie, si l’anharmonicité est suffisamment petite, la chaîne FPU ne doit pas s’équilibrer puisque c’est une perturbation de la chaîne harmonique qui est intégrable. Cependant on s’attend à ce que quand le nombre de particules augmente, le théorème KAM s’applique à des anharmonicités de plus en plus petites et le domaine de validité du théorème KAM n’est sans doute pas suffisant pour expliquer les résultats de la chaîne FPU.

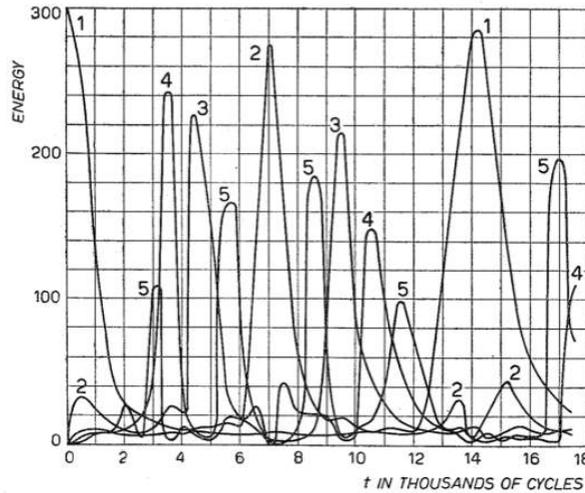


FIGURE 15: Une des courbes du rapport de Fermi Pasta Ulam qui montre que l'énergie concentrée au départ sur le mode 1 ne parvient pas à se répartir équitablement entre tous les autres modes comme ce serait le cas si la chaîne s'équilibrait [26]. Au cours du temps le mode 1 n'échange visiblement son énergie qu'avec quelques modes 2,3,4,5

2. Une autre explication est simplement que le temps d'équilibration devient de plus en plus grand lorsque l'énergie diminue, puisque les déplacements  $q_n$  et les  $p_n$  sont de plus en plus petits et le système est de plus en plus proche de la chaîne harmonique.
3. Dans le même ordre d'idées, les longs temps d'équilibration pourraient être dus à la proximité entre la chaîne FPU et la chaîne de Toda qui est un système intégrable.

## 6.2 Un exemple de système intégrable : la chaîne de Toda

La chaîne de Toda [39, 40, 41, 42] est un des exemples les plus connus d'une chaîne anharmonique intégrable, ce qui signifie qu'elle possède un nombre de quantités conservées égal au nombre  $N$  de particules. Son énergie a comme pour toutes autres chaînes d'oscillateurs la forme (pour simplifier on prend des masses  $m = 1$ )

$$\mathcal{H} = \sum_n \frac{p_n^2}{2} + \sum_n U(q_{n+1} - q_n) .$$

La seule différence est que le potentiel est donné, dans le cas de la chaîne de Toda, par

$$U(q) = e^{-q} - 1 + q .$$

Une façon simple d'identifier les quantités conservées par la dynamique est d'utiliser les paires de Lax.

**Paire de Lax :** (Peter Lax un mathématicien américain) :

Supposons qu'on considère 2 matrices  $L(t)$  et  $P(t)$  qui dépendent d'un paramètre  $t$  (dans ce qui suit  $t$  sera le temps) telles que

$$\frac{dL}{dt} = [L, P] = LP - PL .$$

On dit alors que ces deux matrices constituent une paire de Lax.

On peut alors montrer que toutes les valeurs propres de la matrice  $L(t)$  sont indépendantes de  $t$  : ce sont donc des quantités conservées.

En effet si  $\lambda(t)$  est une valeur propre de  $L(t)$  et si on appelle  $u(t)$  et  $v(t)$  les vecteurs propres à droite et à gauche associés à cette valeur propre on a par définition

$$L(t) u(t) = \lambda(t) u(t) \quad \text{et} \quad v(t) L(t) = \lambda(t) v(t)$$

En dérivant l'égalité  $\lambda(t) v(t) u(t) = v(t) L(t) u(t)$  par rapport au temps on obtient

$$\begin{aligned} \dot{\lambda} v u + \lambda \dot{v} u + \lambda v \dot{u} &= \dot{v} L u + v \dot{L} u + v L \dot{u} \\ &= \dot{v} L u + v L P u - v P L u + v L \dot{u} \end{aligned}$$

ce qui peut se simplifier en donnant  $\dot{\lambda} v u = 0$  et donc  $\dot{\lambda} = 0$ .

Une autre façon de le voir est simplement de noter que toutes les traces des puissances de la matrice  $L$

$$\text{tr}(L^k) = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^k$$

sont indépendantes du temps : en effet

$$\frac{d}{dt} \text{tr}(L^k) = k \text{tr}(L^{k-1} [L, P]) = 0 .$$

### La chaîne de Toda :

Les équations du mouvement sont

$$\begin{aligned} \dot{p}_n &= -e^{-(q_{n+1}-q_n)} + e^{-(q_n-q_{n-1})} \\ \dot{q}_n &= p_n . \end{aligned}$$

Si on définit

$$a_n = e^{-(q_{n+1}-q_n)} \quad ; \quad b_n = -p_n$$

et les matrices

$$L(t) = \begin{pmatrix} b_1 & 1 & & a_N \\ a_1 & b_2 & \ddots & 0 \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ 1 & & a_{N-1} & b \end{pmatrix} \quad ; \quad P(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & & a_N \\ a_1 & & \ddots & 0 \\ & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & a_{N-1} & 0 \end{pmatrix}$$

on peut vérifier à partir des équations du mouvement que

$$\dot{L} = [L, P]$$

et qu'ainsi les matrices  $L$  et  $P$  forment bien une paire de Lax. Toutes les valeurs propres de  $L(t)$  ou toutes les fonctions de ces valeurs propres (comme les traces de  $L^k$ ) sont donc des quantités conservées par la dynamique.

Comme pour la chaîne anharmonique, dès qu'on perturbe la chaîne de Toda (suffisamment à cause du théorème KAM), on pense que la dynamique devient suffisamment chaotique pour que le système s'équilibre. Par exemple pour une séquence de masses alternées avec le potentiel de Toda, on perd l'intégrabilité et le transport balistique de la chaîne de Toda est remplacé par une loi de Fourier anormale [43].

### 6.3 Les signatures de la loi de Fourier anormale

Dans un article récent [2], Lepri, Livi et Politi énumèrent les différents comportements caractéristiques observés dans les simulations de chaînes anharmoniques qui ne sont pas intégrables [5, 4, 7].

1. une conductivité thermique anormale

Comme on l'a vu, un courant d'énergie qui décroît en loi de puissance avec la taille du système

$$J \sim L^{\alpha-1} \quad \text{avec} \quad .3 \lesssim \alpha \lesssim .5$$

2. un profil de température qui reste non linéaire même lorsque la différence  $T_a - T_b$  est petite avec une forme du type de la figure 9.
3. des corrélations de courant (pour une chaîne infinie à l'équilibre) qui décroissent en loi de puissance

$$\langle J(0)J(t) \rangle \sim \frac{1}{t^{1-\delta}}$$

et qui font que la conductivité donnée par la formule de Kubo est infinie.

4. un temps caractéristique  $\tau_k$  d'amortissement d'une perturbation de nombre d'onde  $k$  dans la chaîne infinie qui diverge comme

$$\tau_k \sim |k|^z \quad \text{avec} \quad z < 2$$

Ce qui ressemble à la façon dont les fluctuations s'amortissent pour une équation de diffusion fractionnaire comme

$$\frac{d\rho}{dt} = (\Delta)^{\frac{z}{2}} \rho .$$

Les modèles de gaz en interaction ou d'oscillateurs anharmoniques avec une dynamique hamiltonienne entre oscillateurs et des couplages avec les thermostats modélisés par des forces stochastiques sont trop difficiles pour qu'on sache actuellement dériver ces propriétés sans faire d'approximation : en particulier pour un modèle donné il est difficile de prédire si la dynamique est suffisamment chaotique pour que le système puisse s'équilibrer.

Face à ces difficultés, toute une série de modèles ont été proposés qui donnent des comportements qui ressemblent beaucoup à ceux des chaînes anharmoniques que nous venons de discuter. L'ingrédient commun à ces modèles est d'ajouter un élément stochastique à la dynamique interne du système.

- le modèle HCME (Harmonic chain with moment exchange) [44, 45, 46, 47, 48]

Dans ce modèle, le système est une chaîne harmonique, à laquelle on rajoute un élément stochastique : pendant chaque intervalle de temps infinitésimal  $dt$ , chaque paire de particules voisines a une probabilité  $\lambda dt$  d'échanger leurs impulsions :  $(p_n, p_{n+1}) \rightarrow (p_{n+1}, p_n)$ . Cette perturbation stochastique, qui garde l'impulsion comme une quantité conservée, a pour effet de transformer le transport balistique de la chaîne harmonique en une loi de Fourier anormale. Elle conduit sur la chaîne infinie à une équation de diffusion fractionnaire et à des profils de température non-linéaires comme ceux observés dans les simulations de chaînes anharmoniques.

Un grand avantage de ce modèle HCME est que la dynamique de la chaîne harmonique, comme la perturbation stochastique sont des évolutions linéaires qui permettent de faire des calculs explicites.

— Les marcheurs de Lévy [49, 50, 51]

Un autre type de modèle qui permet d'observer la loi de Fourier anormale, les profils non linéaires et la diffusion fractionnaire est le modèle des marcheurs de Lévy : dans ce modèle on considère que l'énergie est transportée par des marcheurs indépendants : chaque marcheur a une vitesse constante  $v$  ou  $-v$  et change le signe de sa vitesse au bout de temps  $\tau$  aléatoires distribués selon une distribution qui décroît lentement (en loi de puissance)

$$\rho(\tau) \sim \tau^{-1-\beta} \quad \text{avec} \quad 1 < \beta < 2 .$$

Chaque marcheur porte un même quantum d'énergie et le courant d'énergie comme les profils de température se déterminent en calculant les courants de particules et les profils de densité.

— L'hydrodynamique non-linéaire fluctuante [6, 52, 53] Cette approche repose sur une description macroscopique des courants des quantités conservées (l'énergie, la densité, l'impulsion) auxquelles sont ajoutées des forces de Langevin conservatives censées représenter le caractère chaotique de la dynamique. L'accord de cette théorie avec les simulations faites sur la chaîne FPU en font actuellement l'approche la plus précise dans la compréhension de la loi de Fourier anormale.

## COURS 3

Pour pratiquement tous les modèles de gaz en interaction et de chaînes d'oscillateurs couplés dans lesquels on observe une loi de Fourier anormale de nombreuses questions restent encore largement ouvertes :

1. on n'a pas de description de la mesure stationnaire  $P(\mathcal{C})$  permettant de calculer le courant d'énergie moyen, le profil de température, les corrélations des fluctuations de densité ou de température dans les régimes stationnaires hors d'équilibre.
2. en particulier on ne sait pas calculer les fonctions de grandes déviations de courant ou de densité.
3. on ne dispose pas encore d'une théorie permettant d'utiliser une hydrodynamique fluctuante pour toutes ces questions directement au niveau macroscopique.

### 7 Les gaz sur réseau et les systèmes diffusifs

Pour les modèles de gaz sur réseau que nous allons discuter maintenant, on sait répondre à la plupart de ces questions ou au moins on dispose d'une théorie, la théorie des fluctuations macroscopiques [56, 57], qui donne un moyen de poser les équations qui permettent d'y répondre. Une caractéristique importante de ces modèles diffusifs est qu'il ne possèdent pas d'impulsion et que la dynamique interne comme les échanges avec les réservoirs de particules sont stochastiques. Le plus souvent il n'y a qu'une seule quantité conservée, la densité dans les modèles de gaz sur réseau (mais ce n'est pas essentiel et on peut considérer aussi des modèles où plusieurs quantités sont conservées, comme par exemple des gaz composés de plusieurs types de particules [58, 59]). Dans les modèles de gaz sur réseau les particules occupent les sites d'un réseau comme sur la

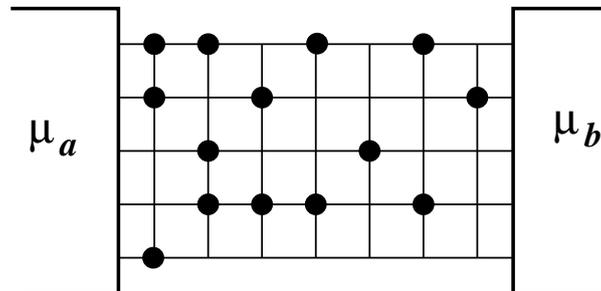


FIGURE 16: Un modèle de gaz sur réseau : les particules occupent les sites d'un réseau (ici un réseau carré) et sautent d'un site à l'autre. Les déplacements internes satisfont la condition de bilan détaillé. Par contre les échanges avec les deux réservoirs aux extrémités, qui permettent de maintenir des densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$  de particules à proximité de ces deux réservoirs, ne satisfont pas la condition de bilan détaillé quand  $\rho_a \neq \rho_b$ .

figure 16. La dynamique de l'ensemble formé par le système et les réservoirs est markovienne : les particules sautent d'un site à l'autre du réseau avec des taux de transition qui satisfont la condition de bilan détaillé pour les mouvements internes mais les échanges de particules avec les réservoirs ne satisfont pas cette condition (ces échanges avec les réservoirs vérifient une condition de bilan détaillé généralisé [15]). Le réservoir de gauche maintient une densité proche d'une densité  $\rho_a$  sur les sites qui lui sont reliés, de même le réservoir de droite maintient une densité  $\rho_b$  sur les sites qui

lui sont connectés. Ainsi la dynamique de Markov conduit à un régime stationnaire hors d'équilibre quand les potentiels chimiques  $\mu_a$  et  $\mu_b$  sont différents, c'est à dire quand  $\rho_a \neq \rho_b$ .

Comme la dynamique interne ne crée et ne détruit aucune particule, le nombre de particules et donc la densité sont des quantités conservées.

Nous verrons que l'on aboutit pour ce type de modèle à une loi de Fick normale, avec en particulier un courant stationnaire de particules de la forme

$$J = D(\rho) \frac{\rho_a - \rho_b}{L}$$

pour  $L$  grand et  $\rho_a - \rho_b$  petit.

Bien sûr en l'absence de réservoir (si on interdit les échanges de particules avec les réservoirs) ou si les potentiels chimiques  $\mu_a$  et  $\mu_b$  des deux réservoirs sont égaux, le courant  $J$  s'annule, la dynamique markovienne (mouvements internes + échanges avec les réservoirs) satisfait la condition de bilan détaillé et le système atteint un équilibre avec les poids des configurations donnés par les poids de Boltzmann.

*Remarque :* dans les modèles de gaz sur réseau, on pense en termes de particules qui sautent d'un site à l'autre et on s'intéresse au transport de particules et à la loi de Fick. Si on préfère penser que les particules représentent des excitations d'énergie qui se déplacent sur le réseau, ces modèles peuvent s'interpréter comme des modèles de transport d'énergie qui vérifient la loi de Fourier.

Voici quelques modèles parmi les plus simples de gaz sur réseau ou de systèmes diffusifs

#### 1. *Les marcheurs indépendants*

On peut représenter une configuration du système par le nombre de particules  $n_i(t)$  présentes sur chaque site  $i$  au temps  $t$ . Pendant chaque intervalle de temps infinitésimal  $dt$ , chaque particule saute avec une probabilité  $dt$  vers chacun des sites voisins, indépendamment des positions des autres particules.

Pour  $1 \leq i \leq L - 1$  l'évolution du nombre  $n_i(t)$  de particules au site  $i$  est alors donnée par

$$n_i(t + dt) = \begin{cases} n_i(t) + 1 & \text{avec probabilité} & (n_{i-1}(t) + n_{i+1}(t)) dt \\ n_i(t) - 1 & \text{avec probabilité} & 2 n_i(t) dt \\ n_i(t) & \text{avec probabilité} & 1 - (n_{i-1}(t) + 2 n_i(t) + n_{i+1}(t)) dt \end{cases}$$

et pour  $i = 1$  et  $i = L$ , avec une évolution qui dépend des paramètres  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  qui représentent l'effet des deux réservoirs de particules

$$n_1(t + dt) = \begin{cases} n_1(t) + 1 & \text{avec probabilité} & (\alpha + n_2(t)) dt \\ n_1(t) - 1 & \text{avec probabilité} & (\gamma + 1) n_1(t) dt \\ n_1(t) & \text{avec probabilité} & 1 - (\alpha + (1 + \gamma) n_1(t) + n_2(t)) dt \end{cases}$$

$$n_L(t + dt) = \begin{cases} n_L(t) + 1 & \text{avec probabilité} & (\delta + n_{L-1}(t)) dt \\ n_L(t) - 1 & \text{avec probabilité} & (\beta + 1) n_L(t) dt \\ n_L(t) & \text{avec probabilité} & 1 - (\delta + (1 + \beta) n_L(t) + n_{L-1}(t)) dt \end{cases}$$

(les évolutions des  $n_i(t)$  sont corrélées puisque chaque fois qu'une particule saute d'un site  $i$  vers un site  $j$ , on a simultanément  $n_i \rightarrow n_i - 1$  et  $n_j \rightarrow n_j + 1$ .)

Ce modèle de marcheurs indépendants, c'est à dire sans interaction, est un des plus simples modèles de transport. Il a l'avantage que la mesure stationnaire peut s'écrire explicitement

$$P(\{n_1, \dots, n_i\}) = \prod_{i=1}^L \frac{a_i^{n_i}}{n_i!} e^{-a_i}$$

où les  $a_i = \langle n_i \rangle$  sont solution de

$$\alpha - (1 + \gamma)a_1 + a_2 = 0 \quad ; \quad a_{i-1} - 2a_i + a_{i+1} = 0 \quad ; \quad a_{L-1} - (1 + \beta)a_L + \delta = 0$$

Il est facile de se convaincre que la situation d'équilibre correspond au cas où tous les  $a_i$  sont identiques (profil plat de densité  $\rho$ ), et qu'alors  $\rho = \frac{\alpha}{\gamma} = \frac{\delta}{\beta}$ . Pour d'autres choix des paramètres  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  les densités associées à chacun des réservoirs sont

$$\rho_a = \frac{\alpha}{\gamma} \quad ; \quad \rho_b = \frac{\delta}{\beta} .$$

Ce modèle de marcheurs indépendants est, avec les modèles "zero range process" [54], un des rares modèles pour lesquels la mesure stationnaire est une mesure produit. Cela implique l'absence de corrélations entre les sites. Nous verrons plus tard que cette absence de corrélation est non-générique et qu'en général on observe des corrélations (faibles mais) à longue portée dans les régimes stationnaires hors d'équilibre.

2. *Le modèle d'exclusion symétrique (symmetric simple exclusion process SSEP)*

Dans le modèle d'exclusion symétrique, chaque site du réseau est occupé par au plus une seule particule. A part cette contrainte, la dynamique est la même que pour les marcheurs indépendants.

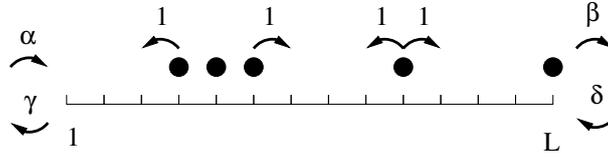


FIGURE 17: Le modèle d'exclusion symétrique : les particules sont des marcheurs indépendants qui respectent la contrainte d'exclusion. Celle ci impose que chaque site soit occupé par au plus une seule particule. Les paramètres  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  représentent la dynamique d'échange de particules avec les réservoirs comme sur la figure

Comme pour les marcheurs indépendants on peut exprimer les densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$  à proximité des réservoirs en termes des paramètres  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$

$$\rho_a = \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} \quad ; \quad \rho_b = \frac{\delta}{\beta + \delta} .$$

Pour des choix arbitraires des paramètres  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  la mesure stationnaire n'est pas une mesure produit. Elle est cependant connue. Nous verrons dans la section 13 comment la décrire [60, 61] et nous montrerons qu'elle possède des corrélations à longue portée.

Dans le cas particulier où les densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$  sont égales  $\rho_a, \rho_b = \rho$ , la mesure stationnaire se réduit à une mesure de Bernoulli :

$$P(\{n_1, \dots, n_i\}) = \prod_{i=1}^L (1 - \rho + (2\rho - 1)n_i)$$

### 3. Le modèle KMP

Très voisin des modèles de gaz sur réseau, on peut considérer des cas où la variable  $e_i(t)$  sur chaque site  $i$  du réseau est une variable continue qui représente l'énergie se trouvant sur ce site et introduire des règles dynamiques qui vont échanger ces énergies  $e_i(t)$  entre les sites du réseau et avec des thermostats. Un des exemples les plus simples est le modèle KMP introduit par Kipnis Marchioro et Presutti [55] où la dynamique interne consiste à actualiser (avec une probabilité  $dt$  pendant chaque intervalle de temps  $dt \ll 1$ ) chaque paire de sites voisins  $i, j$  en additionnant les énergies de ces deux sites et en répartissant la somme entre eux de manière uniforme :

$$\{e_i, e_j\} \quad \rightarrow \quad \{e'_i = (1 - z)(e_i + e_j), \quad e'_j = z(e_i + e_j)\}$$

où  $z$  est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1 (ce nombre  $z$  est renouvelé à chaque réactualisation des énergies d'une paire de sites voisins). Dans ce modèle l'énergie est bien sûr une quantité conservée par la dynamique interne.

*Remarque :* Les modèles de gaz sur réseau ont une longue histoire en physique statistique à commencer par le modèle d'Ising qui est un des modèles les plus simples et les plus étudiés de fluide : dans le modèle d'Ising comme pour le modèle d'exclusion, chaque site est soit vide soit occupé par une seule particule mais, en plus, il y a une énergie attractive  $-J$  pour chaque paire de sites voisins occupés sur le réseau

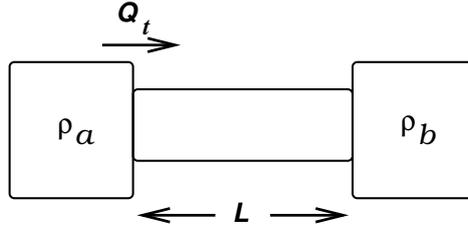
$$E(\mathcal{C}) = -J \sum_{iVj} n_i n_j .$$

Cette énergie caricature l'interaction entre les particules d'un fluide en remplaçant le vrai potentiel d'interaction par cette énergie attractive entre particules voisines sur le réseau. L'étude des propriétés d'équilibre du modèle d'Ising a été central dans la compréhension des transitions de phase à l'équilibre, d'autant plus qu'il possède exactement les mêmes comportements critiques, à la transition liquide-gaz, que les fluides réels. On peut bien sûr s'intéresser au régime stationnaire du modèle d'Ising en contact avec plusieurs thermostats (comme sur la figure 16) en choisissant une dynamique interne qui satisfait la condition de bilan détaillé associée à cette énergie et des échanges avec les réservoirs qui ne la satisfont pas. Les approches analytiques sont un peu plus compliquées mais on pense, qu'au moins en dehors de la température de transition de phase du modèle d'Ising, les propriétés à grande échelle ressemblent qualitativement à celles du modèle d'exclusion.

D'autres modèles de gaz sur réseau, les modèles à dynamique contrainte, ont aussi beaucoup attiré l'attention au cours des dernières années pour modéliser les verres [62]. Dans ces modèles, les sauts des particules d'un site à l'autre ne sont possibles que si un nombre suffisant de sites dans leur environnement proche sont vides, un peu comme les atomes d'un verre qui ne peuvent se déplacer que lors de fluctuations de leur environnement qui leur laissent suffisamment de place pour le faire.

## 8 Les coefficients de transport

Pour les systèmes diffusifs comme les gaz sur réseau, nous allons voir que la plupart des propriétés à grande échelle peuvent s'exprimer en fonctions de deux coefficients de transport  $D(\rho)$  et  $\sigma(\rho)$  définis comme dans la section 3. Pour une géométrie comme celle de la figure 2 ces coefficients de transport peuvent être définis par le courant moyen  $J$  de particules et la variance du courant, dans



un état stationnaire proche de l'équilibre

$$J = \frac{\langle Q \rangle}{t} = \tilde{D}_L(\rho_a, \rho_b) = \frac{D(\rho)}{L} (\rho_a - \rho_b) \quad \text{pour } \rho_a - \rho_b \text{ petit}$$

$$\frac{\langle Q^2 \rangle}{t} = \tilde{\sigma}_L(\rho_a, \rho_b) = \frac{\sigma(\rho)}{L} \quad \text{pour } \rho_a = \rho_b = \rho$$

Comme nous l'avons vu dans la section 3, les deux coefficients de transport  $D(\rho), \sigma(\rho)$  ne sont pas indépendants : ils sont liés par une relation qui fait intervenir les propriétés d'équilibre du système et qu'on peut écrire de plusieurs façons équivalentes

$$\begin{aligned} D(\rho) &= \frac{1}{\rho^2 \kappa(\rho)} \frac{\sigma(\rho)}{2kT} \\ &= f''(\rho) \frac{\sigma(\rho)}{2kT} \\ &= \frac{d\mu(\rho)}{d\rho} \frac{\sigma(\rho)}{2kT} \end{aligned}$$

où  $\kappa(\rho), f(\rho)$  et  $\mu(\rho)$  sont la compressibilité, l'énergie libre par unité de volume et le potentiel chimique (voir la section 3).

A cause de cette relation entre  $D(\rho)$  et  $\sigma(\rho)$ , si on connaît l'énergie libre  $f(\rho)$  d'équilibre, on peut se contenter de déterminer un seul de ces deux coefficients de transport.

## 8.1 Les modèles gradients

Pour une classe de modèles qu'on appelle les modèles gradients, il est facile de déterminer le coefficient de diffusion  $D(\rho)$ . Dans ces modèles on peut écrire le courant local entre deux sites voisins comme la différence de deux termes translétés l'un de l'autre. C'est le cas pour les marcheurs indépendants, le modèle d'exclusion symétrique et plusieurs autres modèles :

### 1. les marcheurs indépendants

Si on fait le bilan du nombre moyen de particules qui traversent le lien  $i, i+1$  pendant l'intervalle de temps  $dt$ , on obtient que le courant moyen  $\langle J_{i,i+1} \rangle$  entre le site  $i$  et le site  $i+1$  est donné par

$$\langle J_{i,i+1} \rangle = \langle n_i \rangle - \langle n_{i+1} \rangle$$

où  $n_i$  est le nombre de marcheurs sur le site  $i$ . Cette relation est vraie à tout temps : on peut l'utiliser en particulier dans le régime stationnaire. On voit que le courant est bien la différence entre deux termes translétés d'un de l'autre. En sommant sur tous les liens cela conduit à

$$\sum_{i=1}^{L-1} \langle J_{i,i+1} \rangle = \langle n_1 \rangle - \langle n_L \rangle$$

A cause de la conservation du nombre de particules on a à tout temps

$$\frac{d\langle n_i(t) \rangle}{dt} = \langle J_{i-1,i} \rangle - \langle J_{i,i+1} \rangle$$

et comme dans le régime stationnaire le profil de densité  $\langle n_i(t) \rangle$  ne dépend pas du temps, le courant  $J$  est le même partout

$$\langle J_{i,i+1} \rangle = J .$$

On voit donc que

$$\sum_{i=1}^{L-1} \langle J_{i,i+1} \rangle = (L-1)J = \langle n_1 \rangle - \langle n_L \rangle$$

ce qui donne la loi de Fourier. Comme la densité est proche de  $\rho_a$  sur le site 1 et proche de  $\rho_b$  sur le site  $L$  on en déduit que pour  $L$  grand

$$J \simeq \frac{\rho_a - \rho_b}{L}$$

et donc que  $D(\rho) = 1$ .

Pour obtenir  $\sigma(\rho)$ , il suffit de connaître l'énergie libre  $f(\rho)$  : pour un système de  $N$  marcheurs indépendants sur un réseau de  $L$  sites (on peut prendre les conditions aux bords que l'on veut puisque l'énergie libre est extensive), la fonction de partition est donnée par

$$Z(L, N) = \frac{L^N}{N!} .$$

L'énergie libre  $f(\rho)$  par unité de volume

$$f(\rho) = -kT \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \log Z(L, L\rho) = kT\rho (\log \rho - 1)$$

(on peut vérifier que la pression  $p = kT(\rho f'(\rho) - f(\rho)) = kT\rho$  est bien celle d'un gaz parfait) et donc comme  $f''(\rho) = \frac{kT}{\rho}$  on a

$$D(\rho) = 1 \quad ; \quad \sigma(\rho) = 2\rho .$$

## 2. l'exclusion symétrique

Dans l'exclusion symétrique, il y a au plus une particule par site ( $n_i(t) = 0$  ou  $1$ ) et le courant est donné par

$$\langle J_{i,i+1} \rangle = \langle n_i(1 - n_{i+1}) \rangle - \langle n_{i+1}(1 - n_i) \rangle = \langle n_i \rangle - \langle n_{i+1} \rangle .$$

Cette fois encore le courant est la différence de deux termes translétés et on aboutit comme pour les marcheurs indépendants à

$$(L-1)J = \langle n_1 \rangle - \langle n_L \rangle \quad \text{et donc} \quad J \simeq \frac{\rho_a - \rho_b}{L}$$

ce qui donne à nouveau  $D(\rho) = 1$ .

Pour le modèle d'exclusion la fonction de partition est

$$Z(L, V) = \frac{L!}{N!(L-N)!} \quad \text{ce qui donne} \quad f(\rho) = kT \left( \rho \log \rho + (1-\rho) \log(1-\rho) \right)$$

On en déduit que

$$D(\rho) = 1 \quad ; \quad \sigma(\rho) = 2\rho(1-\rho)$$

### 3. Le modèle d'exclusion avec répulsion entre sites voisins

Dans ce modèle une particule ne peut sauter du site  $i$  vers le site  $i + 1$  que si les sites  $i + 1$  et le site  $i + 2$  sont vides (de même les sauts de  $i$  vers  $i - 1$  ne sont autorisés que si les sites  $i - 1$  et  $i - 2$  sont vides). Comme pour le modèle d'exclusion il y a au plus une seule particule par site. On peut écrire pour le courant local

$$\langle J_{i,i+1} \rangle = \langle n_i(1 - n_{i+1})(1 - n_{i+2}) \rangle - \langle n_{i+1}(1 - n_i)(1 - n_{i-1}) \rangle$$

Cette expression peut se simplifier car pour cette dynamique on toujours  $\langle n_i n_{i+1} \rangle = 0$  et  $\langle n_i n_{i+1} n_{i+2} \rangle = 0$  puisqu'il est impossible que deux sites voisins soient occupés dans le régime stationnaire. Cela permet de simplifier l'expression du courant

$$\langle J_{i,i+1} \rangle = \langle n_i \rangle + \langle n_{i-1} n_{i+1} \rangle - \langle n_{i+1} \rangle - \langle n_i n_{i+2} \rangle$$

qui est bien encore une fois la différence entre deux termes translatés l'un de l'autre.

On en déduit que

$$J \simeq \frac{\langle n_2 \rangle + \langle n_1 n_3 \rangle - \langle n_{L-1} \rangle - \langle n_{L-2} n_L \rangle}{L}$$

Pour ce modèle la fonction de partition et la fonction de corrélation d'équilibre (sur un cercle de  $L$  sites) sont

$$Z = \frac{L(L - N - 1)!}{(L - 2N)! N!} \quad ; \quad \langle n_i n_{i+2} \rangle = \frac{N(N - 1)}{L(L - N - 1)}$$

ce qui donne, à l'équilibre dans la limite thermodynamique,

$$\langle n_i n_{i+2} \rangle = \frac{\rho^2}{1 - \rho} .$$

On en déduit que

$$J \simeq \frac{1}{L} \left( \rho_a + \frac{\rho_a^2}{1 - \rho_a} - \rho_b + \frac{\rho_b^2}{1 - \rho_b} \right)$$

et comme l'énergie libre est

$$f(\rho) = kT \left( \rho \log \rho + (1 - 2\rho) \log(1 - 2\rho) - (1 - \rho) \log(1 - \rho) \right)$$

on obtient

$$D(\rho) = \frac{1}{(1 - \rho)^2} \quad ; \quad \sigma(\rho) = \frac{2\rho(1 - 2\rho)}{1 - \rho} .$$

### 4. Des exemples non-gradients

On peut facilement construire des exemples de modèles non gradients [63, 64]. L'un des plus simples est une généralisation du modèle d'exclusion où chaque site du réseau ne peut accueillir qu'au plus un nombre  $k$  de particules. A part cette contrainte la dynamique est la même que celle des marcheurs indépendants. Le modèle d'exclusion symétrique et celui des marcheurs indépendants apparaissent donc comme des cas particuliers  $k = 1$  et  $k = \infty$ . Pour les autres valeurs de  $k$ , le courant s'écrit

$$J_{i,i+1} = n_i \theta(k - n_{i+1}) - n_{i+1} \theta(k - n_i)$$

(où  $\theta(x) = 1$  pour  $x > 0$  et  $\theta(x) = 0$  pour  $x \leq 0$ ) qui n'est pas la différence de deux termes translatés comme on peut le voir en réécrivant le courant dans le cas particulier  $k = 2$  comme

$$J_{i,i+1} = n_i - n_{i+1} - \frac{n_i n_{i+1}^2}{2} + \frac{n_i^2 n_{i+1}}{2} .$$

Dans ces cas non-gradients, on n'a pas en général de moyen d'obtenir d'expression analytique des coefficients de transport  $D(\rho), \sigma(\rho)$ . Il existe cependant une méthode variationnelle [65, 66, 67] qui repose sur le principe de minimisation de la création d'entropie et qui permet de déterminer ces coefficients de manière approximative (voir section 8.3).

## 8.2 Une autre façon de déterminer les coefficients de transport

On peut également déterminer les coefficients de transport en rajoutant un petit champ  $E$  et en déterminant le courant induit par ce champ. L'effet d'un tel champ est de modifier les probabilités de saut des particules comme sur la figure 18

$$p_E = p_0 e^{\frac{Ed}{2kT}} \quad ; \quad q_E = q_0 e^{-\frac{Ed}{2kT}}$$

où  $p_0$  et  $q_0$  sont les probabilités de saut en l'absence de champ,  $d$  est le déplacement lors du saut et  $E$  l'intensité du champ.

D'après le théorème de fluctuation on sait que, pour un système de taille  $L$  (par exemple des particules sur un cercle avec conditions périodiques), si  $Q$  est le flux de particules pendant un temps  $t$  à travers un lien, on a

$$\langle e^{\lambda Q} \rangle \sim e^{\mu(\lambda)t} \quad \text{avec} \quad \mu(\lambda) = \mu \left( -\lambda - \frac{EL}{kT} \right) .$$

Cela permet de montrer comme on l'a fait dans la section 3 que le courant en présence d'un petit champ  $E$  est relié aux fluctuations de courant en l'absence de champ par

$$J = \frac{EL}{2kT} \frac{\langle Q^2 \rangle}{t} = \frac{E}{2kT} \sigma(\rho) .$$

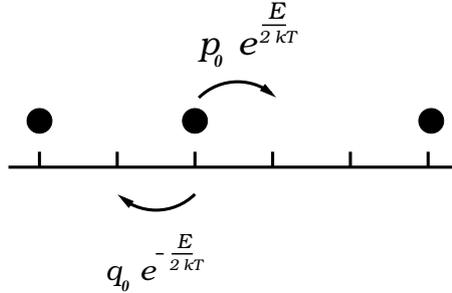


FIGURE 18: L'effet du champ  $E$  est de modifier les probabilités de saut

Dans l'exemple de l'exclusion symétrique le courant devient alors

$$\begin{aligned} \langle J_{i,i+1} \rangle &= \langle n_i(1 - n_{i+1}) \rangle e^{\frac{E}{2kT}} - \langle n_{i+1}(1 - n_i) \rangle e^{-\frac{E}{2kT}} \\ &= \langle n_i \rangle e^{\frac{E}{2kT}} - \langle n_{i+1} \rangle e^{-\frac{E}{2kT}} - \langle n_i n_{i+1} \rangle \left( e^{\frac{E}{2kT}} - e^{-\frac{E}{2kT}} \right) \end{aligned}$$

Pour  $E$  petit, en utilisant qu'à l'équilibre  $\langle n_i \rangle = \rho$  et  $\langle n_i n_{i+1} \rangle = \rho^2$ , on obtient

$$J = \rho(1 - \rho) \frac{E}{kT}$$

et on retrouve bien ainsi le coefficient de transport  $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$  du modèle d'exclusion.

### 8.3 Principe de minimisation de la production d'entropie

Dans le cas de systèmes non-gradients, pour obtenir les coefficients de transport, il faut savoir comment la mesure stationnaire est perturbée par un petit gradient de température ou par un petit champ.

On peut montrer que la mesure stationnaire peut s'obtenir, quand la perturbation est petite, par un principe variationnel qui exprime que cette mesure minimise la production d'entropie.

Considérons un système dont l'évolution, en temps continu, est donnée par une matrice de Markov  $M$ . La probabilité  $P_t(\mathcal{C})$  de trouver le système dans une configuration  $\mathcal{C}$  au temps  $t$  évolue selon :

$$\frac{dP_t(\mathcal{C})}{dt} = \sum_{\mathcal{C}'} [M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_t(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_t(\mathcal{C})] .$$

Comme on l'a vu l'an dernier, le taux de production d'entropie totale (entropie du système + entropie des réservoirs) lors de cette évolution est donné par

$$\begin{aligned} \frac{dS_{\text{total}}}{dt} &= k \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_t(\mathcal{C}) \log \left( \frac{M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_t(\mathcal{C})}{M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_t(\mathcal{C}')} \right) \\ &= \frac{k}{2} \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} [M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_t(\mathcal{C}) - M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_t(\mathcal{C}')] \log \left( \frac{M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_t(\mathcal{C})}{M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_t(\mathcal{C}')} \right) . \end{aligned}$$

[ en effet l'évolution de l'entropie du système et des bains thermiques est

$$\frac{dS_{\text{système}}}{dt} = -k \frac{d}{dt} \sum_{\mathcal{C}} P_t(\mathcal{C}) \log P_t(\mathcal{C}) = -k \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} [M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_t(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_t(\mathcal{C})] \log P_t(\mathcal{C})$$

et celle des bains thermiques est donnée par

$$\frac{dS_{\text{bains thermiques}}}{dt} = k \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} [M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')P_t(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C})P_t(\mathcal{C})] \log \frac{M(\mathcal{C}', \mathcal{C})}{M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')}$$

puisque comme on l'a vu dans le cours 2015-2016 [15], en thermodynamique stochastique, chaque saut  $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'$  est accompagné d'une variation d'entropie des bains thermiques de  $k \log \frac{M(\mathcal{C}', \mathcal{C})}{M(\mathcal{C}, \mathcal{C}')}$ . Il suffit alors d'ajouter ces deux contributions pour obtenir la production totale d'entropie. ]

On se place proche de l'équilibre, c'est à dire pour une matrice de Markov de la forme

$$M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) = M_0(\mathcal{C}', \mathcal{C})(1 + \epsilon M_1(\mathcal{C}', \mathcal{C}))$$

avec  $\epsilon$  petit. La matrice  $M_0$  correspond à une dynamique d'équilibre et vérifie donc une condition de bilan détaillé

$$M_0(\mathcal{C}', \mathcal{C}) Q_0(\mathcal{C}) = M_0(\mathcal{C}, \mathcal{C}') Q_0(\mathcal{C}')$$

par rapport à une mesure d'équilibre  $Q_0(\mathcal{C})$ . La production d'entropie à l'ordre dominant en  $\epsilon$  pour une mesure  $P(\mathcal{C})$  proche de la mesure d'équilibre  $Q_0(\mathcal{C})$

$$P(\mathcal{C}) = Q_0(\mathcal{C})(1 + \epsilon Q_1(\mathcal{C}))$$

est donnée par

$$\frac{dS_{\text{total}}}{dt} = \frac{k}{2} \epsilon^2 \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} M_0(\mathcal{C}', \mathcal{C}) Q_0(\mathcal{C}) (M_1(\mathcal{C}', \mathcal{C}) - M_1(\mathcal{C}, \mathcal{C}') + Q_1(\mathcal{C}) - Q_1(\mathcal{C}'))^2 .$$

Les  $Q_1(\mathcal{C})$  qui minimisent cette production d'entropie sont solution de

$$\sum_{\mathcal{C}'} M_0(\mathcal{C}, \mathcal{C}') Q_0(\mathcal{C}') (M_1(\mathcal{C}, \mathcal{C}') + Q_1(\mathcal{C}') - M_1(\mathcal{C}', \mathcal{C}) - Q_1(\mathcal{C})) = 0 .$$

Ces équations sont précisément les mêmes que celles qu'on obtiendrait en demandant que la mesure  $P(\mathcal{C})$  soit la mesure stationnaire de la matrice de Markov, c'est à dire vérifie à l'ordre  $\epsilon$  les conditions de stationnarité

$$\sum_{\mathcal{C}'} M(\mathcal{C}, \mathcal{C}') P(\mathcal{C}') - M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) P(\mathcal{C}) = 0 .$$

Près de l'équilibre la mesure stationnaire est donc celle qui minimise la production d'entropie.

Dans le cas d'un système en contact avec deux thermostats à des températures voisines, comme le courant d'énergie dans le régime stationnaire et la production d'entropie sont donnés par

$$J \simeq D (T_a - T_b) \quad ; \quad \frac{dS_{\text{total}}}{dt} = J \left( \frac{1}{T_b} - \frac{1}{T_a} \right) \sim \frac{D (T_a - T_b)^2}{T} .$$

De même pour un faible champ  $E$  on a

$$J \simeq \frac{\sigma E}{kT} \quad ; \quad \frac{dS_{\text{total}}}{dt} = \frac{J E}{T} = \frac{\sigma E^2}{k T^2}$$

(ces deux relations résultent simplement du fait que dans un régime stationnaire, l'entropie du système ne change pas : la production d'entropie est donc facile à déterminer en faisant le bilan du nombre de particules échangées par les réservoirs).

On voit donc que de trouver les  $Q_1(\mathcal{C})$  qui minimisent  $\frac{dS_{\text{total}}}{dt}$  permet de déterminer les coefficients de transport  $D$  et  $\sigma$ .

Lorsque les équations pour déterminer les  $Q_1(\mathcal{C})$  sont trop difficiles à résoudre, on peut calculer les coefficients de transport de manière approchée par une méthode variationnelle : on se donne une famille de  $Q_1(\mathcal{C})$  pour laquelle les calculs sont tractables, et dans cette famille on choisit les  $Q_1(\mathcal{C})$  qui minimisent la création d'entropie [66, 67].

# COURS 4

## 9 L'hydrodynamique fluctuante

On a vu que pour un système de grande taille  $L$  en contact avec 2 réservoirs de particules à des densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$  le courant moyen et la variance du courant sont donnés (pour  $\rho_a - \rho_b$  petit) par

$$J = \frac{\langle Q_t \rangle}{t} = \frac{D(\rho)}{L} (\rho_a - \rho_b) = -D(\rho) \rho'$$

$$\frac{\langle Q_t^2 \rangle - \langle Q_t \rangle^2}{t} = \frac{\langle Q^2 \rangle_c}{t} = \frac{\sigma(\rho)}{L}$$

L'idée de l'hydrodynamique fluctuante consiste à écrire le courant à travers un point  $X$  (avec  $0 < X < L$ ) sous la forme

$$J(X, t) \simeq -D(\rho(X, t)) \frac{d\rho(X, t)}{dX} + \eta(X, t)$$

où  $\rho(X, t)$  est la densité de particules au point  $X$  et où  $\eta(X, t)$  est un bruit blanc gaussien qui vérifie

$$\langle \eta(X, t) \eta(X', t') \rangle = \sigma(\rho(X, t)) \delta(X - X') \delta(t - t')$$

*Remarque :* Evidemment le vrai courant instantané  $J(X, t)$  et la vraie densité ont une forme et une évolution plus compliquées :

$$\rho(X, t) = \sum_n \delta(X - X_n(t)) \quad ; \quad J(X, t) = \sum_k \delta(t - t_k) - \delta(t - t'_k)$$

où les  $X_n(t)$  sont les positions des particules au temps  $t$ , les  $t_k$  sont les temps où une particule passe par la position  $X$  de la gauche vers la droite et les  $t'_k$  ceux où une particule passe de la droite vers la gauche. Cependant, dans l'idée du théorème de la limite centrale, les équations de l'hydrodynamique fluctuante sont censées décrire le comportement pour  $L$  grand et sur des échelles de temps suffisamment grandes ( $t \sim L^2$ ). Comme les coefficients  $D(\rho)$  et  $\sigma(\rho)$  ne sont définis que près de l'équilibre, cela signifie que sur des distances  $d$  et des temps  $t$  qui vérifient  $1 \ll d \ll L$  et  $1 \ll t \ll L^2$ , le système est proche d'un équilibre local à la densité  $\rho(X, t)$ .

Il est facile de vérifier que les équations de l'hydrodynamique fluctuante redonnent bien pour le courant moyen, quand la différence de densité  $\rho_a - \rho_b$  est petite (et donc pour une profil de densité linéaire presque plat),

$$\langle J(X, t) \rangle = -D(\rho) \rho' = -D(\rho) \frac{\rho_a - \rho_b}{L}$$

Pour la variance du courant intégré  $Q_t$ , si on définit le courant intégré au point  $X$

$$Q(X, t) = \int_0^t J(X, t') dt'$$

et qu'on le moyenne sur toute la longueur

$$Q_t = \frac{1}{L} \int_0^L Q(X, t)$$

on voit que pour  $\rho_a = \rho_b = \rho$ , on a :

$$\begin{aligned} \langle Q_t^2 \rangle &= \left\langle \left( \frac{1}{L} \int_0^L dX' \int_0^t dt' \eta(X', t') \right)^2 \right\rangle \\ &= \frac{1}{L^2} \int_0^L dX' \int_0^t dt' \int_0^L dX'' \int_0^t dt'' \langle \eta(X, t') \eta(X'', t'') \rangle = \frac{t}{L} \sigma(\rho) \end{aligned}$$

Obtenir les équations de l'hydrodynamique fluctuante à partir d'un modèle microscopique n'est en général pas une tâche facile. Cela a été fait mathématiquement, pour l'exclusion symétrique par Kipnis, Olla, Varadhan dans un article qui date de la fin les années 80 [69, 70, 71, 64].

L'idée, comme souvent, est de convoluer les vrais courants et les vraies densités par des fonctions lentement variables qui sont la façon mathématique de dire qu'on regarde le système sur de grandes échelles de temps et d'espace.

## 9.1 Le changement d'échelle

Le plus souvent, on réécrit les équations de l'hydrodynamique fluctuante à l'échelle macroscopique. Cela revient à faire un changement d'échelle sur l'espace et sur le temps

$$x = \frac{X}{L} \quad ; \quad \tau = \frac{t}{L^2}$$

Ce changement de variables conduit à introduire un changement d'échelle sur les densités et les courants macroscopiques :

$$\begin{aligned} \rho(X, t) &= \tilde{\rho} \left( \frac{X}{L}, \frac{t}{L^2} \right) \\ J(X, t) &= \frac{1}{L} \tilde{j} \left( \frac{X}{L}, \frac{t}{L^2} \right) \end{aligned}$$

(le facteur  $\frac{1}{L}$  dans le courant dans ce changement d'échelle diffusif peut se comprendre soit en disant qu'à l'échelle macroscopique les courants sont d'ordre  $\frac{1}{L}$  en accord avec la loi de Fourier soit en disant qu'on souhaite garder pour les densités et les courants macroscopiques  $\tilde{\rho}$  et  $\tilde{j}$  la même loi de conservation que pour les densités et les courants microscopiques.)

$$\frac{d\rho}{dt} + \frac{dJ}{dX} = 0 \quad \Longleftrightarrow \quad \frac{d\tilde{\rho}}{d\tau} + \frac{d\tilde{j}}{dx} = 0$$

Les équations de l'hydrodynamique fluctuante deviennent alors

$$\begin{aligned} \tilde{j} &= -D(\tilde{\rho}) \frac{d\tilde{\rho}}{dx} + \tilde{\eta}(x, \tau) \\ \langle \tilde{\eta}(x, \tau) \tilde{\eta}(x', \tau') \rangle &= \frac{\sigma(\tilde{\rho}(x, \tau))}{L} \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') \end{aligned}$$

(à cause du changement d'échelle  $J \rightarrow \tilde{j}$  le bruit devient  $\tilde{\eta} = L\eta$  mais les corrélations du bruit  $\tilde{\eta}$  sont plus petites car il faut faire aussi les changements d'échelle sur la position et le temps

$$\langle \tilde{\eta}(x, \tau) \tilde{\eta}(x', \tau') \rangle = L^2 \langle \eta(X, t) \eta(X', t') \rangle = L^2 \sigma(\rho) \delta(X - X') \delta(t - t') = \frac{\sigma(\tilde{\rho})}{L} \delta(x - x') \delta(\tau - \tau')$$

On voit donc que pour les équations macroscopiques, la limite d'un grand système correspond à la *limite d'un faible bruit*.

Dans ce qui suit on appellera  $\rho, j,$  et  $\eta$  les densités, courants et bruits macroscopiques au lieu de  $\tilde{\rho}, \tilde{j}, \tilde{\eta}$  pour alléger les notations.

## 9.2 Le cas des marcheurs indépendants

Un des cas les plus simples pour montrer la validité de l'hydrodynamique fluctuante est celui de marcheurs au hasard indépendants sur un réseau de  $L$  sites avec conditions périodiques (c'est à dire que le site  $L + i$  est équivalent au site  $i$ ) : chaque marcheur a une probabilité  $dt$  de sauter à droite et  $dt$  de sauter à gauche. Si on définit la fonction génératrice

$$G(\{\lambda_i\}, t) = \left\langle \exp \left[ \sum_i \lambda_i n_i(t) \right] \right\rangle$$

des nombres de marcheurs  $n_i(t)$  sur les sites  $i$  l'évolution de cette fonction génératrice est donnée par

$$\begin{aligned} \frac{dG(\{\lambda_i\}, t)}{dt} &= \left\langle \sum_i n_i(t) \left( e^{\lambda_{i+1} - \lambda_i} + e^{\lambda_{i-1} - \lambda_i} - 2 \right) \exp \left[ \sum_j \lambda_j n_j(t) \right] \right\rangle \\ &= \sum_i \left( e^{\lambda_{i+1} - \lambda_i} + e^{\lambda_{i-1} - \lambda_i} - 2 \right) \frac{dG(\{\lambda_i\}, t)}{d\lambda_i}. \end{aligned}$$

Prenons des  $\lambda_i$  qui varient sur des distances d'ordre  $L$ , c'est à dire des  $\lambda_i$  de la forme

$$\lambda_i = \lambda \left( \frac{i}{L} \right) \quad \text{avec} \quad \lambda(x+1) = \lambda(x).$$

Cela revient à s'intéresser aux variations des profils de densité sur des échelles de taille  $L$ . La fonction génératrice  $G$  devient alors une fonctionnelle  $\mathcal{G}$  de la fonction  $\lambda(x)$

$$G(\{\lambda_i\}, t) \simeq \exp[L\mathcal{G}(\{\lambda(x)\})]$$

et l'équation d'évolution de  $G$  devient pour  $L$  grand

$$\frac{d\mathcal{G}}{dt} = \frac{1}{L^2} \int dx \left( \lambda'(x)^2 + \lambda''(x) \right) \frac{\delta\mathcal{G}}{\delta\lambda(x)}$$

On voit donc que  $\mathcal{G}$  varie sur une échelle de temps d'ordre  $L^2$  et en posant  $t = L^2\tau$  on obtient

$$\frac{d\mathcal{G}}{d\tau} = \int dx \left( \lambda'(x)^2 + \lambda''(x) \right) \frac{\delta\mathcal{G}}{\delta\lambda(x)}.$$

Nous allons maintenant voir qu'on aboutit exactement à la même évolution à partir d'une théorie macrosocopique : en considérant que le courant  $j(x, \tau)$  est de la forme

$$j(x, \tau) = -D(\rho(x, \tau))\rho'(x, \tau) + \eta(x, \tau)$$

où  $\eta(x, \tau)$  est un bruit blanc gaussien ( $\langle \eta \rangle = 0$  et  $\langle \eta\eta \rangle = \sigma(\rho(x, \tau))\delta(x - x')\delta(\tau - \tau')/L$ ). En utilisant l'équation de conservation  $\frac{d\rho}{d\tau} = -\frac{dj}{dx}$  c'est à dire

$$\rho(x, \tau + d\tau) - \rho(x, \tau) = d\rho(x) = -\frac{dj(x, \tau)}{dx}d\tau$$

on a (en faisant une méthode du col pour  $L$  grand)

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\tau + d\tau) &= \int dx \lambda(x) \rho(x, \tau + d\tau) \\ &= \int dx \lambda(x) \rho(x, \tau) + \max_{\{j(x, \tau)\}} \int dx \left[ \lambda(x) \left( -\frac{dj(x, \tau)}{dx} \right) d\tau - \frac{(j(x, \tau) + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} d\tau \right] \\ &= \mathcal{G}(\tau) + d\tau \max_{\{j(x, \tau)\}} \int dx \left[ \lambda'(x)j(x, \tau) - \frac{(j(x, \tau) + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma} \right] \\ &= \mathcal{G}(\tau) + d\tau \int dx \left[ \frac{\sigma(\rho(x, \tau))}{2} \lambda'(x)^2 - D(\rho(x, \tau)) \rho'(x, \tau) \lambda'(x) \right]. \end{aligned}$$

En effectuant une nouvelle intégration par parties, on obtient

$$\frac{d\mathcal{G}(\tau)}{d\tau} = \int dx \frac{\sigma(\rho(x, \tau))}{2} \lambda'(x)^2 + \rho(x) \frac{d(D(\rho(x, \tau)) \lambda'(x))}{dx}$$

ce qui est équivalent au calcul microscopique pour des marcheurs indépendants si on choisit

$$D(\rho) = 1 \quad \text{et} \quad \sigma(\rho) = 2\rho$$

et si on utilise le fait que

$$\rho(x) = \frac{\delta\mathcal{G}}{\delta\lambda(x)}.$$

*Remarque* : une façon simple de voir que

$$\frac{d \log G}{d\lambda_i} \simeq \frac{\delta\mathcal{G}}{\delta\lambda(x)}$$

est de perturber la fonction  $\lambda(x)$  en la remplaçant par  $\lambda(x) + \mu(x)$ . A l'ordre linéaire en  $\mu$ , on a en effet pour les variations de  $\mathcal{G}$  et de  $\log G$

$$L \Delta\mathcal{G} = L \int dx \frac{\delta\mathcal{G}}{\delta\lambda(x)} \mu(x) = \Delta \log G = \sum_i \frac{d \log G}{d\lambda_i} \mu \left( \frac{i}{L} \right).$$

### 9.3 Les questions que l'hydrodynamique fluctuante permettent d'aborder

Les équations de l'hydrodynamique fluctuante vont nous permettre d'aborder toute une série de questions sur les propriétés du système à l'échelle macroscopique :

1. Le calcul du profil stationnaire  $\bar{\rho}(x)$ .
2. Celui des corrélations de densité : nous verrons que, dans les régimes hors d'équilibre, il y a de manière générique des corrélations à longue portée [73, 74, 75, 76].
3. La détermination du quasi-potentiel  $\mathcal{F}$  qui donne la probabilité d'observer un profil de densité macroscopique  $\rho(x)$ ,  $0 < x < 1$  quelconque

$$\text{Pro}(\{\rho(x)\}) \sim \exp[-L\mathcal{F}(\{\rho(x)\})] .$$

Le quasi-potentiel  $\mathcal{F}$  généralise donc ainsi la notion d'énergie libre aux systèmes hors d'équilibre (voir [57] et section 12.2)

4. La compréhension de la façon dont des fluctuations ou des grandes déviations se produisent et relaxent.

En particulier à l'équilibre la trajectoire  $\text{Traj}_1$  (ou la statistique des trajectoires) qui aboutit à une déviation est identique à la trajectoire  $\text{Traj}_2$  de relaxation

$$\text{Traj}_1 \equiv \text{Traj}_2 \quad \text{à l'équilibre} .$$

Cela se voit en particulier pour tous les modèles décrits par une dynamique markovienne qui vérifie la condition de bilan détaillé, puisque la matrice de Markov et la matrice de Markov duale sont identiques [15].

En dehors du bilan détaillé, on a de manière générique

$$\text{Traj}_1 \neq \text{Traj}_2 \quad \text{hors d'équilibre} .$$

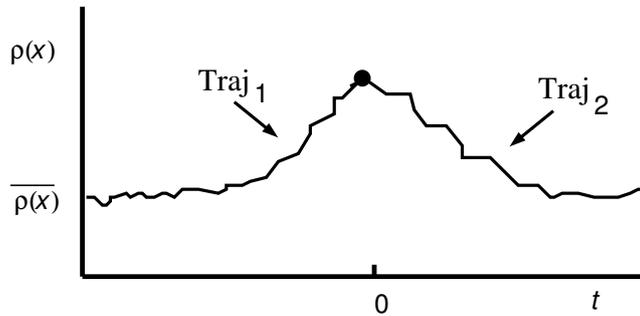


FIGURE 19: Pour un système à l'équilibre, la trajectoire (dans l'espace multidimensionnel de tous les profils de densité)  $\text{Traj}_1$  qui aboutit à une fluctuation est identique à la trajectoire  $\text{Traj}_2$  avec laquelle cette fluctuation relaxe.

5. La fonction de grandes déviations du courant

Dans un régime stationnaire comme celui de la figure 2 la fonction de grande déviation  $\Phi(j)$  du courant définie par

$$\text{Pro} \left( \frac{Q_t}{t} = j \right) \sim e^{-t\Phi(j)}$$

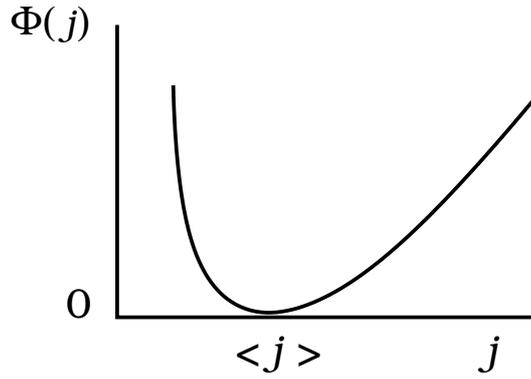


FIGURE 20: La forme typique d'une fonction de grande déviation du courant

a une forme typique comme sur la figure 20. Le développement de  $\Phi(j)$  autour du courant moyen  $\langle j \rangle$  permet de déterminer tous les cumulants du courant [15].

#### 6. La mesure empirique

Si on définit un profil empirique  $\rho_{\text{empirique}}$

$$\rho_{\text{empirique}}(x) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \rho(x, \tau') d\tau'$$

comme le profil moyen mesuré pendant une longue fenêtre de temps  $\tau$ , on s'attend à ce que pour  $L$  et  $\tau$  grands

$$\text{Pro}(\{\rho_{\text{empirique}}(x)\}) \sim e^{-\tau L \Phi(\{\rho(x)\})}$$

Pour certains modèles ou pour certains choix du profil  $\rho_{\text{empirique}}$  le profil typique  $\rho(x, \tau)$  conditionné à ce profil empirique reste proche de  $\rho_{\text{empirique}}(x)$  à part des effets de bord caractérisés par les  $\text{Traj}_1$  et  $\text{Traj}_2$  avec une forme comme celle de la figure 21.

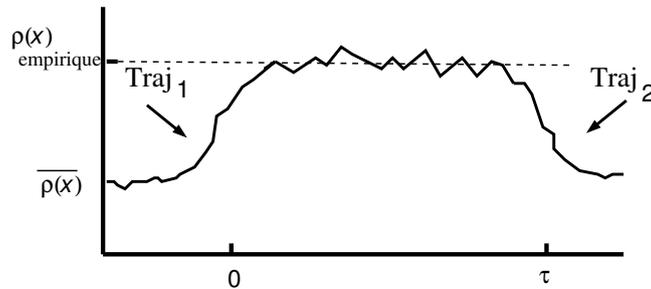


FIGURE 21: Une forme possible de l'évolution d'un profil de densité typique, conditionné à un profil  $\rho_{\text{empirique}}(x)$  donné.

Dans d'autres cas le profil typique peut avoir une dépendance temporelle plus compliquée qui diffère notablement de  $\rho_{\text{empirique}}$  comme sur la figure 22.

On peut observer ainsi des transitions entre les situations des figures 21 et 22 quand, pour un modèle donné, on change certains paramètres du modèle ou on choisit un nouveau profil empirique.

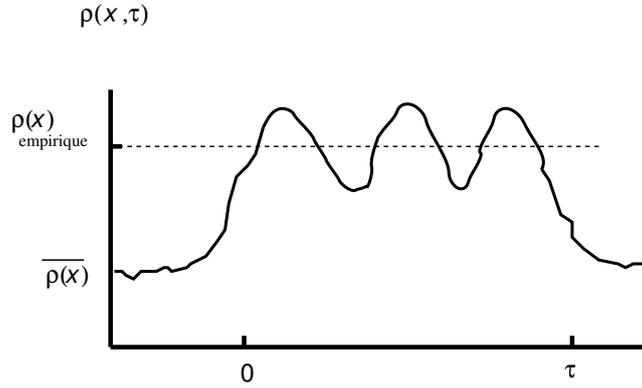


FIGURE 22: Un autre type possible de profil typique conditionné a un profil  $\rho_{\text{empirique}}(x)$  donné.

## 10 Le profil stationnaire et les corrélations

A partir de l'hydrodynamique fluctuante il est facile de déterminer le profil stationnaire  $\bar{\rho}(x)$ . Il vérifie

$$\langle j \rangle = -D(\bar{\rho}(x)) \bar{\rho}'(x) .$$

En intégrant entre  $x = 0$  et  $x = 1$  cela donne le courant moyen dans le régime stationnaire

$$\langle j \rangle = \int_{\rho_b}^{\rho_a} D(\rho) d\rho$$

et le profil sous forme implicite

$$\langle j \rangle x = \int_{\bar{\rho}(x)}^{\rho_a} D(\rho) d\rho .$$

Pour calculer les corrélations de densité [78], on peut linéariser les équations de l'hydrodynamique fluctuante

$$\frac{d\rho}{d\tau} = \frac{d}{dx} \left( D(\rho) \frac{d\rho}{dx} \right) - \frac{d}{dx} \eta(x, \tau) .$$

Si on pose

$$\rho(x, t) = \bar{\rho}(x) + r(x, t)$$

on obtient à l'ordre linéaire en  $r$

$$\frac{dr(x, \tau)}{d\tau} = \frac{d^2(D(\bar{\rho}(x)) r(x, \tau))}{dx^2} - \frac{d\eta(x, \tau)}{dx} .$$

On voit que le bruit  $\eta(z, \tau)$  à un point  $z$  au temps  $\tau$  va influencer la densité en tout point  $x$  du système à tous les temps ultérieurs à  $\tau$ . C'est l'origine des corrélations de densité à longue portée : deux points  $x$  et  $y$  ont leurs densités  $\rho(x, 0)$  et  $\rho(y, 0)$  corrélées au temps 0 parce que ces deux densités sont influencées par tous les bruits  $\eta(z, \tau)$  en tous les points  $z$  du système et à tous les temps  $\tau < 0$ .

Nous verrons que c'est l'origine des corrélations à longue portée en  $\frac{1}{L}$  qui sont génériques des systèmes hors d'équilibre.

Comme le bruit  $\eta(x, \tau)$  est d'ordre  $L^{-\frac{1}{2}}$  et que les fluctuations de densité sont linéaires dans le bruit on voit déjà sans faire aucun calcul que les fluctuations de densité  $r(x, \tau)$  sont aussi d'ordre  $L^{-\frac{1}{2}}$  ce qui donne des corrélations d'ordre  $\frac{1}{L}$

$$\langle \rho(x, 0) \rho(y, 0) \rangle_c = \langle r(x, 0) r(y, 0) \rangle \sim \frac{1}{L}$$

Une façon de calculer ces corrélations est d'introduire la fonction de Green  $G_\tau(x, y)$  qui satisfait

$$\frac{dG_\tau(x, y)}{d\tau} = \frac{d^2(D(\bar{\rho}(x)) G_\tau(x, y))}{dx^2} \quad \text{avec} \quad G_0(x, y) = \delta(x - y)$$

avec comme conditions aux bords  $G_\tau(0, y) = G_\tau(x, 0) = 0$ . La fluctuation de densité  $r(x, \tau)$  peut alors s'écrire

$$r(x, \tau) = \int_0^\infty d\tau' \int_0^1 dz G_{\tau'}(x, z) \left( -\frac{d\eta(z, \tau - \tau')}{dz} \right) = \int_0^\infty d\tau' \int_0^1 dz \frac{dG_{\tau'}(x, z)}{dz} \eta(z, \tau - \tau')$$

ce qui donne après avoir moyenné sur le bruit  $\eta$

$$\langle r(x, 0) r(y, 0) \rangle \simeq \frac{1}{L} \int_0^1 dz \int_0^\infty d\tau \sigma(\bar{\rho}(z)) \frac{dG_\tau(x, z)}{dz} \frac{dG_\tau(y, z)}{dz}.$$

En utilisant en plus de la définition de la fonction de Green, deux propriétés du profil stationnaire et de la fonction de Green

$$\langle j \rangle = -D(\bar{\rho}(x)) \frac{d\bar{\rho}(x)}{dx} \quad \text{et} \quad \frac{dG_\tau(x, y)}{d\tau} = D(\bar{\rho}(y)) \frac{d^2 G_\tau(x, y)}{dy^2}$$

(cette dernière relation peut se comprendre en écrivant l'égalité des deux lignes suivantes

$$\begin{aligned} \frac{dG_{\tau+\tau'}(x, z)}{d\tau'} &= \int_0^1 dy G_\tau(x, y) \left( \frac{d}{d\tau'} G_{\tau'}(y, z) \right) &= \int_0^1 dy G_\tau(x, y) \frac{d^2(D(\bar{\rho}(y)) G_{\tau'}(y, z))}{dy^2} \\ &= \int_0^1 dy D(\bar{\rho}(y)) \left( \frac{d^2 G_\tau(x, y)}{dy^2} \right) G_{\tau'}(y, z) \\ \frac{dG_{\tau+\tau'}(x, z)}{d\tau} &= \int_0^1 dy \left( \frac{d}{d\tau} G_\tau(x, y) \right) G_{\tau'}(y, z) \end{aligned}$$

on peut réécrire les corrélations sous la forme [78]

$$\langle r(x, 0) r(y, 0) \rangle \simeq \frac{1}{L} \left[ \frac{\sigma(\bar{\rho}(y))}{2D(\bar{\rho}(y))} \delta(x - y) - \langle j \rangle \int_0^1 dz \frac{d}{dz} \left( \frac{\sigma'(\bar{\rho}(z))}{2D(\bar{\rho}(z))} \right) \int_0^\infty d\tau \frac{d(G_\tau(x, z) G_\tau(y, z))}{dz} \right].$$

Sous cette forme on voit bien que les corrélations à longue portée (2ème terme) s'annulent à l'équilibre (puisque  $\langle j \rangle = 0$ ). On voit aussi que pour des modèles comme les marcheurs indépendants ( $D = 1, \sigma(\rho) = 2\rho$ ) ou plus généralement les "zero range process" [54] (pour lesquels  $\sigma(\rho)$  est arbitraire et mais  $D(\rho)$  est donné par  $2D(\rho) = \sigma'(\rho)$ ) les corrélations à longue portée sont absentes. En dehors de ces cas particuliers on obtient de manière générique des corrélations en  $\frac{1}{L}$ .

Le premier terme est lui non nul et représente les fluctuations d'équilibre autour de la densité stationnaire  $\bar{\rho}(x)$ . Il intègre toutes les corrélations d'équilibre à courte distance, dont les détails ne

sont pas visibles à l'échelle macroscopique et qui s'additionnent pour contribuer au préfacteur de  $\delta(x - y)$ .

En utilisant à nouveau la définition des fonctions de Green, on peut montrer que la partie longue portée des corrélations  $B(x, y)$

$$B(x, y) = -\langle j \rangle \int_0^1 dz \frac{d}{dz} \left( \frac{\sigma'(\bar{\rho}(z))}{2D(\bar{\rho}(z))} \right) \int_0^\infty d\tau \frac{d(G_\tau(x, z) G_\tau(y, z))}{dz}$$

satisfait une équation aux dérivées partielles [78]

$$\frac{d^2(D(\bar{\rho}(x)) B(x, y))}{dx^2} + \frac{d^2(D(\bar{\rho}(y)) B(x, y))}{dy^2} = \delta(x - y) \langle j \rangle \frac{d}{dx} \left( \frac{\sigma'(\bar{\rho}(x))}{2D(\bar{\rho}(x))} \right) .$$

Dans certains cas particuliers, comme quand  $D(\rho) = 1$ , on connaît toutes les valeurs propres et toutes les fonctions propres de l'opérateur de diffusion et on peut écrire une expression explicite de la fonction de Green

$$G_\tau(x, y) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-n^2 \pi^2 \tau} \sin(\pi n x) \sin(\pi n y) .$$

Pour d'autres choix de  $D(\rho)$  on n'a pas de formule explicite des fonctions de Green mais on s'attend à une structure de valeurs propres et de vecteurs propres assez semblable au cas  $D(\rho) = 1$ .

La connaissance de la fonction de Green dans le cas du modèle d'exclusion permet d'obtenir, par un calcul relativement compliqué, l'expression des fonctions de corrélation de l'exclusion symétrique ( $D = 1, \sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$ )

$$\langle \rho(x)\rho(y) \rangle_c = \langle r(x, 0)r(y, 0) \rangle \simeq \frac{1}{L} \left[ \bar{\rho}(x)(1 - \bar{\rho}(x)) \delta(x - y) - (\rho_a - \rho_b)^2 x(1 - y) \right]$$

où le profil stationnaire est donné par

$$\bar{\rho}(x) = \rho_a(1 - x) + \rho_b x .$$

On pourrait penser que pour  $L$  grand, ces corrélations à longue portée, d'ordre  $\frac{1}{L}$ , peuvent être négligées. Ce n'est le cas comme on peut s'en convaincre en calculant par exemple les fluctuations du nombre total  $N$  de particules dans le système :

$$N = L \int_0^1 \rho(x) dx$$

Cela donne en moyennant sur le profil

$$\langle N \rangle = L \int_0^1 \bar{\rho}(x) dx = L \frac{\rho_a + \rho_b}{2}$$

et

$$\begin{aligned} \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 &= L^2 \int_0^1 dx \int_0^1 dy \langle \rho(x)\rho(y) \rangle_c \\ &= L \left[ \int_0^1 \bar{\rho}(x)(1 - \bar{\rho}(x)) dx - 2(\rho_a - \rho_b)^2 \int_0^1 dx \int_x^1 dy x(1 - y) \right] \end{aligned}$$

ce qui montre que la contribution des corrélations à longue portée est comparable à celle du terme en  $\delta(x - y)$ .

*Remarque* : Ces corrélations à longue portée pour le modèle d'exclusion symétrique ont été calculées par Spohn en 1983 [72, 73]. Nous verrons (section 13) qu'on peut retrouver facilement leur expression de manière simple à partir d'un calcul microscopique. On peut en effet montrer, pour une chaîne de  $L$  sites, et pour des paramètres  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  tels qu'ils sont définis sur la figure 17, le courant est donné par

$$\langle J \rangle = \frac{\rho_a - \rho_b}{L + a + b - 1}$$

où

$$\rho_a = \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} \quad ; \quad \rho_b = \frac{\delta}{\beta + \delta} \quad ; \quad a = \frac{1}{\alpha + \gamma} \quad ; \quad b = \frac{1}{\beta + \delta}$$

le profil moyen par

$$\langle n_i \rangle = \frac{\rho_a(L + b - i) + \rho_b(i - 1 + a)}{L + a + b - 1} \quad ; \quad \langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 = \langle n_i \rangle - \langle n_i \rangle^2$$

et les corrélations par

$$\langle n_i n_j \rangle - \langle n_i \rangle \langle n_j \rangle = -\frac{(i + a - 1)(L + b - j)}{(L + a + b - 1)^2(L + a + b - 2)} (\rho_a - \rho_b)^2 \quad \text{pour } 1 \leq i < j \leq L$$

On voit que dans la limite  $L$  grand, pour  $i = Lx$  et  $j = Ly$ , on obtient bien la partie à longue portée des corrélations de densité. Les corrélations  $\langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 \simeq \rho(x)(1 - \rho(x))$  donnent à grande échelle le terme proportionnel à  $\delta(x - y)$ .

*Remarque* : On peut facilement généraliser tout ce qui précède au cas où en plus, des réservoirs à des densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$ , on rajoute un champ faible  $\mathcal{E}(X)$  d'ordre  $\frac{1}{L}$

$$\mathcal{E}(X) = \frac{1}{L} E\left(\frac{X}{L}\right)$$

Le courant  $J(X, t)$  à l'échelle microscopique devient alors

$$J = -D(\rho(X, t)) \frac{d\rho(X, t)}{dX} + \frac{\mathcal{E}(X)}{2kT} \sigma(\rho(X, t)) - \frac{d\eta(X, t)}{dX}$$

et à l'échelle macroscopique

$$j = -D(\rho(x, \tau)) \frac{d\rho(x, \tau)}{dx} + \frac{E(x)}{2kT} \sigma(\rho(x, \tau)) - \frac{d\eta(x, \tau)}{dx}$$

Comme précédemment, on aboutit de manière générique à des corrélations à longue portée sauf dans le cas où le courant  $\langle j \rangle = 0$  c'est à dire quand le champ  $E(x)$  satisfait

$$\int_0^1 E(x) dx = -kT \int_0^1 dx \frac{2D(\bar{\rho}(x))}{\sigma(\bar{\rho}(x))} \bar{\rho}'(x) = \mu(\rho_a) - \mu(\rho_b)$$

(voir le début de la section 8) qui exprime que la dynamique satisfait une condition de bilan détaillé.

# COURS 5

## 11 L'équation de Langevin dans la limite d'un faible bruit

Nous avons vu que pour un système de grande taille  $L$ , on doit étudier l'hydrodynamique fluctuante dans la limite d'un faible bruit : à l'échelle macroscopique on a deux champs (la densité  $\rho(x, \tau)$  et le courant  $j(x, \tau)$ ) qui sont liés par une condition

$$\frac{d\rho}{d\tau} + \frac{dj}{dx} = 0$$

et le bruit  $\eta(x, t)$  qui apparaît dans l'expression du courant

$$j = -D(\rho) \frac{d\rho}{dx} + \eta(x, \tau)$$

satisfait

$$\langle \eta(x, \tau) \rangle = 0 \quad ; \quad \langle \eta(x, \tau) \eta(x', \tau') \rangle = \frac{\sigma(\rho(x, \tau))}{L} \delta(x' - x) \delta(\tau' - \tau)$$

ce qui signifie que le bruit est multiplicatif (nous verrons sur l'exemple d'une équation de Langevin que dans la limite d'un faible bruit, ici la limite  $L$  grand, la façon dont on traite ce bruit multiplicatif n'a pas d'importance au niveau des fonctions de grandes déviations).

Pour aborder la question d'équations stochastiques dans le cas d'un faible bruit il est utile de revenir sur le cas d'un nombre réduit de degrés de liberté, en particulier sur l'équation de Langevin. La théorie mathématique des systèmes dynamiques soumis à un faible bruit a une longue histoire en mathématiques et en physique (voir la théorie de Freidlin et Wentzell [79]). Ici nous allons discuter quelques exemples qui permettront de mieux comprendre la théorie des fluctuations macroscopiques.

L'équation de Langevin avec un seul degré est l'exemple le plus simple d'un système dynamique soumis à un faible bruit ( $\epsilon \ll 1$ )

$$\dot{q} = F(q) + \eta(t) \quad \text{avec} \quad \langle \eta(t) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \epsilon \delta(t - t') .$$

### 11.1 L'équation de Fokker Planck

L'équation de Fokker Planck qui donne la probabilité  $P_t(q)$  pour cette équation de Langevin peut s'écrire [15]

$$\frac{dP_t(q)}{dt} = -\frac{d}{dq} (F(q) P_t(q)) + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 P_t(q)}{dq^2} .$$

Pour  $\epsilon$  petit on s'attend, dans les cas les plus simples, à ce que la probabilité  $P_t(q)$  soit concentrée autour de la trajectoire (classique) solution de l'équation de Langevin en l'absence de bruit. Si on écrit pour  $\epsilon$  petit

$$P_t(q) = \exp \left[ -\frac{S_t(q)}{\epsilon} \right]$$

on obtient à partir de de l'équation de Fokker Planck

$$\frac{dS_t}{dt} = -F(q) \frac{dS_t(q)}{dq} - \frac{1}{2} \left( \frac{dS_t(q)}{dq} \right)^2 + \epsilon \left( F'(q) + \frac{d^2 S_t(q)}{dq^2} \right) .$$

Sous cette forme l'analyse de la limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , est très analogue à la méthode WKB bien connue en physique quantique [80].

*Remarque* : Dans le cas de l'hydrodynamique fluctuante, on a un bruit multiplicatif (puisque la variance du bruit dépend de la densité à travers la fonction  $\sigma(\rho)$ ). Pour une équation de Langevin avec un bruit multiplicatif comme par exemple

$$\dot{q} = F(q) + g(q) \eta(t) \quad \text{avec} \quad \langle \eta(t) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \eta(t) \eta(t') \rangle = \epsilon \delta(t - t')$$

on sait [15] que l'équation de Fokker Planck dépend de la prescription que l'on choisit à travers un paramètre  $\alpha$

$$\frac{dP_t(q)}{dt} = -\frac{d}{dq} (F(q) P_t(q)) + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 (g(q)^2 P_t(q))}{dq^2} - \alpha \epsilon \frac{d(g'(q) g(q) P_t(q))}{dq}$$

( $\alpha = 0$  pour la prescription de Itô et  $\alpha = \frac{1}{2}$  pour celle de Stratonovich). En posant comme plus haut

$$P_t(q) = \exp \left[ -\frac{S_t(q)}{\epsilon} \right]$$

on aboutit à

$$\frac{dS_t(q)}{dt} = -F(q) \frac{dS_t(q)}{dq} - \frac{1}{2} \left( \frac{dS_t(q)}{dq} \right)^2 + \epsilon \left( F'(q) + g(q)^2 \frac{d^2 S_t(q)}{dq^2} + (2 - \alpha) g(q) g'(q) \frac{dS_t(q)}{dq} \right) + O(\epsilon^2)$$

et on voit que dans la limite  $\epsilon \rightarrow 0$  le choix de  $\alpha$  n'affecte pas l'ordre dominant qui permet de déterminer  $S_t(q)$ .

## 11.2 L'action

Une façon voisine de penser à la probabilité  $P_t(q)$  est de déterminer la probabilité d'une trajectoire

$$\text{Traj} = \{q(t'), 0 < t' < t\}$$

On peut facilement montrer que la probabilité d'une trajectoire peut s'écrire sous la forme d'une intégrale de chemin

$$\text{Prob}(\text{Traj}) \sim \exp \left[ -\int_0^t \frac{(\dot{q} - F(q))^2}{2\epsilon} dt \right]$$

En effet si on discrétise le temps, la solution de l'équation de Langevin s'écrit

$$q(t + \Delta t) - q(t) = F(q(t)) \Delta t + B \quad \text{avec} \quad \langle B \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle B^2 \rangle = \epsilon \Delta t$$

On voit donc que  $q(t + \Delta t) - q(t) - F(q(t)) \Delta t$  est une variable gaussienne. On en déduit que la probabilité d'une trajectoire peut s'écrire sous la forme d'une intégrale de chemin

$$\begin{aligned} \text{Pro}(\text{Traj}) &\sim \exp \left[ -\sum_t \frac{(q(t + \Delta t) - q(t) - F(q(t)) \Delta t)^2}{2\epsilon \Delta t} \right] \sim \exp \left[ -\sum_t \frac{(\dot{q} \Delta t - F(q) \Delta t)^2}{2\epsilon \Delta t} \right] \\ &\sim \exp \left[ -\frac{1}{2\epsilon} \int_0^t (\dot{q} - F(q))^2 dt \right] \end{aligned}$$

On a donc

$$\boxed{\text{Prob}(\text{Traj}) \sim \exp[-\mathcal{A}]} \quad \text{où l'action } \mathcal{A} \text{ est donnée par} \quad \boxed{\mathcal{A} = \int_0^t \frac{(\dot{q} - F(q))^2}{2\epsilon} dt}$$

*Remarque :* A partir de la relation  $q(t + \Delta t) - q(t) - F(q(t))\Delta t$  on peut écrire

$$P_{t+\Delta t}(q) \sim \int dq' P_t(q') \exp \left[ -\frac{(q - q' - F(q)\Delta t)^2}{2\epsilon\Delta t} \right]$$

et comme

$$P_t(q) \sim \exp \left[ -\frac{S_t(q)}{\epsilon} \right]$$

on a pour  $\epsilon$  petit

$$S_{t+\Delta t}(q) = \min_{q'} \left[ S_t(q') + \frac{(q - q' - F(q)\Delta t)^2}{2\Delta t} \right]$$

et donc

$$\frac{dS_t(q)}{dt} = \frac{1}{2} \left[ F(q)^2 - \frac{1}{2} \left( F(q) + \frac{dS_t}{dq} \right)^2 \right]$$

qui est une équation du type Hamilton Jacobi et qui coïncide avec l'ordre dominant que nous avons trouvé à partir de l'équation de Fokker Planck.

*Remarque :*

Dans le cadre de l'hydrodynamique fluctuante, une trajectoire Traj est donnée par l'évolution de deux champs : le profil de densité et le profil de courant qui sont liés par la loi de conservation  $\frac{d\rho}{d\tau} + \frac{dj}{dx} = 0$ . En discrétisant l'espace et le temps, comme on vient de le faire pour l'équation de Langevin, on obtient en partant des équations de l'hydrodynamique fluctuante

$$\boxed{\mathcal{A} = L \int_0^1 dx \int_0^\tau d\tau \frac{(j + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)}}$$

C'est sur cette expression de l'action que s'appuiera notre discussion de la théorie des fluctuations macroscopiques [56].

### 11.3 Analogie avec la mécanique lagrangienne et le quasi-potentiel

Si on revient à l'équation de Langevin, on voit que la trajectoire la plus probable qui va d'une position  $q(t_1) = q_1$  à une position  $q(t_2) = q_2$  est celle qui minimise l'action

$$\mathcal{A} = \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{L}(q, \dot{q}) dt \quad \text{avec ici} \quad \mathcal{L}(q, \dot{q}) = \frac{(\dot{q} - F(q))^2}{2\epsilon}$$

Le calcul du chemin optimal est alors identique au calcul de variations que l'on fait lorsqu'on exprime le principe de moindre action en dynamique lagrangienne. Il satisfait donc les équations d'Euler Lagrange

$$\frac{d\mathcal{L}(q, \dot{q})}{dq} = \frac{d}{dt} \frac{d\mathcal{L}(q, \dot{q})}{d\dot{q}} \quad \text{c'est à dire} \quad \ddot{q} = F'(q)F(q)$$

Comme en mécanique analytique, on voit alors que

$$\frac{d\mathcal{L}(q(t), \dot{q}(t))}{dt} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} \dot{q} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \ddot{q} = \frac{d}{dt} \left( \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \right)$$

et donc que l'hamiltonien  $\mathcal{H}$  défini par

$$\mathcal{H} = \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}(q, \dot{q})}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L}(q, \dot{q})$$

est une constante du mouvement le long de la trajectoire optimale

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = 0 .$$

Toutes les trajectoires optimales dans le cas de l'équation de Langevin satisfont donc

$$\dot{q}^2 - F(q)^2 = \text{Constante} .$$

#### 11.4 L'expression du quasi-potentiel

A partir de l'action on peut calculer le quasi-potentiel  $\psi(q)$  défini par

$$P(q) \sim \exp \left[ -\frac{\psi(q)}{\epsilon} \right]$$

où  $P(q)$  est la probabilité d'observer le système en  $q$  dans le régime stationnaire,

Dans la limite d'un faible bruit le quasi-potentiel est donné par

$$\psi(q) = \min_{\{q(\tau)\}} \left[ \int_{-\infty}^0 \frac{(\dot{q}(\tau) - F(q(\tau)))^2}{2} d\tau \right] \quad \text{avec} \quad q(-\infty) = \bar{q} \quad \text{et} \quad q(0) = q$$

qui exprime que pour observer une déviation  $q$  à partir de la valeur la plus probable  $\bar{q}$  il faut emprunter (dans la limite  $\epsilon \rightarrow 0$ ) le chemin optimal qui minimise l'action. Cette expression n'est valable que lorsque le chemin qui minimise l'action est unique. Nous verrons dans le cas du double puits que parfois il faut sommer sur un nombre exponentiellement grand de trajectoires, même quand  $\epsilon$  est petit (voir 2).

1. Une force qui dérive d'un potentiel

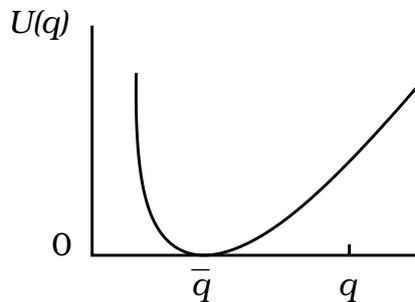


FIGURE 23: Le quasi-potentiel est donné par l'action du chemin optimal qui relie le minimum  $\bar{q}$  du potentiel au point  $q$

Prenons d'abord l'exemple simple de l'équation de Langevin dans le cas où la force  $F(q)$  dérive d'un potentiel qui ne possède qu'un seul minimum comme sur la figure 23

$$F(q) = -\frac{dU(q)}{dq} .$$

En faisant le changement de variable

$$q(\tau) = \tilde{q}(-\tau)$$

on obtient

$$\begin{aligned} \psi(q) &= \min_{\tilde{q}(\tau)} \left[ \int_0^\infty \frac{1}{2} \left( \frac{d\tilde{q}(\tau)}{d\tau} + F(\tilde{q}(\tau)) \right)^2 d\tau \right] \quad \text{avec} \quad \tilde{q}(\infty) = \bar{q} \quad \text{et} \quad \tilde{q}(0) = q \\ &= \min_{\tilde{q}(\tau)} \left[ 2 \int_0^\infty F(\tilde{q}) \frac{d\tilde{q}}{d\tau} d\tau + \int_0^\infty \frac{1}{2} \left( \frac{d\tilde{q}}{d\tau} - F(\tilde{q}) \right)^2 d\tau \right] \\ &= 2(U(q) - U(\bar{q})) + \min_{\tilde{q}(\tau)} \left[ \int_0^\infty \frac{1}{2} \left( \frac{d\tilde{q}}{d\tau} - F(\tilde{q}) \right)^2 d\tau \right] \end{aligned}$$

Sous cette forme la trajectoire optimale  $\tilde{q}(\tau)$  est facile à trouver : il suffit de choisir la trajectoire qui relaxe vers l'équilibre

$$\frac{d\tilde{q}}{d\tau} = F(\tilde{q}) \quad \Rightarrow \quad \frac{dq}{d\tau} = -F(q)$$

ce qui annule l'intégrale et donc le quasi-potentiel est donné par

$$\psi(q) = 2(U(q) - U(\bar{q})) .$$

On voit donc que quand la force dérive d'un potentiel, le quasipotential est simplement le potentiel (le facteur 2 provient simplement de la façon dont on normalise l'amplitude  $\epsilon$  du bruit).

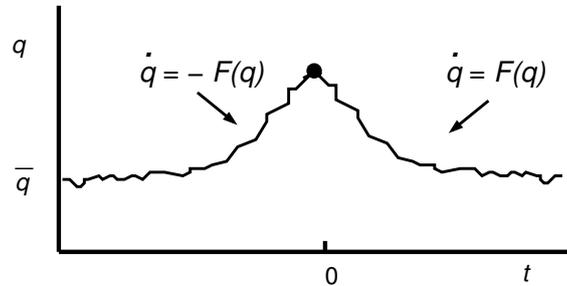


FIGURE 24: A l'équilibre, la trajectoire qui aboutit à une fluctuation est identique à la trajectoire le long de laquelle cette fluctuation relaxe.

On voit également que la trajectoire qui aboutit à une déviation  $q$  est identique à la trajectoire de relaxation de cette déviation comme sur la figure 24.

On peut enfin vérifier que le long des deux trajectoires, l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{\dot{q}^2 - F(q)^2}{2}$$

est constant (dans le cas présent  $\mathcal{H} = 0$ ) comme on s'y attend pour toute trajectoire optimale (voir section 11.3).

## 2. Le cas d'un double puits

Si on se place toujours à une dimension dans le cas d'un double puits (pas forcément symétrique) comme sur la figure 25, la force dérive d'un potentiel et donc on sait d'avance que

$$\psi(q_d) = 2(U_d - U_a) .$$

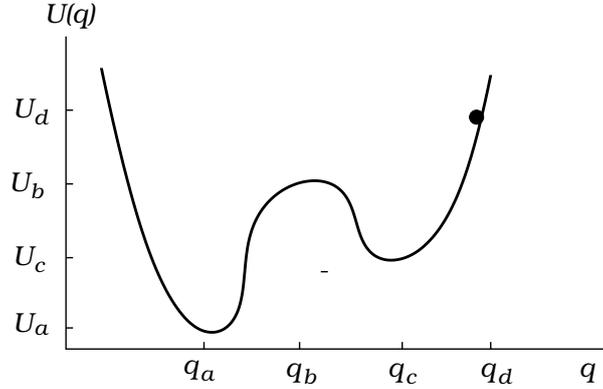


FIGURE 25: Dans cet exemple, l'action le long d'une trajectoire allant de  $q_a$  à  $q_d$  est plus grande que la différence de potentiel  $U_d - U_a$ . Le nombre de trajectoires allant de  $q_a$  à  $q_d$  qui minimisent l'action est exponentiellement grand et il faut sommer sur toutes ces trajectoires.

Cela peut paraître contradictoire car l'action minimale, pour les trajectoires allant de  $q_a$  à  $q_d$ , est

$$\mathcal{A} = 2(U_b - U_a) + 2(U_d - U_c)$$

car il y a deux contributions non nulles : la partie de la trajectoire allant de  $q_a$  à  $q_b$  et celle allant de  $q_c$  à  $q_d$  (la trajectoire allant de  $q_b$  à  $q_c$  donne une contribution nulle puisque le long de cette partie de la trajectoire on a  $\dot{q} = F(q)$ ).

Une façon d'expliquer cette contradiction apparente est de se rappeler que comme le système est à l'équilibre les trajectoires qui mènent de l'équilibre  $q_a$  à la fluctuation  $q_d$  sont les mêmes que celles qui relaxent de  $q_d$  vers  $q_a$ .

Une trajectoire typique de relaxation partant de  $q_d$  va rapidement en  $q_c$ , puis elle reste un temps de l'ordre

$$T \sim \exp \left[ \frac{2(U_b - U_c)}{\epsilon} \right]$$

avant de franchir la barrière en  $q_b$  pour aboutir à l'équilibre  $q_a$ . Autrement dit il n'y a pas une seule trajectoire de relaxation de  $q_d$  vers  $q_a$  mais beaucoup car le moment  $t$  du saut de  $q_c$  vers  $q_a$  est de l'ordre de  $T$  (ce temps  $t$  est distribué selon une loi de Poisson). Il y a donc de l'ordre  $T$  trajectoires allant de  $q_d$  à  $q_a$ . Pour obtenir  $\psi$ , il est nécessaire de sommer sur toutes ces trajectoires optimales et donc on a bien

$$\exp \left[ -\frac{\psi(q_d)}{\epsilon} \right] \sim T \exp \left[ -\frac{\mathcal{A}}{\epsilon} \right]$$

ce qui lève la contradiction.

### 3. Le quasi-potentiel sur un cercle avec une force qui ne dérive pas d'un potentiel

Le cas sans doute le plus simple d'une force qui ne dérive pas d'un potentiel est celui d'un cercle ( $0 \leq q < 1$ ) avec conditions périodiques ( $q + 1 \equiv q$ ) et une force ( $F(q + 1) = F(q)$ ) de la forme

$$F(q) = f - \frac{dU(q)}{dq} .$$

Clairement cette force ne dérive pas d'un potentiel puisque  $\int_0^1 F(q) dq = f \neq 0$  dès que  $f$  est non nulle. (On peut penser à  $U(q)$  comme à l'énergie interne du système et à  $f$  comme à une force extérieure).

La probabilité  $P_t(q)$  d'observer la position  $q$  au temps  $t$  évolue, comme on l'a vu, selon l'équation de Fokker Planck

$$\frac{dP_t(q)}{dt} = -\frac{d}{dq} (F(q) P_t(q)) + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 P_t(q)}{dq^2} .$$

Dans la limite des temps longs cette probabilité converge vers une distribution stationnaire  $P_{\text{sta}}(q)$  solution de

$$-\frac{d(F(q)P_{\text{sta}}(q))}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 P_{\text{sta}}(q)}{dq^2} = 0 .$$

Le problème est suffisamment simple pour permettre d'obtenir l'expression explicite de cette probabilité stationnaire en intégrant cette équation. Pour  $0 \leq q \leq 1$  cela donne

$$P_{\text{sta}}(q) = K \left[ \int_0^q \exp\left(\frac{2}{\epsilon} \int_{q'}^q F(q'') dq''\right) dq' + \int_q^1 \exp\left(\frac{2}{\epsilon} \int_{q'}^{q+1} F(q'') dq''\right) dq' \right]$$

où  $K$  est une constante de normalisation. A cause de la périodicité sur le cercle on a  $F(q+1) = F(q)$  et on peut facilement vérifier que  $P_{\text{sta}}(0) = P_{\text{sta}}(1)$ .

On voit, dans cet exemple simple de système hors d'équilibre, que, dans la limite d'un faible bruit, le quasi-potentiel peut ne pas être analytique en  $q$ , même quand la force  $F(q)$  l'est : selon les valeurs de  $q$  c'est l'un des deux termes de  $P_{\text{sta}}(q)$  qui domine pour  $\epsilon$  petit et les non-analyticités se produisent aux valeurs de  $q$  où le terme qui domine bascule [81].

Si on définit le pseudo-potentiel  $\tilde{\psi}(q)$  pour  $0 \leq q \leq 1$  et  $0 \leq q_0 \leq 1$

$$\tilde{\psi}(q) - \tilde{\psi}(q_0) = -2 \int_{q_0}^q F(q') dq'$$

on vérifie facilement que

$$\Delta \equiv \tilde{\psi}(0) - \tilde{\psi}(1) = 2 \int_0^1 F(q') dq' \neq 0$$

ce qui montre que  $\tilde{\psi}$  n'est pas le quasi-potentiel comme on peut le voir sur la figure 26.

On peut réécrire la mesure stationnaire

$$P_{\text{sta}}(q) = K \exp\left(-\frac{\tilde{\psi}(q)}{\epsilon}\right) \left[ \int_0^q \exp\left(\frac{\tilde{\psi}(q')}{\epsilon}\right) dq' + \exp\left(\frac{\Delta}{\epsilon}\right) \int_q^1 \exp\left(\frac{\tilde{\psi}(q')}{\epsilon}\right) dq' \right]$$

ce qui donne pour le quasi-potentiel comme sur la figure 26

$$\psi(q) = \tilde{\psi}(q) - \max \left[ \max_{0 < q' < q} [\tilde{\psi}(q')] , \Delta + \max_{q < q' < 1} [\tilde{\psi}(q')] \right] .$$

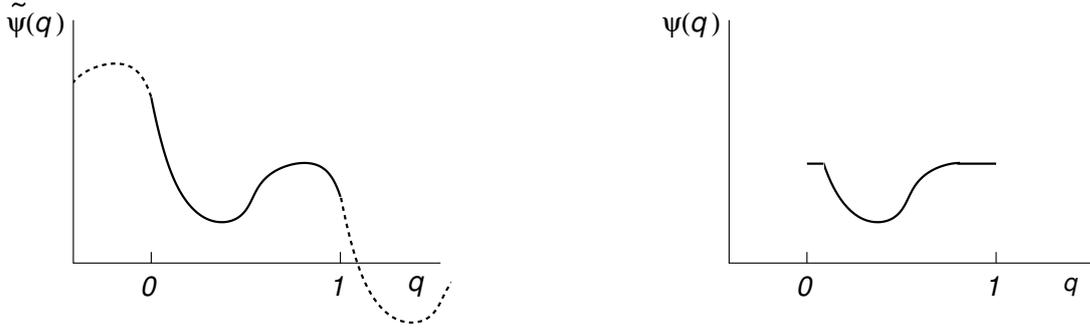


FIGURE 26: La forme du pseudo-potential  $\tilde{\psi}(q)$  à gauche et du quasi-potential  $\psi(q)$  à droite dans un cas où la force  $F(q)$  ne dérive pas d'un potentiel [81]

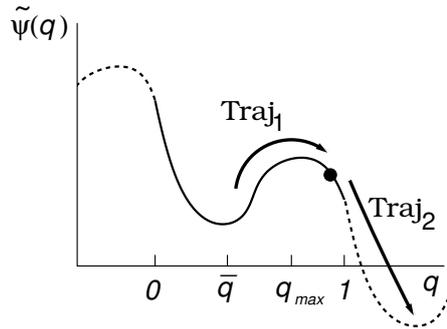


FIGURE 27: Quand la force ne dérive pas d'un potentiel, la trajectoire  $\text{Traj}_1$  qui conduit à une déviation peut différer de la trajectoire  $\text{Traj}_2$  le long de laquelle cette déviation relaxe. Contrairement au pseudo-potential  $\tilde{\psi}(q)$ , le quasi-potential  $\psi(q)$  est constant entre  $q_{\max}$  et  $q = 1$  comme on peut le voir sur la figure 26

Comme le système est hors d'équilibre les trajectoires  $\text{Traj}_1$  d'apparition et  $\text{Traj}_2$  de relaxation d'une déviation ne coïncident pas forcément (voir figure 27). On peut également comprendre les parties horizontales du quasi-potential sur la figure 26 : dans l'exemple de la figure 27, le quasi-potential est constant dans l'intervalle qui sépare le maximum  $q_{\max}$  de  $\tilde{\psi}(q)$  de  $q = 1$ . C'est simplement parce que le prix à payer pour atteindre n'importe quel point de cet intervalle est l'action du chemin optimal qui va de  $\bar{q}$  à  $q_{\max}$  (au delà de  $q_{\max}$ , la trajectoire optimale satisfait  $\dot{q} = F(q)$  et donc ne contribue pas à l'action).

### 11.5 L'équation de Hamilton Jacobi pour l'équation de Langevin

Pour simplifier la discussion on ne considère ici que le cas où l'équation de Langevin non bruitée n'a qu'un seul point fixe  $\bar{q}$  stable

$$F(\bar{q}) = 0 \quad ; \quad F'(\bar{q}) < 0 .$$

(La théorie de Freidlin Wentzell permet de traiter le cas de plusieurs points fixes stables [79]. On suppose aussi qu'il n'y a pas d'attracteur stable dépendant du temps comme par exemple un cycle limite).

Pour  $\epsilon$  petit la mesure stationnaire est de la forme

$$P(q) \sim \exp \left[ -\frac{\psi(q)}{\epsilon} \right].$$

Elle est dominée par la trajectoire qui va du point fixe stable  $\bar{q}$  au point  $q$  en minimisant l'action d'où

$$\psi(q) \sim \max_{\tau} \left[ \max_{\{q(\tau'), -\tau < \tau' < 0\}} \int_{-\tau}^0 \frac{(\dot{q} - F(q))^2}{2} d\tau' \right].$$

Comme on l'a fait dans la section 11.2, en isolant le dernier intervalle de temps  $d\tau$ , on peut écrire

$$\begin{aligned} \psi(q) &= \min_{q'} \left[ \psi(q') + \frac{(q - q' - F(q)\Delta t)^2}{2\Delta t} \right]. \\ &= \min_{\delta q} \left[ \psi(q - \delta q) + \frac{(\delta q - F(q)\Delta t)^2}{2\Delta t} \right] \\ &= \psi(q) + \frac{\Delta t}{2} \left[ \left( \frac{d\psi(q)}{dq} + F(q) \right)^2 - F(q)^2 \right] \end{aligned}$$

ce qui montre que le quasi-potentiel doit satisfaire pour tout  $q$  l'équation de Hamilton Jacobi

$$\boxed{\left( \frac{d\psi(q)}{dq} + F(q) \right)^2 - F(q)^2 = 0}.$$

Comme la valeur optimale de  $\delta q$  est

$$\delta q = \left( \frac{d\psi(q)}{dq} + F(q) \right) \Delta t$$

on en déduit que la trajectoire  $\text{Traj}_1$  qui conduit à une déviation est donnée par

$$\boxed{\dot{q} = \frac{d\psi(q)}{dq} + F(q)}.$$

*Remarque :* on a vu que quand la force dérive d'un potentiel  $U(q)$ , le quasi-potentiel est connu

$$F(q) = -\frac{dU(q)}{dq} \quad \Rightarrow \quad \psi(q) = 2(U(q) - U(\bar{q})).$$

La trajectoire  $\text{Traj}_1$  qui conduit à l'apparition d'une fluctuation devient alors

$$\dot{q} = \frac{d\psi(q)}{dq} + F(q) = -F(q).$$

C'est donc bien la renversée du temps de la trajectoire de relaxation  $\dot{q} = F(q)$ .

En dimension  $d > 1$ , l'équation de Hamilton Jacobi pour une dynamique

$$\frac{d\vec{q}}{dt} = \vec{F}(\vec{q}) + \vec{\eta}(t)$$

devient (quand les composantes du bruit blanc  $\vec{\eta}(t)$  sont non corrélées)

$$\boxed{\left(\vec{F}(\vec{q}) + \vec{\nabla}\psi(\vec{q})\right)^2 - \vec{F}(\vec{q})^2 = 0}$$

Cela permet de voir que des forces de la forme

$$\vec{F}(\vec{q}) = -\frac{1}{2} \vec{\nabla}(\psi(\vec{q})) + \lambda \vec{f}(\vec{q})$$

peuvent conduire à un même quasi-potentiel indépendant de  $\lambda$  lorsque

$$\vec{\nabla}\psi(\vec{q}) \cdot \vec{f}(\vec{q}) = 0 .$$

Par exemple on peut facilement vérifier que le quasi-potentiel est  $\psi(\vec{q}) = q_1^2 + q_2^2$  est le même pour toutes les forces

$$\vec{F}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} -q_1 + \lambda q_2 \\ -q_2 - \lambda q_1 \end{pmatrix}$$

ce qui donne pour la dynamique le long de la trajectoire  $\text{Traj}_1$  (celle qui conduit à une déviation)

$$\frac{d\vec{q}}{dt} = \begin{pmatrix} q_1 + \lambda q_2 \\ q_2 - \lambda q_1 \end{pmatrix} \neq -\vec{F}(\vec{q}) .$$

*Remarque* : l'équation de Hamilton Jacobi permet en principe de déterminer le quasi-potentiel (dans le cas où le seul attracteur est un point fixe stable  $\vec{q}$ ). Par exemple à partir du développement de  $\vec{F}(\vec{q})$  du développement autour du point fixe, on peut calculer le développement de  $\psi(\vec{q})$  autour de ce point fixe.

## 12 La théorie macroscopique des fluctuations [56, 82, 83, 84]

La théorie des fluctuations macroscopiques revient à répéter pour l'hydrodynamique fluctuante (voir section 9) ce que nous venons de faire dans le cas de la dynamique de Langevin. On a vu que l'hydrodynamique fluctuante s'écrit

$$j(x, \tau) \simeq -D(\rho(x, \tau)) \frac{d\rho(x, \tau)}{dx} + \eta(x, \tau)$$

$$\frac{d\rho(x, \tau)}{d\tau} = -\frac{dj(x, \tau)}{dx}$$

où le bruit  $\eta(x, \tau)$  vérifie

$$\langle \eta(x, \tau) \eta(x', \tau') \rangle = \frac{\sigma(\rho(x, \tau))}{L} \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') .$$

Une trajectoire est spécifiée par la donnée de deux champs, la densité et le courant,

$$\text{Traj} = \{\rho(x, \tau'), j(x, \tau') ; 0 < x < 1 , 0 < \tau' < \tau\}$$

et son poids (voir section 11.2) est donné par une action

$$\text{Prob}(\text{Traj}) \sim \exp \left[ -L \int_0^\tau d\tau \int_0^1 dx \frac{(j + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} \right] .$$

## 12.1 Le quasi-potentiel

Pour  $L$  grand, la probabilité d'observer un profil de densité  $\rho(x)$  est de la forme

$$P(\{\rho(x)\}) \sim e^{-L\mathcal{F}(\{\rho(x)\})}$$

où la fonctionnelle  $\mathcal{F}$  représente le quasi-potentiel.

Une façon de définir ce quasi-potentiel est de découper un système de longueur  $L$  en  $m$  intervalles de longueur  $\ell = \frac{L}{m}$ . Pour chaque configuration des particules à l'échelle microscopique, si on appelle  $N_1$  le nombre de particules dans le premier intervalle,  $\dots$ ,  $N_m$  le nombre de particules dans le  $m$ -ième intervalle, les densités  $\rho_i$  dans ces intervalles sont données par

$$\rho_1 = \frac{N_1}{\ell}, \quad \dots \quad \rho_m = \frac{N_m}{\ell}$$

et on s'attend à ce que

$$\text{Pro}(\rho_1, \dots, \rho_m) \sim e^{-L\mathcal{F}_m(\rho_1, \dots, \rho_m)}.$$

Cela définit ainsi la fonctionnelle  $\mathcal{F}(\{\rho(x)\})$  pour tout profil de densité constant par morceaux sur ces intervalles. En prenant  $m$  suffisamment grand (en gardant toujours  $\ell = L/m \gg 1$ ) on peut approximer tout profil de densité  $\rho(x)$  par une profil constant par morceaux et définir ainsi la fonctionnelle  $\mathcal{F}(\{\rho(x)\})$  pour n'importe quel profil  $\rho(x)$ .

*Remarque :*

Il est souvent plus commode d'introduire la fonction génératrice des nombres  $N_1, \dots, N_m$

$$\langle e^{\alpha_1 N_1 + \dots + \alpha_m N_m} \rangle = \int d\rho_1 \dots \int d\rho_m e^{\frac{L}{m}(\alpha_1 \rho_1 + \dots + \alpha_m \rho_m)} \text{Pro}(\rho_1, \dots, \rho_m) \equiv e^{L\mathcal{G}_m(\alpha_1, \dots, \alpha_m)}$$

où  $\mathcal{G}_m$  est la transformée de Legendre de la fonction de grande déviation  $\mathcal{F}_m$

$$\mathcal{G}_m(\alpha_1, \dots, \alpha_m) = \max_{q_1, \dots, q_m} \left[ \frac{1}{m} \sum_i \alpha_i q_i - \mathcal{F}_m(q_1, \dots, q_m) \right].$$

De la simple dépendance en  $L$  de la fonction génératrice, on peut voir que

$$\langle N_i N_j \rangle_c = L \frac{\partial^2 \mathcal{G}_m}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} \quad ; \quad \langle N_i N_j N_k \rangle_c = L \frac{\partial^3 \mathcal{G}_m}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j \partial \alpha_k} \quad \dots$$

On en déduit (à condition que  $\mathcal{G}$  soit suffisamment dérivable autour de  $\alpha_i = 0$ )

$$\langle \rho_i \rho_j \rangle_c = \frac{m^2}{L} \frac{\partial^2 \mathcal{G}_m}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j} \quad ; \quad \langle \rho_i \rho_j \rho_k \rangle_c = \frac{m^3}{L^2} \frac{\partial^3 \mathcal{G}_m}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j \partial \alpha_k} \quad \dots$$

Cela permet de comprendre, sans faire aucun calcul, la dépendance en  $L$  des fonctions de corrélations [57, 88] et généralise ce qu'on avait vu dans le cadre de l'hydrodynamique fluctuante dans la section 10 pour les corrélations à deux points

$$\langle \rho_i \rho_j \rangle_c \sim \frac{1}{L} \quad ; \quad \langle \rho_{i_1} \rho_{i_2} \dots \rho_{i_k} \rangle_c \sim \frac{1}{L^{k-1}}.$$

Dans la limite d'un grand nombre d'intervalles, pour un choix des  $\alpha_i$  lentement variables

$$\alpha_i = \alpha \left( \frac{i}{m} \right)$$

les fonctions  $\mathcal{F}_m$  et  $\mathcal{G}_m$  deviennent des fonctionnelles

$$\mathcal{F}_m(\rho_1, \dots, \rho_m) \rightarrow \mathcal{F}(\{\rho(x)\}) \quad ; \quad \mathcal{G}_m(\alpha_1, \dots, \alpha_m) \rightarrow \mathcal{G}(\{\alpha(x)\}) .$$

Les fonctions de corrélations de la densité dans le régime stationnaire sont alors données par les dérivées de  $\mathcal{G}$  en  $\alpha(x) = 0$

$$\langle \rho(x_1) \rho(x_2) \dots \rho(x_k) \rangle_c \simeq \frac{1}{L^{k-1}} \frac{\delta^k \mathcal{G}(\{\alpha(x)\})}{\delta \alpha(x_1) \dots \delta \alpha(x_k)} .$$

Sous cette forme on voit que l'existence de corrélations à longue portée signifie que les fonctionnelles  $\mathcal{F}(\{\rho(x)\})$  et  $\mathcal{G}(\{\alpha(x)\})$  sont non locales.

$$\boxed{\text{corrélations à longue portée} \iff \mathcal{F} \text{ et } \mathcal{G} \text{ non locales}}$$

## 12.2 La fonctionnelle de densité à l'équilibre

A l'équilibre, nous allons voir que la fonctionnelle de densité  $\mathcal{F}$  n'est rien d'autre que l'énergie libre.

A l'équilibre en l'absence de champ extérieur) le profil stationnaire est plat ( $\bar{\rho}(x) = \rho_a = \rho_b = \bar{\rho}$ ).

Si on découpe un système de longueur  $L$  en  $m$  intervalles de longueur  $\ell = L/m$  comme on l'a fait plus haut, la probabilité d'observer  $N_1$  particules dans le premier intervalle, ...  $N_m$  particules dans le  $m$ -ième intervalle est donnée par

$$\text{Pro}(N_1, \dots, N_m) \simeq \frac{1}{Z} Z_l(N_1) \dots Z_l(N_m) \exp \left[ \frac{\mu(\bar{\rho})}{kT} (N_1 + \dots + N_m) \right]$$

où  $\mu(\bar{\rho})$  est le potentiel chimique qui maintient le système en équilibre à la densité  $\bar{\rho}$ , les  $Z_l(N_i)$  sont les fonctions de partition de systèmes de longueur  $l$  contenant  $N_i$  particules (on a supposé les intervalles suffisamment grands pour pouvoir négliger les effets de bord entre intervalles successifs). Si on définit les densité  $\rho_i$  comme on l'a fait plus haut ( $N_i = \frac{L}{m} \rho_i$ ) et que l'on suppose que les intervalles  $\ell$  sont suffisamment grands pour que l'énergie libre sur chaque intervalle soit extensive

$$\log Z_l(N) \simeq -\frac{1}{kT} \frac{L}{m} f \left( \frac{N}{\ell} \right)$$

où  $f(\rho)$  est l'énergie libre par unité de volume à la densité  $\rho$  on voit que

$$\text{Pro}(N_1, \dots, N_m) \sim \frac{1}{Z} \exp \left[ \frac{L\mu}{kT} \left( \frac{1}{m} \sum_i \rho_i \right) - \frac{L}{kT} \left( \frac{1}{m} \sum_i f(\rho_i) \right) \right] .$$

Cela donne

$$\mathcal{F}_m(\rho_1, \dots, \rho_m) = \frac{1}{kT} \frac{1}{m} \sum_i f(\rho_i) - \mu \rho_i + \text{Constante}$$

où la constante (qui provient de la normalisation  $\log Z$ ) peut s'ajuster en disant que  $\mathcal{F}_m$  s'annule quand tous les  $\rho_i = \bar{\rho}$ . On en déduit que

$$\mathcal{F}_m(\rho_1, \dots, \rho_m) = \frac{1}{kT} \frac{1}{m} \sum_i f(\rho_i) - f(\bar{\rho}) - f'(\bar{\rho})(\rho_i - \bar{\rho})$$

où on a utilisé le fait que  $\mu = f'(\rho)$  (voir section 3). Dans la limite d'un grand nombre d'intervalles, cela donne

$$\boxed{\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = \frac{1}{kT} \int_0^1 [f(\rho(x)) - f(\bar{\rho}) - f'(\bar{\rho})(\rho(x) - \bar{\rho})] dx}.$$

On voit qu'à l'équilibre la fonctionnelle est locale, ce qui entraîne l'absence de corrélations à longue portée.

### 12.3 L'équation de Hamilton Jacobi pour les systèmes étendus [56]

Comme dans le cas de l'équation de Langevin dans la limite d'un faible bruit, le quasi-potentiel pour un profil  $\rho(x)$  donné est dominé (dans la limite d'un grand système) par la trajectoire qui part du profil stationnaire  $\bar{\rho}(x)$  et atteint le profil  $\rho(x)$  en minimisant l'action. Le profil  $\rho(x)$  est quelconque mais pour simplifier certains calculs qui suivent, on va supposer que

$$\rho(0) = \rho_a \quad ; \quad \rho(1) = \rho_b .$$

Le quasi-potentiel  $\mathcal{F}(\{\rho(x)\})$  (voir sections 11.5 et 12.1) doit donc vérifier

$$\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = \min_{\{\delta\rho(x)\}} \left[ \mathcal{F}(\{\rho - \delta\rho\}) + \Delta\tau \int_0^1 \frac{(j + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} dx \right]$$

ce qui donne en utilisant la loi de conservation

$$\delta\rho(x) = -\frac{dj}{dx} \Delta\tau$$

$$\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = \mathcal{F}(\{\rho(x)\}) + \Delta\tau \min_{\{\delta\rho(x)\}} \left[ \int_0^1 \left( \frac{dj}{dx} \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\rho(x)} + \frac{(j + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} \right) dx \right] .$$

Le terme proportionnel à  $\Delta t$  doit donc être nul. En faisant une intégration par parties (on peut montrer que le terme tout intégré est nul, mais pour cela il faut utiliser le fait que la loi de conservation  $\frac{d\rho}{d\tau} + \frac{dj}{dx}$  n'est pas satisfaite aux bords puisqu'il y a des échanges de particules avec les réservoirs; une autre façon de faire [85] est de se placer dans la limite où le couplage avec les réservoirs est faible, d'ordre  $1/L$ ) on obtient que

$$\min_{\{\delta\rho(x)\}} \left[ \int_0^1 \left( -j \frac{d}{dx} \left( \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\rho(x)} \right) + \frac{(j + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} \right) dx \right] = 0$$

ce qui donne, en optimisant sur  $j$ , l'équation de Hamilton Jacobi qui doit être vérifiée par le quasi-potentiel  $\mathcal{F}$  pour tout profil de densité  $\rho(x)$

$$\boxed{\int_0^1 dx \frac{1}{\sigma(\rho)} \left[ \left( D(\rho)\rho' - \sigma(\rho) \frac{d}{dx} \left( \frac{\delta\mathcal{F}}{\delta\rho(x)} \right) \right)^2 - (D(\rho)\rho')^2 \right] = 0}$$

avec pour  $j$  optimal ( $j$  est le courant le long de la trajectoire qui mène à la déviation)

$$j = -D(\rho) \rho' + \sigma(\rho) \frac{d}{dx} \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} \right)$$

La trajectoire optimale pour atteindre une déviation est donc la même que celle où, à chaque instant, on imposerait au système un champ  $E(x, t)$  supplémentaire

$$E(x, \tau) = \frac{d}{dx} \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} \right) \Big|_{\rho(x, \tau)} .$$

Pour le profil stationnaire  $\bar{\rho}(x)$ , le quasi-potentiel  $\mathcal{F}$  est maximum. Par conséquent

$$\mathcal{F}(\{\bar{\rho}(x)\}) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{d}{dx} \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} \right) \Big|_{\bar{\rho}(x)} = 0$$

En principe l'équation de Hamilton Jacobi permet de déterminer le quasi-potentiel  $\mathcal{F}$ . On peut essayer de développer  $\mathcal{F}$  en puissance de  $\rho(x) - \bar{\rho}(x)$  autour du profil stationnaire. Les calculs deviennent vite compliqués, mais on peut montrer [86] que l'on retrouve ainsi les équations satisfaites par les fonctions de corrélations que nous avons obtenues à partir de l'hydrodynamique fluctuante (voir section 10).

*Remarque* : On peut trouver des exemples où il y a deux ou plusieurs trajectoires optimales qui relient le profil stationnaire  $\bar{\rho}(x)$  à un profil donné  $\rho(x)$ . On peut observer alors des non-analyticités du quasi-potentiel quand les actions de ces différentes trajectoires se croisent [87].

*Remarque* : pour les systèmes à l'équilibre, la fonctionnelle est connue (voir section 12.2). On a

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} = \frac{f'(\rho(x)) - f'(\bar{\rho})}{kT}$$

et il est facile de vérifier en utilisant la relation (voir section 3)

$$D(\rho) = f''(\rho) \frac{\sigma(\rho)}{2kT}$$

que l'équation de Hamilton Jacobi est bien satisfaite.

*Remarque* : quand la mesure stationnaire est une mesure produit comme dans le cas marcheurs indépendants ou les "zero range processes", le quasi-potentiel  $\mathcal{F}$  est une fonctionnelle locale et on peut trouver son expression explicite : par exemple pour les marcheurs indépendants,

$$\mathcal{F} = \frac{1}{kT} \int_0^1 \left[ \rho(x) \log \left( \frac{\rho(x)}{\bar{\rho}(x)} \right) - \rho(x) + \bar{\rho}(x) \right] \quad \text{où} \quad \bar{\rho}(x) = \rho_a(1-x) + \rho_b x$$

on a

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} = \log \left( \frac{\rho(x)}{\bar{\rho}(x)} \right)$$

et en utilisant le fait que  $D = 1$  et que  $\sigma(\rho) = 2\rho$  on peut facilement vérifier que l'équation de Hamilton Jacobi est satisfaite (en utilisant  $\rho(0) = \bar{\rho}(0) = \rho_a$ ,  $\rho(1) = \bar{\rho}(1) = \rho_b$  et que  $\rho'(x) = \rho_b - \rho_a$ ). marcheurs indépendants ou les "zero range processes", le quasi-potentiel  $\mathcal{F}$  est une fonctionnelle locale et on peut trouver son expression explicite : par exemple pour les marcheurs indépendants,

## 12.4 Le modèle d'exclusion symétrique

Par contre quand la fonctionnelle  $\mathcal{F}$  est non locale, on n'a jusqu'à présent réussi à obtenir une expression explicite de  $\mathcal{F}$  que pour quelques modèles particuliers [89, 90, 91, 92, 93, 94]. Pour tous ces modèles solubles, les expressions de  $\mathcal{F}$  se ressemblent.

Pour le modèle d'exclusion symétrique il a été montré [89, 90] que

$$\mathcal{F}(\{\rho(x)\}) = \min_{\{F(x)\}} \int_0^1 \left[ B[\rho(x), F(x)] + \log \frac{F'(x)}{\rho_b - \rho_a} \right]$$

où  $B$  est la distribution de Bernoulli

$$B[\rho, F] = \rho \log \frac{\rho}{F} + (1 - \rho) \log \frac{1 - \rho}{1 - F}$$

et où il faut minimiser sur toutes les fonctions  $F(x)$  qui vérifient

$$F(x) \text{ monotone} \quad ; \quad F(0) = \rho_a \quad ; \quad F(1) = \rho_b .$$

Il est facile de voir que la fonction  $F$  qui réalise le minimum est la solution monotone de

$$\rho(x) = F + \frac{F(1 - F) F''}{F'^2}$$

avec comme conditions aux bords  $F(0) = \rho_a$  et  $F(1) = \rho_b$ .

On peut aussi se convaincre que l'expression de  $\mathcal{F}$  donne bien le quasi-potentiel en vérifiant que l'équation de Hamilton Jacobi est satisfaite. En effet

$$\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} = \log \frac{\rho(x)(1 - F(x))}{(1 - \rho(x))F(x)} = \log \left( 1 + \frac{F''(x)}{F'(x)^2 - F(x)F''(x)} \right)$$

et comme on sait que  $D = 1$  et que  $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$  (voir sections 7 et 8.1) on obtient, en remplaçant  $\rho(x)$  par son expression en termes de  $F$ , en remplaçant  $\rho(x)$  par son expression en termes de  $F$ , que

$$\begin{aligned} \int_0^1 \frac{1}{\sigma(\rho)} \left[ \left( D(\rho)\rho' - \sigma(\rho) \frac{d}{dx} \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} \right) \right)^2 - (D(\rho)\rho')^2 \right] dx &= -2 \int_0^1 \left( \frac{F''(x)}{F'(x)} \right)' dx \\ &= 2 \frac{F''(x)}{F'(x)} \Big|_{x=1}^{x=0} \\ &= 2 \frac{(\rho(x) - F(x))F'(x)}{F(x)(1 - F(x))} \Big|_{x=1}^{x=0} = 0 \end{aligned}$$

(car  $F(0) = \rho(0) = \rho_a$  et  $F(1) = \rho(1) = \rho_b$ ).

Le courant optimal qui aboutit à une déviation  $\rho(x)$  est

$$j = -D(\rho)\rho' + \sigma(\rho) \frac{d}{dx} \left( \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho(x)} \right) = -F'(x) - \frac{(1 - 2F(x))F''(x)}{F'(x)} + \frac{F(x)(1 - F(x))F'''(x)}{F'(x)^2}$$

ce qui donne

$$-\frac{dj}{dx} = -F''(x) - \frac{(1 - 2F(x))F''(x)^2}{F'(x)^2} + 2 \frac{F(x)(1 - F(x))F''(x)}{F'(x)^3} F^{(3)}(x) - \frac{F(x)(1 - F(x))}{F'(x)^2} F^{(4)}(x)$$

et en utilisant la loi de conservation

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -\frac{dj}{dx}$$

on voit que la dynamique de la fonction  $F(x)$  associée à un profil  $\rho(x)$  (le long de la trajectoire  $\text{Traj}_1$ ) est

$$\frac{dF}{d\tau} = -\frac{d^2F}{dx^2} .$$

On en déduit que

$$F(x) \rightarrow \rho_a(1-x) + \rho_b x \quad \text{quand } \tau \rightarrow -\infty$$

Cela permet ainsi de décrire toute la trajectoire  $\hat{\rho}(x, \tau)$  qui mène à une déviation  $\rho(x)$  : on calcule  $F(x)$  à  $\tau = 0$  comme solution de

$$\rho(x) = F + \frac{F(1-F)F''}{F'^2} ,$$

on en déduit  $\hat{F}(x, \tau)$  pour  $\tau < 0$  en intégrant

$$\frac{d\hat{F}}{d\tau} = -\frac{d^2\hat{F}}{dx^2}$$

avec comme condition initiale  $\hat{F}(x, 0) = F(x)$ . et on obtient le profil  $\hat{\rho}(x, \tau)$  en utilisant une nouvelle fois la relation entre  $\rho$  et  $F$ .

*Remarque* : pour  $\rho_a - \rho_b$  petit, on peut résoudre perturbativement l'équation différentielle qui relie  $F(x)$  et  $\rho(x)$ . Au deuxième ordre en  $\rho_a - \rho_b$  on obtient

$$F(x) = \bar{\rho}(x) - \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{\rho_a(1 - \rho_a)} \left[ (1-x) \int_0^x y (\rho(y) - \bar{\rho}(y)) dy + x \int_x^1 (1-y) (\rho(y) - \bar{\rho}(y)) dy \right] .$$

ce qui donne pour le quasi-potentiel

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\{\rho(x)\}) &= \int_0^1 B(\rho(x), \bar{\rho}(x)) dx \\ &+ \frac{(\rho_a - \rho_b)^2}{[\rho_a(1 - \rho_a)]^2} \int_0^1 dx \int_x^1 dy \left[ x(1-y)(\rho(x) - \bar{\rho}(x))(\rho(y) - \bar{\rho}(y)) \right] + O(\rho_a - \rho_b)^3 \end{aligned}$$

Sous cette forme, on voit bien le caractère non local du quasi-potentiel quand  $\rho_a \neq \rho_b$ .

### 13 La méthode matricielle pour l'exclusion symétrique

Pour obtenir l'expression du quasi-potentiel  $\mathcal{F}$  pour le modèle d'exclusion, on peut partir de la connaissance de la mesure stationnaire du modèle microscopique. Le modèle d'exclusion symétrique est en effet un des rares modèles pour lesquels on connaît cette mesure stationnaire. Une façon de l'écrire est d'utiliser la méthode matricielle [60] qui s'inspire de la construction des états propres pour des chaînes de spins quantiques [95, 96, 97].

### 13.1 Les poids dans l'approche matricielle

L'approche matricielle consiste à montrer que les poids des configurations dans le régime stationnaire sont exactement donnés par l'élément d'un produit matriciel qu'on peut écrire sous la forme [60]

$$P_{\text{sta}}(n_1, n_2 \cdots n_L) = \frac{\langle W | X_1 X_2 \cdots X_L | V \rangle}{Z_L}$$

où les matrices  $X_i$  dépendent des nombres d'occupation  $n_i$  des sites  $i$

$$X_i = n_i D + (1 - n_i) E ,$$

les matrices  $D$  et  $E$  et les vecteurs  $\langle W |, |V \rangle$  satisfont the règles algébriques suivantes

$$\begin{cases} DE - ED = D + E \\ \langle W | [\alpha E - \gamma D] = \langle W | \\ [\beta D - \delta E] |V \rangle = |V \rangle \end{cases}$$

et  $Z_L$  est un facteur de normalisation. Si les poids sont de cette forme, il est facile de voir, en sommant sur toutes les configurations, que la normalisation est  $Z_L = \langle \rho_a | (D + E)^L | \rho_b \rangle$  et donc que les poids sont donnés par

$$P_{\text{sta}}(n_1, n_2 \cdots n_L) = \frac{\langle W | X_1 X_2 \cdots X_L | V \rangle}{\langle W | (D + E)^L | V \rangle} .$$

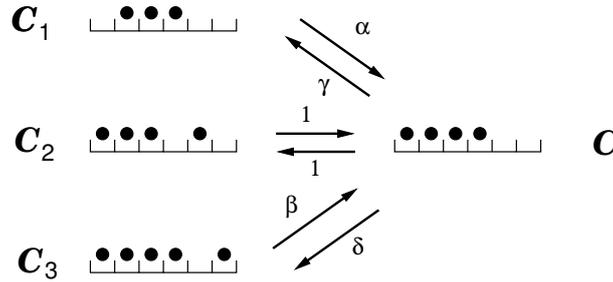


FIGURE 28: Les trois configurations  $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2$  et  $\mathcal{C}_3$  directement reliées par la dynamique à la configuration  $\mathcal{C}$

Il reste à se convaincre que les poids ainsi donnés sont bien ceux de l'état stationnaire. Pour le vérifier prenons l'exemple d'une configuration  $\mathcal{C}$  dont les  $p$  premiers sites sont occupés et  $L - p$  sites restants sont vides comme sur la figure 28. Le poids de cette configuration est donné par

$$P_{\text{sta}}(\mathcal{C}) = \frac{\langle W | D^p E^{L-p} | V \rangle}{\langle W | (D + E)^L | V \rangle} .$$

Les seules configurations directement reliées à cette configurations  $\mathcal{C}$  par la dynamique sont les configurations  $\mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2, \mathcal{C}_3$  de la figure 28. Pour montrer que l'approche matricielle donne bien les poids du régime stationnaire il faut vérifier que

$$\alpha P_{\text{sta}}(\mathcal{C}_1) + P_{\text{sta}}(\mathcal{C}_2) + \beta P_{\text{sta}}(\mathcal{C}_3) - (\gamma + 1 + \delta) P_{\text{sta}}(\mathcal{C}) \stackrel{?}{=} 0$$

En utilisant les règles algébriques, on peut facilement montrer que

$$\begin{aligned}\alpha P_{\text{sta}}(\mathcal{C}_1) - \gamma P_{\text{sta}}(\mathcal{C}) &= \alpha \frac{\langle W|ED^{p-1}E^{L-p}|V\rangle}{\langle W|(D+E)^L|V\rangle} - \gamma \frac{\langle W|D^pE^{L-p}|V\rangle}{\langle W|(D+E)^L|V\rangle} \\ &= \frac{\langle W|(\alpha E - \gamma D)D^{p-1}E^{L-p}|V\rangle}{\langle W|(D+E)^L|V\rangle} \\ &= \frac{\langle W|D^{p-1}E^{L-p}|V\rangle}{\langle W|(D+E)^L|V\rangle}\end{aligned}$$

De même on a

$$P_{\text{sta}}(\mathcal{C}_2) - P_{\text{sta}}(\mathcal{C}) = -\frac{\langle W|D^{p-1}(D+E)E^{L-p-1}|V\rangle}{\langle W|(D+E)^L|V\rangle}$$

et

$$\beta P_{\text{sta}}(\mathcal{C}_3) - \delta P_{\text{sta}}(\mathcal{C}) = \frac{\langle W|D^pE^{L-p-1}|V\rangle}{\langle W|(D+E)^L|V\rangle}$$

et la somme de ces trois contributions est clairement nulle.

Un raisonnement semblable peut être fait pour tout autre choix de la configuration  $\mathcal{C}$  et donc les poids donnés par l'approche matricielle sont bien les poids du régime stationnaire.

### 13.2 Comment calculer avec la méthode matricielle

A priori pour connaître les poids des configurations il faudrait construire les matrices  $D$  et  $E$  et les vecteurs  $\langle W|$  and  $|V\rangle$  qui satisfont des règles algébriques de la section 13.1. En réalité on peut calculer les poids directement à partir des règles algébriques sans faire appel à une représentation particulière des matrices et des vecteurs. On peut s'en convaincre facilement dans le cas où  $\gamma = \delta = 0$ . On a alors

$$\langle W|E = \frac{1}{\alpha} \langle W| \quad ; \quad D|V\rangle = \frac{1}{\beta} |V\rangle$$

ce qui donne immédiatement

$$\langle W|E^p D^q |V\rangle = \left(\frac{1}{\alpha}\right)^p \left(\frac{1}{\beta}\right)^q \langle W|V\rangle$$

Pour tous les autres produits de  $D$  et de  $E$  on peut pousser tous les  $D$  vers la droite en utilisant

$$DE - ED = D + E .$$

Ainsi

$$\begin{aligned}\langle W|E^3 DE^2 |V\rangle &= \langle W|E^4 DE + E^3(D+E)E|V\rangle \\ &\quad \vdots \\ &= \langle W|(E^5 D + 2E^4 D + E^3 D + 2E^5 + E^4)|V\rangle \\ &= \left(\frac{1}{\alpha^5 \beta} + \frac{2}{\alpha^4 \beta} + \frac{1}{\alpha^3 \beta} + \frac{2}{\alpha^5} + \frac{1}{\alpha^4}\right) \langle W|V\rangle\end{aligned}$$

Dans le cas général ( $\gamma \neq 0$  et  $\delta \neq 0$ ) on peut faire de même en introduisant deux matrices  $A$  et  $B$

$$\begin{aligned}A &= \beta D - \delta E \\ B &= \alpha E - \gamma D .\end{aligned}$$

Ces matrices satisfont

$$AB - BA = (\alpha\beta - \gamma\delta)(D + E) = (\alpha + \delta)A + (\beta + \gamma)B .$$

N'importe quel produit de  $D$  et de  $E$  peut s'écrire comme une somme de produits de  $A$  et de  $B$  que l'on peut ordonner en poussant tous les  $A$  vers la droite et tous les  $B$  vers la gauche. On obtient ainsi une somme de termes de la forme  $B^p A^q$  dont l'élément de matrice est simplement

$$\langle W|B^p A^q|V\rangle = \langle W|V\rangle .$$

### 13.3 Le profil stationnaire, le courant et la normalisation

A partir des poids sous la forme matricielle il est facile de voir que

$$\langle n_i \rangle = \frac{\langle W|(D + E)^{i-1} D (D + E)^{L-i}|V\rangle}{\langle W|(D + E)^L|V\rangle}$$

$$\langle n_i n_j \rangle = \frac{\langle W|(D + E)^{i-1} D (D + E)^{j-i-1} D (D + E)^{L-j}|V\rangle}{\langle W|(D + E)^L|V\rangle} .$$

On vérifie ainsi facilement que

$$\begin{aligned} \langle n_i n_j \rangle - \langle n_i n_{j+1} \rangle &= \frac{\langle W|(D + E)^{i-1} D (D + E)^{j-i-1} (DE - ED) (D + E)^{L-j-1}|V\rangle}{\langle W|(D + E)^L|V\rangle} \\ &= \frac{\langle W|(D + E)^{i-1} D (D + E)^{L-i-1}|V\rangle}{\langle W|(D + E)^L|V\rangle} \end{aligned}$$

ce qui montre que  $\langle n_i n_j \rangle$  est une fonction linéaire de  $j$  (pour une raison semblable c'est aussi une fonction linéaire de  $i$ ) comme on l'avait vu dans la section 10.

On obtient aussi pour le courant moyen dans le régime stationnaire

$$\langle J \rangle = \langle n_i \rangle - \langle n_{i+1} \rangle = \frac{\langle W|(D + E)^{i-1} (DE - ED) (D + E)^{L-i-1}|V\rangle}{\langle W|(D + E)^L|V\rangle} = \frac{\langle W|(D + E)^{L-1}|V\rangle}{\langle W|(D + E)^L|V\rangle}$$

(on peut noter qu'évidemment dans le régime stationnaire le courant ne dépend de  $i$ ).

### 13.4 L'additivité pour la fonction de grandes déviations de la densité [57, 89, 90]

L'idée de l'additivité est d'essayer de relier la probabilité  $P_L(\rho(x)|\rho_a, \rho_b)$  d'observer un profil  $\rho(x)$  pour un système de taille  $L$  à celles d'observer des parties de ce profil pour des systèmes de taille  $L_1$  et  $L - L_1$  comme sur la figure 29.

On va voir en effet que pour  $L$  grand on peut trouver un  $F$  (qui dépend du profil  $\rho(x)$ , des densités  $\rho_a$  et  $\rho_b$  des réservoirs et du rapport  $L_1/L$ ) tel que

$$\boxed{P_L(\rho(x)|\rho_a, \rho_b) \sim P_{L_1}(\rho_1(x)|\rho_a, F) \times P_{L-L_1}(\rho_2(x)|F, \rho_b)}$$

Pour légèrement simplifier les calculs qui vont suivre, il est préférable de choisir pour les taux les expressions indiquées sur la figure 30

$$\alpha = 2\rho_a \quad , \quad \gamma = 2(1 - \rho_a) \quad , \quad \beta = 2(1 - \rho_b) \quad , \quad \delta = 2\rho_b .$$

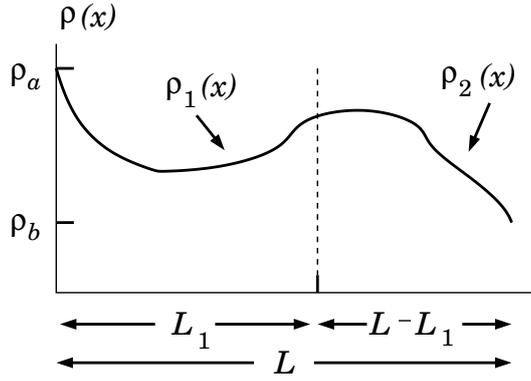


FIGURE 29: L'idée de l'additivité est d'essayer de relier la probabilité d'observer un profil pour un système de taille  $L$  à celles d'observer des parties de ce profil pour des sous-systèmes de tailles  $L_1$  et  $L - L_1$

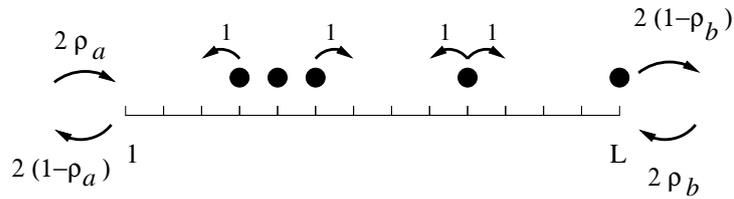


FIGURE 30: Le modèle d'exclusion symétrique comme sur la figure 17. Ici pour légèrement simplifier les calculs, on prend  $\alpha = 2\rho_a, \gamma = 2(1 - \rho_a), \beta = 2(1 - \rho_b), \delta = 2\rho_b$

A partir de ces taux on peut écrire l'évolution de l'occupation moyenne  $\langle n_i \rangle$  de chaque site  $i$  ( $n_i = 1$  quand le site  $i$  est occupé et  $n_i = 0$  quand il est vide)

$$\begin{aligned} \frac{d\langle n_1 \rangle}{dt} &= 2\rho_a - 3\langle n_1 \rangle + \langle n_2 \rangle \\ \frac{d\langle n_i \rangle}{dt} &= \langle n_{i-1} \rangle - 2\langle n_i \rangle + \langle n_{i+1} \rangle \quad \text{pour } 2 \leq i \leq L-1 \\ \frac{d\langle n_L \rangle}{dt} &= \langle n_{L-1} \rangle - 3\langle n_L \rangle + 2\rho_b . \end{aligned}$$

Le profil stationnaire (obtenu en écrivant  $\frac{d\langle n_i \rangle}{dt} = 0$ ) est

$$\langle n_i \rangle = \frac{(2L - 2i + 1)\rho_a + (2i - 1)\rho_b}{2L}$$

et le courant stationnaire est

$$\langle J \rangle = \langle n_i \rangle - \langle n_{i+1} \rangle = \frac{\rho_a - \rho_b}{L} .$$

Pour  $L$  grand on retrouve le profil macroscopique  $\bar{\rho}(x)$  (voir section 10).

En pratique il est commode de définir des vecteurs propres  $|\rho\rangle$  et  $\langle \rho|$  à droite et à gauche qui vérifient

$$\begin{aligned} \langle \rho| 2[\rho E - (1 - \rho)D] &= \langle \rho| \\ 2[(1 - \rho)D - \rho E] |\rho\rangle &= |\rho\rangle \end{aligned}$$

(avec cette définition on peut noter qu'en général  $\langle \rho | \rho' \rangle \neq 0$ ). On a évidemment

$$\langle W | = \langle \rho_a | \quad ; \quad |V\rangle = |\rho_b\rangle$$

et donc les règles algébriques s'écrivent dorénavant

$$\begin{aligned} DE - ED &= D + E \\ \langle \rho_a | 2 [\rho_a E - (1 - \rho_a) D] &= \langle \rho_a | \\ 2 [(1 - \rho_b) D - \rho_b E] | \rho_b \rangle &= |\rho_b \rangle . \end{aligned}$$

L'additivité (pour  $\rho_a > \rho_b$ ) peut se comprendre à partir d'une identité vérifiée par des polynômes arbitraires  $Y_1$  et  $Y_2$  des matrices  $D$  et  $E$

$$\boxed{\frac{\langle \rho_a | Y_1 Y_2 | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle} = \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{(\rho_a - \rho_b)}{(\rho_a - \rho)(\rho - \rho_b)} \frac{\langle \rho_a | Y_1 | \rho \rangle}{\langle \rho_a | \rho \rangle} \frac{\langle \rho | Y_2 | \rho_b \rangle}{\langle \rho | \rho_b \rangle}}$$

où le contour d'intégration est un cercle dans le plan complexe (comme tous les éléments de matrices  $\frac{\langle \rho_a | Y_1 | \rho \rangle}{\langle \rho_a | \rho \rangle}$  ou  $\frac{\langle \rho | Y_2 | \rho_b \rangle}{\langle \rho | \rho_b \rangle}$  sont des polynômes en  $\rho$ , la définition de ces éléments de matrices pour des valeurs complexes de  $\rho$  ne pose aucune difficulté).

Cette relation ressemble à ce qu'on fait en mécanique quantique quand on introduit une base complète. Elle est vraie quelque soit la taille du système. Pour la démontrer il suffit de la vérifier pour des  $Y_1$  des des  $Y_2$  de la forme

$$Y_1 = [\rho_a E - (1 - \rho_a) D]^{n_1} [D + E]^{n_1} \quad ; \quad Y_2 = [D + E]^{n_2} [(1 - \rho_b) D - \rho_b E]^{n_2}$$

car on peut montrer, toujours en utilisant les règles de commutation du type  $DE - ED = D + E$ , que tout produit de  $D$  et de  $E$  peut s'écrire sous la forme d'une somme de terme de type  $Y_1$  ou de termes du type  $Y_2$ .

Après simplification, on réalise qu'il suffit au bout du compte de vérifier que

$$\boxed{\frac{\langle \rho_a | (D + E)^{n_1 + n_2} | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle} \stackrel{?}{=} \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{(\rho_a - \rho_b)}{(\rho_a - \rho)(\rho - \rho_b)} \frac{\langle \rho_a | (D + E)^{n_1} | \rho \rangle}{\langle \rho_a | \rho \rangle} \frac{\langle \rho | (D + E)^{n_2} | \rho_b \rangle}{\langle \rho | \rho_b \rangle}} .$$

On a vu (voir section 13.3 et le début de 13.4) que pour un système de longueur  $L$  le courant moyen dans le régime stationnaire est donné par

$$\langle J \rangle = \frac{\rho_a - \rho_b}{L} = \frac{\langle \rho_a | (D + E)^{L-1} | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | (D + E)^L | \rho_b \rangle} .$$

On en déduit que

$$\frac{\langle \rho_a | (D + E)^L | \rho_b \rangle}{\langle \rho_a | \rho_b \rangle} = \frac{L!}{(\rho_a - \rho_b)^L} .$$

et la relation à vérifier peut donc s'écrire

$$\frac{(n_1 + n_2)!}{(\rho_a - \rho_b)^{n_1 + n_2}} \stackrel{?}{=} \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{(\rho_a - \rho_b)}{(\rho_a - \rho)(\rho - \rho_b)} \frac{n_1!}{(\rho_a - \rho)^{n_1}} \frac{n_2!}{(\rho - \rho_b)^{n_2}} .$$

Cette dernière identité est facile à établir en utilisant le théorème des résidus ou des intégrations par parties.

### 13.5 Le quasi-potentiel

En choisissant pour  $Y_1$  la somme des poids de toutes les configurations avec  $lr_1$  sites occupés dans le premier intervalle de  $l$  sites,  $lr_k$  sites occupés dans le  $k$ -ième intervalle, et pour  $Y_2$  celle des configurations avec  $lr_{k+1}$  sites occupés dans le  $k + 1$ -ième intervalle, ...  $lr_m$  sites occupés dans le  $m$ -ième intervalle (comme sur la figure 31, on a en utilisant l'additivité (voir section 13.4)

$$\text{Pro}_L(r_1, \dots, r_m | \rho_a, \rho_b) = \oint_{\rho_b < |\rho| < \rho_a} \frac{d\rho}{2i\pi} \frac{L_1! (L - L_1)!}{L!} \frac{(\rho_a - \rho_b)^{L+1}}{(\rho_a - \rho)^{L_1+1} (\rho - \rho_b)^{L-L_1+1}} \times \\ \text{Pro}_{L_1}(r_1, \dots, r_k | \rho_a, \rho) \times \text{Pro}_{L-L_1}(r_{k+1}, \dots, r_m | \rho, \rho_b)$$

où  $L_1 = kl$  et  $L = ml$ . Pour  $L$  grand et  $L_1 = Lx$ , si

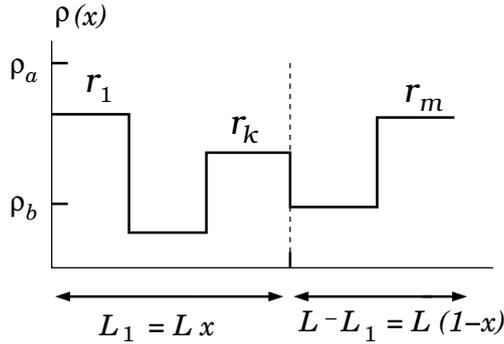


FIGURE 31: Un profil de densité constant par morceaux

$$\text{Pro}_L(r_1, \dots, r_m | \rho_a, \rho_b) \sim e^{-L \mathcal{F}_m(r_1, \dots, r_m | \rho_a, \rho_b)} .$$

on peut utiliser la méthode du col et on obtient

$$\mathcal{F}_m(r_1, r_2, \dots, r_m | \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho_b < F < \rho_a} \left[ x \mathcal{F}_k(r_1, \dots, r_k | \rho_a, F) + (1-x) \mathcal{F}_{m-k}(r_{k+1}, \dots, r_m | F, \rho_b) \right. \\ \left. + x \log \left( \frac{\rho_a - F}{x} \right) + (1-x) \log \left( \frac{F - \rho_b}{1-x} \right) - \log(\rho_a - \rho_b) \right]$$

Le col se situe entre  $\rho_b$  et  $\rho_a$ . Comme le contour d'intégration au niveau du col est perpendiculaire à l'axe réel, la valeur  $F$  de  $\rho$  qui rend l'intégrand maximum le long du contour devient un minimum quand  $\rho$  varie le long de l'axe réel.

Si on répète cette procédure  $m$  fois, on obtient

$$\mathcal{F}_m(r_1, r_2, \dots, r_m | \rho_a, \rho_b) = \max_{\rho_a = F_0 > \dots > F_k > \dots > F_m = \rho_b} \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m \mathcal{F}_1(r_k | F_{k-1}, F_k) + \log \left( \frac{(F_{k-1} - F_k)m}{\rho_a - \rho_b} \right)$$

Pour  $m$ , comme  $F_k$  est monotone, la différence  $F_{k-1} - F_k$  est petite pour presque tous les  $k$  et on peut remplacer  $\mathcal{F}_1(r_k | F_{k-1}, F_k)$  par sa valeur d'équilibre

$$\mathcal{F}_1(r_k | F_k, F_k) = B(r_k, F_k)$$

(voir section 12.4) et  $F_k$  devient une fonction of  $k/m$

$$F_k = F\left(\frac{k}{m}\right)$$

et l'on obtient ainsi

$$\mathcal{F}(\{\rho(x)\}|\rho_a, \rho_b) = \max_{F(x)} \int_0^1 dx \left[ B(\rho(x), F(x)) + \log \frac{F'(x)}{\rho_b - \rho_a} \right]$$

où le maximum est sur toutes les fonctions  $F(x)$  monotones qui satisfont  $F(0) = \rho_a$  and  $F(1) = \rho_b$ , comme annoncé au début de la section 12.4.

## COURS 6

Ce dernier cours est consacré aux grandes déviations relatives à des mesures empiriques telles qu'elles ont été définies dans la section 9.3. Nous allons commencer avec les processus de Markov et l'équation de Langevin avant d'aborder la question des grandes déviations de courant pour les systèmes diffusifs étendus.

### 14 Le cas d'une mesure empirique pour un processus de Markov

Considérons un processus de Markov [98, ?] (irréductible et avec un nombre fini d'états) en temps continu ( $\mathcal{M}(\mathcal{C}', \mathcal{C})dt$  est la probabilité de sauter de la configuration  $\mathcal{C}$  à la configuration  $\mathcal{C}'$  pendant un intervalle de temps infinitésimal  $dt$ ). Si on observe ce processus de Markov pendant une fenêtre de temps  $t$ , on peut mesurer une quantité  $Q_t$  définie par

$$Q_t = \sum_{\mathcal{C}} \alpha(\mathcal{C}) \tau_t(\mathcal{C}) + \sum_{\mathcal{C}, \mathcal{C}'} \beta(\mathcal{C}', \mathcal{C}) n_t(\mathcal{C}', \mathcal{C})$$

où  $\tau_t(\mathcal{C})$  est le temps passé dans la configuration  $\mathcal{C}$  et  $n_t(\mathcal{C}', \mathcal{C})$  est le nombre de transitions de  $\mathcal{C}$  vers  $\mathcal{C}'$  pendant le temps  $t$ . Ici les  $\alpha(\mathcal{C})$  et les  $\beta(\mathcal{C}', \mathcal{C})$  sont donnés.

Si  $P_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C})$  est la probabilité que  $Q_t = Q$  et que  $\mathcal{C}_t = \mathcal{C}'$  conditionnée à ce que  $\mathcal{C}_0 = \mathcal{C}$  on peut vérifier (en découpant l'intervalle de temps  $t + dt$  en deux intervalles de durées  $t$  et  $dt$  avec l'intervalle  $dt$  soit au début soit à la fin) que

$$\frac{dP_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C})}{dt} = -\alpha(\mathcal{C}) \frac{dP_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C})}{dQ} + \sum_{\mathcal{C}'' \neq \mathcal{C}} \left[ P_t(Q - \beta(\mathcal{C}'', \mathcal{C}), \mathcal{C}' | \mathcal{C}'') \mathcal{M}(\mathcal{C}'', \mathcal{C}) - P_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C}) \mathcal{M}(\mathcal{C}'', \mathcal{C}) \right]$$

et que

$$\frac{dP_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C})}{dt} = -\alpha(\mathcal{C}') \frac{dP_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C})}{dQ} + \sum_{\mathcal{C}'' \neq \mathcal{C}'} \left[ \mathcal{M}(\mathcal{C}', \mathcal{C}'') P_t(Q - \beta(\mathcal{C}', \mathcal{C}''), \mathcal{C}'' | \mathcal{C}) - \mathcal{M}(\mathcal{C}'', \mathcal{C}') P_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C}) \right].$$

Si on introduit les fonctions génératrices de ces probabilités,

$$R_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) = \int dQ P_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C}) e^{\lambda Q}$$

ces deux relations deviennent

$$\frac{dR_t(\mathcal{C}', \mathcal{C})}{dt} = \lambda \alpha(\mathcal{C}) R_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) + \sum_{\mathcal{C}'' \neq \mathcal{C}} \left[ R_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}'') e^{\lambda \beta(\mathcal{C}'', \mathcal{C})} \mathcal{M}(\mathcal{C}'', \mathcal{C}) - R_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) \mathcal{M}(\mathcal{C}'', \mathcal{C}) \right]$$

et

$$\frac{dR_t(\mathcal{C}', \mathcal{C})}{dt} = \lambda \alpha(\mathcal{C}') R_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) + \sum_{\mathcal{C}'' \neq \mathcal{C}'} \left[ e^{\lambda \beta(\mathcal{C}', \mathcal{C}'')} \mathcal{M}(\mathcal{C}', \mathcal{C}'') R_t(\mathcal{C}'', \mathcal{C}) - \mathcal{M}(\mathcal{C}'', \mathcal{C}') R_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) \right].$$

Sous cette forme on voit que dans la limite des temps longs

$$R_t(\mathcal{C}', \mathcal{C}) \simeq r_\lambda(\mathcal{C}') e^{\mu(\lambda)t} \ell_\lambda(\mathcal{C})$$

où  $\mu(\lambda)$ ,  $r_\lambda(\mathcal{C})$  et  $\ell_\lambda(\mathcal{C})$  sont la plus grande valeur propre (la valeur propre qui a la plus grande partie réelle) et les vecteurs propres à droite et à gauche associés (convenablement normalisés) de la matrice  $\mathcal{N}$

$$\mathcal{N}(\mathcal{C}', \mathcal{C}) = e^{\beta(\mathcal{C}', \mathcal{C})} M(\mathcal{C}', \mathcal{C}) \left(1 - \delta_{\mathcal{C}', \mathcal{C}}\right) + \left[ \lambda \alpha(\mathcal{C}') - \sum_{\mathcal{C}'' \neq \mathcal{C}} M(\mathcal{C}'', \mathcal{C}) \right] \delta_{\mathcal{C}', \mathcal{C}} .$$

Dans la limite des temps longs, cela permet, en revenant à la probabilité  $P_t(Q, \mathcal{C}' | \mathcal{C})$ , d'obtenir

$$P_t(Q = qt, \mathcal{C}' | \mathcal{C}) \simeq r_\lambda(\mathcal{C}') \exp[-\phi(q) t] l_\lambda(\mathcal{C})$$

où  $\phi(q)$  est la transformée de Legendre de la valeur propre  $\mu(\lambda)$  de la matrice  $\mathcal{N}$

$$\phi(q) = \lambda \frac{d\mu(\lambda)}{d\lambda} - \mu(\lambda) .$$

Pour un système qui possède un temps  $\tau$  de relaxation fini comme le processus de Markov que nous considérons ici, la fonction  $\phi$  possède les deux propriétés suivantes :

1.  $\phi(q)$  ne dépend pas des configurations initiale  $\mathcal{C}$  et finale  $\mathcal{C}'$

$$P_t(Q = qt, \mathcal{C}' | \mathcal{C}) \simeq r_q(\mathcal{C}') \exp[-\phi(q) t] l_q(\mathcal{C})$$

(par abus de langage l'indice  $\lambda$  des vecteurs propres est remplacé ici par  $q$  puisqu'on peut passer facilement de  $\lambda$  à  $q$  par une transformation de Legendre).

2.  $\phi(q)$  est une fonction convexe.

En effet en choisissant  $Q_t = (\alpha q' + (1 - \alpha) q'') t$  et  $Q' = \alpha q' t$  avec  $0 \leq \alpha \leq 1$

$$P_t(Q_t, \mathcal{C}' | \mathcal{C}) = \int dQ' \sum_{\mathcal{C}''} P_{\alpha t}(Q', \mathcal{C}' | \mathcal{C}'') P_{(1-\alpha)t}(Q_t - Q', \mathcal{C}'' | \mathcal{C}) .$$

et en se plaçant dans la limite des temps longs cela implique

$$\exp[-\phi(\alpha q' + (1 - \alpha) q'') t] \gtrsim \exp[-\phi(q') \alpha t] \times \exp[-\phi(q'') (1 - \alpha) t]$$

ce qui montre la convexité de la fonction de grande déviation  $\phi(q)$

$$\boxed{\phi(\alpha q' + (1 - \alpha) q'') \leq \alpha \phi(q') + (1 - \alpha) \phi(q'')} .$$

*Remarque* : on peut chercher à savoir à quoi ressemble le système quand on le conditionne à une certaine valeur de  $Q_t$ . Si la fenêtre de temps  $t$  est longue et si on choisit un temps  $\tau$  suffisamment loin des bords de cette fenêtre on peut montrer [85] assez facilement, que la probabilité d'observer une configuration  $\mathcal{C}$  au temps  $\tau$  est donnée par

$$\boxed{\mathcal{P}_\tau(\mathcal{C} | Q_t = qt) = \frac{\ell_q(\mathcal{C}) r_q(\mathcal{C})}{\sum_{\mathcal{C}'} \ell_q(\mathcal{C}') r_q(\mathcal{C}')} .}$$

En effet dans ce cas si on considère une longue fenêtre de temps  $t$  et si on fixe les configurations  $\mathcal{C}_0$  et  $\mathcal{C}_t$  on a

$$\mathcal{P}_\tau(\mathcal{C} | Q_t = qt) = \frac{1}{Z} \int dQ_\tau P_\tau(Q_\tau, \mathcal{C} | \mathcal{C}_0) P_{t-\tau}(Q_t - Q_\tau, \mathcal{C}_t | \mathcal{C})$$

où  $Z$  est simplement la normalisation qui assure que

$$\sum_{\mathcal{C}} \mathcal{P}_{\tau}(\mathcal{C}|Q_t = qt) = 1 .$$

Quand les temps  $\tau$  et  $t - \tau$  sont longs, si on pose  $Q_{\tau} = q'\tau$ , on obtient

$$\mathcal{P}_{\tau}(\mathcal{C}|Q_t = qt) = \frac{1}{Z'} \int dq' \ell_{q'}(\mathcal{C}_0) r_{q'}(\mathcal{C}) \ell_{q''}(\mathcal{C}) r_{q''}(\mathcal{C}_t) \exp[-\tau\phi(q') - (t - \tau)\phi(q'')]$$

où  $q''$  est donné par

$$qt = q'\tau + q''(t - \tau)$$

et  $Z'$  est encore une fois une constante de normalisation. En calculant l'intégrale sur  $q'$  par une méthode du col (à cause de la convexité de  $\phi(q)$  le col se trouve en  $q' = q$ ), on arrive au résultat annoncé.

## 15 La mesure empirique pour l'équation de Langevin

Tout ce qu'on vient de voir sur la mesure empirique dans le cas d'un processus de Markov se généralise sans difficulté à une équation de Langevin.

Par exemple pour une équation de Langevin unidimensionnelle de la forme

$$\dot{q} = F(q) + \eta(t) \quad \text{avec} \quad \langle \eta(t) \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \epsilon \delta(t - t')$$

si on conditionne  $Q_t$  défini par

$$Q_t \equiv \int_0^t q(t') dt'$$

à prendre une certaine valeur  $q_1 t$ , on a dans la limite des temps longs pour la distribution de  $Q_t$

$$P_t(Q_t = q_1 t, q(t)|q(0)) \sim \ell_{q_1}(q(0)) \exp[-\phi_{\epsilon}(q_1) t] r_{q_1}(q(t))$$

Comme dans le cas du processus de Markov

1.  $\phi_{\epsilon}(q)$  ne dépend pas de la valeur initiale  $q(0)$  et de la valeur finale  $q(t)$  (voir figure 32).

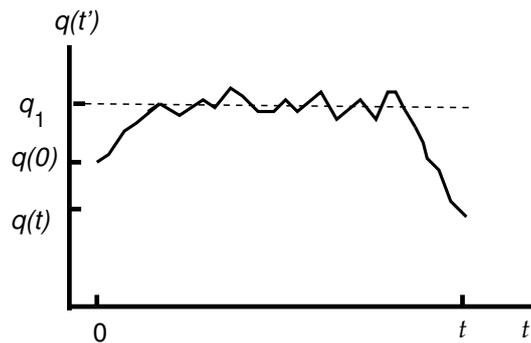


FIGURE 32: Une trajectoire  $q(t)$  donnant lieu à une mesure empirique  $q_1$  pendant la fenêtre de temps  $t$ . La fonction  $\phi_{\epsilon}(q_1)$  ne dépend ni de la valeur initiale  $q(0)$  ni de la valeur finale  $q(t)$

2.  $\phi_\epsilon(q_1)$  est une fonction convexe. En effet comme schématisé sur la figure 33

$$P_t(q_1 = \alpha q'_1 + (1 - \alpha)q''_1) \gtrsim P_{\alpha t}(q'_1) \times P_{(1-\alpha)t}(q''_1)$$

ce qui implique à nouveau la convexité de  $\phi_\epsilon$

$$\boxed{\phi_\epsilon(\alpha q'_1 + (1 - \alpha)q''_1) \leq \alpha \phi_\epsilon(q'_1) + (1 - \alpha) \phi_\epsilon(q''_1)}$$

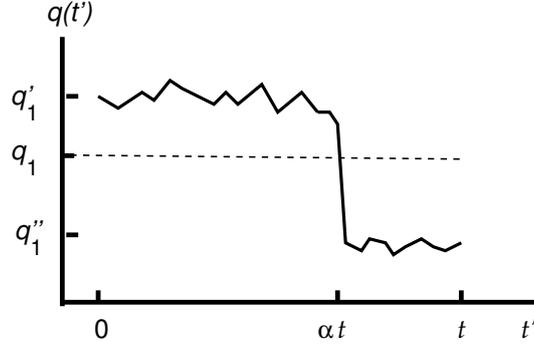


FIGURE 33: La fonction  $\phi_\epsilon(q_1)$  est convexe : en effet la probabilité d'observer une mesure empirique  $q_1 = \alpha q'_1 + (1 - \alpha)q''_1$  pendant un temps  $t$  est supérieure ou égale à celle d'observer  $q'_1$  pendant une fraction du temps  $\alpha t$  et  $q''_1$  et pendant le reste du temps  $t$

### 15.1 L'équation de Fokker-Planck déformée

Comme pour le processus de Markov, on peut associer à l'équation de Langevin, une équation de Fokker Planck déformée qui permet de calculer la fonction de grande déviation  $\phi_\epsilon(q_1)$  et les fonctions propres  $\ell_{q_1}(q)$  et  $r_{q_1}(q)$ .

Si on repart de l'équation de Langevin

$$\frac{dq}{dt} = F(q) + \eta(t) \quad \text{avec} \quad \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \epsilon \delta(t - t')$$

et si on définit comme plus haut

$$Q_t = \int_0^t q_{t'} dt'$$

on a au bout d'un intervalle de temps  $dt \ll 1$

$$q_{t+dt} = q_t + F(q_t) dt + B$$

où  $B = \int_0^{dt} \eta(t') dt'$  (et donc  $\langle B \rangle = 0$  et  $\langle B^2 \rangle = \epsilon dt$ ) et

$$Q_{t+dt} = Q_t + q_t dt .$$

La probabilité  $P_t(Q, q)$  que  $Q_t = Q$  et que  $q_t = q$  (pour une condition initiale  $q_0$  donnée) évolue selon

$$\frac{dP}{dt} = -q \frac{dP}{dQ} - \frac{d(F(q)P)}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 P}{dq^2}$$

[ En effet si on considère une fonction  $G(Q, q)$  et qu'on définit

$$\langle G \rangle_t = \langle G(Q_t, q_t) \rangle$$

on a

$$\langle G \rangle_{t+dt} = \left\langle G(Q_t + q_t dt, q_t + F(q_t)dt + B) \right\rangle_{q_t, Q_t, B}$$

et cela conduit à

$$\langle G \rangle_{t+dt} = \langle G \rangle_t + dt \left\langle q \frac{dG}{dQ} + F(q) \frac{dG}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 G}{dq^2} \right\rangle_t$$

Ce qui donne pour l'évolution de  $P_t(Q, q)$

$$\left[ \frac{dP_t(Q, q)}{dt} = -q \frac{dP_t(Q, q)}{dQ} - \frac{d[F(q)P_t(Q, q)]}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 P_t(Q, q)}{dq^2} \right]$$

Si on introduit la fonction génératrice

$$R_t(q) = \int dQ e^{\lambda Q} P_t(Q, q)$$

son évolution satisfait l'équation de Fokker Planck déformée

$$\frac{dR}{dt} = \lambda q R - \frac{d[F(q)R]}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 R}{dq^2}$$

Dans la limite des temps longs  $R_t(q)$  est de la forme

$$R_t(q) = e^{\mu(\lambda)t} r(q)$$

où  $r(q)$  et  $\mu(\lambda)$  sont solution de l'équation aux valeurs propres

$$\boxed{\mu(\lambda) r(q) = \lambda q r(q) - \frac{d[F(q)r(q)]}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 r(q)}{dq^2}}$$

De même on peut montrer que la fonction propre à gauche satisfait l'équation transposée

$$\boxed{\mu(\lambda) \ell(q) = \lambda q \ell(q) + F(q) \frac{d\ell(q)}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \frac{d^2 \ell(q)}{dq^2}}$$

Finalement comme pour le processus de Markov, on passe de  $\mu(\lambda)$  à  $\phi_\epsilon(q_1)$  par une simple transformation de Legendre.

*Remarque* : On peut retrouver ces équations aux valeurs propres en appliquant ce qu'on a vu pour un processus de Markov au cas d'une marche aléatoire sur un réseau unidimensionnel avec des probabilités  $[1 + F(n\epsilon)]/2/\epsilon$  de sauter de  $n$  vers  $n + 1$  et  $[1 - F(n\epsilon)]/2/\epsilon$  de sauter de  $n$  vers  $n - 1$  et en se plaçant dans la limite où  $\epsilon \rightarrow 0$  avec  $x = n\epsilon$  fixé.

*Remarque* : On pourrait répéter facilement tout ce qui précède si on s'intéressait à la mesure empirique de n'importe quelle fonction  $g(q)$  de la position

$$\frac{1}{t} \int_0^t g(q_{t'}) dt' = g_1$$

*Remarque* : On peut vérifier tout ce qui précède dans le cas simple d'une force  $F(q)$  linéaire

$$\dot{q} = -q + \eta(t)$$

qu'on peut résoudre directement : en effet

$$q(t) = \int_{-\infty}^t e^{-(t-t')} \eta(t') dt'$$

et

$$Q_t = \int_0^t q(t') dt' = \int_{-\infty}^0 e^{t'} \eta(t') dt' + \int_0^t \eta(t') dt' - \int_{-\infty}^t e^{-(t-t')} \eta(t') dt' .$$

$Q_t$  est donc une variable gaussienne dont on peut facilement déterminer la variance

$$\langle Q_t^2 \rangle = t + e^{-t} - 1 .$$

On en déduit que

$$\mu(\lambda) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \langle e^{\lambda Q_t} \rangle = \epsilon \frac{\lambda^2}{2}$$

ce qu'on peut retrouver facilement en résolvant l'équation aux valeurs propres pour  $\ell(q)$  ou  $r(q)$

$$\ell(q) = e^{\lambda q} \quad ; \quad r(q) = e^{q\lambda - \frac{q^2}{\epsilon}} .$$

## 15.2 Une borne simple pour la fonction de grande déviation $\phi_\epsilon(q_1)$

Dans la limite  $\epsilon$  petit, on s'attend à ce que  $\phi_\epsilon(q_1)$  soit dominée par la trajectoire qui minimise l'action avec la contrainte que représente la mesure empirique

$$\phi_\epsilon(q_1) \simeq \frac{\Phi(q_1)}{\epsilon}$$

avec

$$\Phi(q_1) = \min_{\{q(t'), 0 < t' < t\}} \left\{ \frac{1}{2t} \int_0^t \left( \frac{dq(t')}{dt'} - F(q(t')) \right)^2 dt' \right\} \quad \text{avec la contrainte} \quad \int_0^t q(t') dt' = t q_1$$

Cela implique que la trajectoire immobile  $q(t') = q_1$  pour  $0 < t' < t$  fournit une borne supérieure de  $\Phi(q_1)$

$$\boxed{\Phi(q_1) \leq \frac{F^2(q_1)}{2}}$$

Lorsque  $F(q)^2$  est une fonction convexe de  $q$  et que  $F(q)$  dérive d'un potentiel, il est facile de vérifier que cette trajectoire immobile est la trajectoire optimale. En effet

$$\begin{aligned} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t \left( \frac{dq(t')}{dt'} - F(q(t')) \right)^2 dt' &= \lim_{t \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{t} \int_0^t \left( \frac{dq(t')}{dt'} \right)^2 dt' + \frac{1}{t} \int_0^t F^2(q(t')) dt' \right] \\ &\geq \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t F^2(q(t')) dt' \end{aligned}$$

Dans la limite  $t \rightarrow \infty$  le terme croisé ne contribue pas (parce que la force dérive d'un potentiel) et à cause de cette inégalité, on voit que la trajectoire immobile est la trajectoire optimale lorsque  $F^2(q)$  est convexe et donc

$$\boxed{F^2(q) \text{ convexe} \quad \Rightarrow \quad \Phi(q_1) = \frac{F^2(q_1)}{2}}$$

*Remarques :*

En principe la fonction  $\Phi(q_1)$  n'a rien à voir avec le quasi-potentiel  $\psi(q)$  de la section 11.4. Alors que la fonction  $\Phi(q)$  est convexe, le quasi-potentiel  $\psi(q)$  n'a aucune raison de l'être (voir par exemple la figure 26).

Lorsque  $F^2(q)$  n'est pas convexe un calcul variationnel pour trouver la trajectoire qui minimise l'action

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} \int_0^t \left( \frac{dq(t')}{dt'} - F(q(t')) \right)^2 dt' \quad \text{avec la contrainte} \quad \int_0^t q(t') dt' = q_1$$

permet de montrer que la trajectoire optimale vérifie

$$\ddot{q} = F(q)F'(q) + \lambda$$

où  $\lambda$  est le paramètre de Lagrange associé à la contrainte. Ce qui peut s'intégrer pour donner

$$\dot{q}^2 - F(q)^2 - 2\lambda q = \text{Cste} .$$

De manière plus générale on pourrait définir la mesure empirique  $q_1$  par

$$q_1 = \frac{1}{t} \int_0^t a(t') q(t') dt'$$

où  $a(t)$  est une fonction quelconque. La trajectoire qui minimise l'action, avec cette contrainte vérifie

$$\ddot{q} - F(q)F'(q) - \lambda a(t) = 0$$

où  $\lambda$  est le paramètre de Lagrange associé à la contrainte. Dans le cas particulier où

$$a(t') = \theta(t') \theta(t - t')$$

la trajectoire qui optimise l'action est solution de

$$\ddot{q} - F(q)F'(q) = \begin{cases} 0 & \text{pour } t' < 0 \text{ ou } t' > t \\ \lambda & \text{pour } 0 < t' < t \end{cases}$$

### 15.3 Le cas du double puits dans la limite d'un faible bruit

Comme on l'a vu, lorsque  $F^2(q)$  n'est pas convexe, la trajectoire optimale peut dépendre du temps. C'est le cas lorsque par exemple la force  $F(q)$  dérive d'un potentiel  $U(q)$  en forme de double puits comme sur la figure 34.

Comme la force  $F(q)$  s'annule aux deux minima du potentiel on a

$$F(q_a) = F(q_b) = 0 \quad \Rightarrow \quad \Phi(q_a) = \Phi(q_b) = 0$$

car pour  $q_1 = q_a$  comme pour  $q_1 = q_b$  la trajectoire qui minimise l'action est celle qui reste immobile au minimum du potentiel. Comme  $\phi(q)$  est convexe, on en déduit que

$$\phi(q_1) = 0 \quad \text{pour} \quad q_a \leq q_1 \leq q_b$$

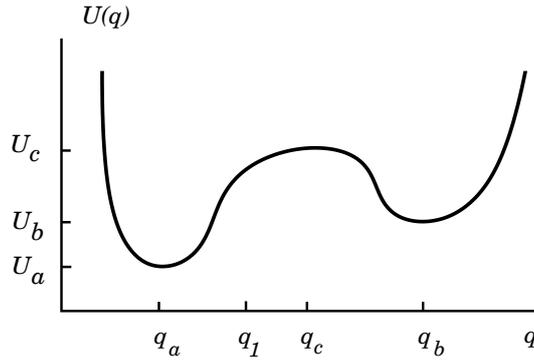


FIGURE 34: Le double puits est un exemple où  $F(q)^2$  n'est pas convexe. Comme  $\Phi(q)$  est convexe et s'annule en  $q = q_a$  et  $q = q_b$ , elle reste nulle dans tout l'intervalle  $q_a < q < q_b$

et les trajectoires qui minimisent l'action sont des trajectoires qui passent une fraction  $(q_1 - q_a)/(q_b - q_a)$  du temps en  $q_b$  et  $(q_b - q_1)/(q_b - q_a)$  du temps en  $q_a$  comme sur la figure 34.

Ce raisonnement n'est bien sûr qu'une approximation. Il y a en réalité de nombreuses trajectoires qui passent ces fractions de temps en  $q_a$  et  $q_b$  et pour obtenir la probabilité d'observer la mesure empirique  $q_1$  pour  $\epsilon \neq 0$  petit il faudrait en principe sommer sur toutes ces trajectoires. On s'attend par exemple à ce que pour  $\epsilon$  petit, dans le cas de la figure 34

$$\phi_\epsilon(q_b) \sim \exp \left[ -2 \frac{U_c - U_b}{\epsilon} \right]$$

car une particule située en  $q_b$  a une probabilité  $p_{b \rightarrow a} \sim \exp[-2 \frac{U_c - U_b}{\epsilon}]$  de sauter en  $q_a$  par unité de temps, ce qui fait que la probabilité de rester en  $q_b$  pendant un long temps  $t$  décroît comme  $\exp[-p_{b \rightarrow a} t]$ .

La façon précise de déterminer le comportement asymptotique de  $\phi_\epsilon(q_1)$  pour  $q$  petit serait de partir de l'équation de Fokker Planck déformée et dans le cas d'un double puits le calcul ressemble au calcul d'instantons que l'on fait pour trouver les énergies propres d'une particule dans un potentiel en forme de double puits en mécanique quantique.

Une façon simple d'estimer la fonction  $\phi_\epsilon(q_1)$  pour  $q_a < q < q_b$  est de représenter l'évolution du système entre deux états  $A$  et  $B$  situés en  $q_a$  et  $q_b$  avec des taux de transition  $p_{a \rightarrow b}$  et  $p_{b \rightarrow a}$  entre ces états avec

$$p_{a \rightarrow b} \sim \exp \left[ -2 \frac{U_c - U_a}{\epsilon} \right] \quad ; \quad p_{b \rightarrow a} \sim \exp \left[ -2 \frac{U_c - U_b}{\epsilon} \right]$$

Pour obtenir  $\mu(\lambda)$  il suffit, dans le cadre de cette approximation, de trouver la plus grande valeur propre de la matrice

$$\begin{pmatrix} \lambda q_a - p_{a \rightarrow b} & p_{b \rightarrow a} \\ p_{a \rightarrow b} & \lambda q_b - p_{b \rightarrow a} \end{pmatrix}$$

et cela donne, après avoir fait la transformation de Legendre  $q_1 = \mu'(\lambda)$  et  $\phi_\epsilon(q_1) = \mu(\lambda) - \lambda \mu'(\lambda)$ ,

$$\phi_\epsilon(q_1) \sim \frac{\left( \sqrt{(q_b - q_1)p_{a \rightarrow b}} - \sqrt{(q_1 - q_a)p_{b \rightarrow a}} \right)^2}{q_b - q_a} .$$

Comme on pouvait s'y attendre  $\phi_\epsilon(q_1)$  ne diverge plus pour  $\epsilon \rightarrow 0$  mais s'annule exponentiellement vite. Il est facile aussi de vérifier que  $\phi_\epsilon(q_1)$  est bien une fonction convexe de  $q_1$ .

## 15.4 La mesure empirique du courant sur le cercle

On peut reprendre le calcul de la section 15.1 dans le cas où  $Q_t$  est donné par

$$Q_t = \int_0^t \frac{dq(t')}{dt'} dt'$$

(Il faut imaginer que la position  $q$  se trouve sur un cercle et  $Q_t$  est essentiellement le nombre de tours effectués par la particule pendant le temps  $t$ )

L'évolution de  $P(Q, q)$  est alors donnée par

$$\frac{dP(Q, q)}{dt} = -F(q) \frac{dP(Q, q)}{dQ} - \frac{d[F(q)P(Q, q)]}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \left( \frac{d^2 P(Q, q)}{dQ^2} + 2 \frac{d^2 P(Q, q)}{dQ dq} + \frac{d^2 P(Q, q)}{dq^2} \right).$$

La fonction génératrice  $R(q)$

$$R(q) = \int dQ e^{\lambda Q} P(Q, q)$$

prend, dans la limite des temps longs, la forme

$$R(q) \simeq e^{\mu(\lambda)t} r(q)$$

où  $r(q)$  et  $\mu(\lambda)$  sont solutions de l'équation aux valeurs propres

$$\mu(\lambda)r(q) = \lambda F(q)r(q) - \frac{d[F(q)r(q)]}{dq} + \frac{\epsilon}{2} \left( \lambda^2 r(q) - 2\lambda \frac{dr(q)}{dq} + \frac{d^2 r(q)}{dq^2} \right).$$

En faisant un calcul de perturbation autour de  $\lambda = 0$  (en intégrant à chaque ordre en  $\lambda$  une équation différentielle inhomogène qu'on peut résoudre par quadratures) on peut calculer la vitesse  $\mu_1$ , la constante  $\mu_2$  de diffusion de la particule et tous les cumulants du nombre de tours effectués par la particule.

$$r(q) = r_0(q) + \lambda r_1(q) + \lambda^2 r_2(q) + \dots \quad ; \quad \mu[\lambda] = \lambda \mu_1 + \lambda^2 \frac{\mu_2}{2} + \dots$$

$$\mu_0 = 0 \quad ; \quad \mu_1 = \frac{\int_0^1 F(q)r_0(q) dq}{\int_0^1 r_0(q) dq}$$

et

$$r_0(q) = \int_0^q \exp\left(\frac{2}{\epsilon} \int_{q'}^q F(q'') dq''\right) dq' + \int_q^1 \exp\left(\frac{2}{\epsilon} \int_{q'}^{q+1} F(q'') dq''\right) dq'$$

comme on l'a vu dans la section 11.4.

## 16 Fonction de grande déviation du courant

On a vu dans la section 12 sur la théorie des fluctuations macroscopiques que, pour des systèmes diffusifs étendus, une trajectoire est spécifiée par la connaissance de deux champs, la densité et le courant,

$$\text{Traj} = \{\rho(x, \tau'), j(x, \tau') ; 0 < x < 1, 0 < \tau' < \tau\}$$

et son poids est donné par une action

$$\text{Prob}(\text{Traj}) \sim \exp \left[ -L \int_0^\tau d\tau \int_0^1 dx \frac{(j + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} \right].$$

Cela revient au même à écrire le courant sous la forme

$$j(x, \tau) \simeq -D(\rho(x, \tau)) \frac{d\rho(x, \tau)}{dx} + \eta(x, \tau)$$

$$\frac{d\rho(x, \tau)}{d\tau} = -\frac{dj(x, \tau)}{dx}$$

où le bruit  $\eta(x, \tau)$  est un bruit blanc gaussien de variance qui vérifie

$$\langle \eta(x, \tau) \eta(x', \tau') \rangle = \frac{\sigma(\rho(x, \tau))}{L} \delta(x - x') \delta(\tau - \tau') .$$

On peut alors généraliser à ces systèmes étendus ce qui a été fait dans la section 15 dans le cas de l'équation de Langevin.

### 16.1 La mesure empirique d'un profil de densité

On peut définir (voir section 9.3) la mesure empirique d'un profil de densité  $\rho(x, \tau)$

$$\rho_{\text{empirique}}(x) = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \rho(x, \tau') d\tau'$$

et pour  $L$  et  $\tau$  grand on s'attend à ce que

$$\text{Pro}(\{\rho_{\text{empirique}}(x)\}) \sim e^{-\tau L \phi(\{\rho_{\text{empirique}}(x)\})}$$

Cette fonction  $\phi(\{\rho(x)\})$  est elle aussi convexe alors que le quasipotential  $\mathcal{F}(\{\rho(x)\})$  (voir section 12.1) n'a en général aucune raison de l'être (à l'équilibre pour des interactions à courte portée,  $\mathcal{F}$  est néanmoins convexe puisqu'il est donné par l'énergie libre comme on la vu dans la section 12.2). Lorsque la fonction de grande déviation  $\phi(\{\rho(x)\})$  est dominée par un seul profil indépendant du temps comme dans le cas de l'équation de Langevin (voir section 15.2) la fonction  $\phi$  est simplement donnée par

$$\phi(\{\rho(x)\}) = \min_j \left[ \int_0^1 \frac{(j + D(\rho(x))\rho'(x))^2}{2\sigma(\rho(x))} \right] .$$

Quand le profil optimal ne dépend pas du temps, le courant  $j$  devient indépendant de l'espace à cause de la loi de conservation  $\frac{d\rho}{d\tau} = -\frac{dj}{dx}$ . Il est aussi indépendant du temps parce que l'action est une fonction convexe du courant. Il suffit donc de minimiser sur la seule variable  $j$  et on obtient

$$\phi(\{\rho(x)\}) = \frac{1}{2} \left[ \int_0^1 \frac{(D(\rho(x))\rho'(x))^2}{2\sigma(\rho(x))} - \left( \int_0^1 \frac{(D(\rho(x))\rho'(x))}{2\sigma(\rho(x))} \right)^2 \left( \int_0^1 \frac{1}{2\sigma(\rho(x))} \right)^{-1} \right] .$$

Comme pour l'équation de Langevin, cette expression n'est valide que lorsque le profil optimal, pour réaliser un profil empirique donné, est indépendant du temps. Dans le cas contraire, cette expression est simplement une borne

$$\phi(\{\rho(x)\}) \leq \frac{1}{2} \left[ \int_0^1 \frac{(D(\rho(x))\rho'(x))^2}{2\sigma(\rho(x))} - \left( \int_0^1 \frac{(D(\rho(x))\rho'(x))}{2\sigma(\rho(x))} \right)^2 \left( \int_0^1 \frac{1}{2\sigma(\rho(x))} \right)^{-1} \right] .$$

On peut facilement vérifier que  $\phi(\{\bar{\rho}(x)\}) = 0$  puisque que pour le profil stationnaire  $D(\bar{\rho}(x))\bar{\rho}'(x)$  est constant (voir section 10). C'est le seul profil qui annule la fonctionnelle  $\phi$  tout en satisfaisant les conditions aux bordss  $\rho(0) = \rho_a$  et  $\rho(1) = \rho_b$ .

## 16.2 Fonction de grande déviation du courant pour les systèmes diffusifs

Pour des systèmes diffusifs, la théorie des fluctuations macroscopiques permet de trouver une expression explicite [101] de la fonction de grande déviation du courant. D'abord, si on conditionne à une certaine valeur empirique du courant  $j_1$  pendant une fenêtre de temps  $\tau$

$$\int_0^\tau j(x, \tau') d\tau' = j_1 \tau$$

on s'attend à ce que la fonction de grande déviation du courant définie par

$$\text{Pro} \left( \int_0^\tau j(x, \tau') d\tau' = j_1 \tau \right) \sim e^{-\tau L \phi(j_1)}$$

soit indépendante du point  $x$  où on mesure le courant. En effet (si on suppose que les particules ne peuvent pas s'accumuler indéfiniment dans le système), on peut borner les différences

$$\left| \int_0^\tau j(x, \tau') d\tau' - \int_0^\tau j(y, \tau') d\tau' \right| < C(x, y)$$

par des constantes indépendantes du temps.

Si on suppose, comme on l'a fait précédemment, que les profils de courant et de densité qui donnent la contribution dominante sont indépendants du temps, on obtient que  $j(x, \tau) = j_1$

$$\phi(j_1) = \min_{\{\rho(x)\}} \int_0^1 dx \frac{(j_1 + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)}$$

Le courant  $j_1$  étant fixé, on voit qu'il faut minimiser une fonctionnelle de  $\rho(x)$  et  $\rho'(x)$ . Une fois encore, comme on l'a fait dans la section 11.2, le problème est analogue à un problème de mécanique analytique puisqu'on doit minimiser une action qui dépend de  $\rho(x)$  et de  $\rho'(x)$

$$x \rightarrow t \quad ; \quad \rho(x) \rightarrow q \quad ; \quad \rho'(x) \rightarrow \dot{q} \quad ; \quad \frac{(j_1 + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} \rightarrow \mathcal{L}(q, \dot{q}) .$$

En écrivant les équations d'Euler Lagrange

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \quad \Rightarrow \quad \dot{q} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} - \mathcal{L}(q, \dot{q}) = \kappa$$

on obtient ici

$$\frac{(D(\rho)\rho')^2 - j_1^2}{2\sigma(\rho)} = \kappa$$

où  $\kappa$  est une constante.

Le profil optimal, qui en général diffère du profil stationnaire  $\bar{\rho}(x)$ , est alors solution de

$$\frac{d\rho}{dx} = \pm \frac{\sqrt{j_1^2 + 2\kappa\sigma(\rho(x))}}{D(\rho(x))}$$

(il peut se produire que le profil optimal ait des extrema comme sur la figure 35 et donc qu'il faille raccorder des branches de solutions avec le signe + et le signe -).

Comme  $j_1$  est donné, si on intègre cette équation pour le profil optimal  $\rho(x)$ , on doit déterminer une constante d'intégration en plus de la constante  $\kappa$ . Ces deux constantes sont simplement fixées par les conditions aux bords  $\rho(0) = \rho_a$  et  $\rho(1) = \rho_b$ . Cela donne

$$1 = \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho) d\rho}{\sqrt{j_1^2 + 2\kappa\sigma(\rho)}} \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{j_1 = \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho) d\rho}{\sqrt{1 + 2\tilde{\kappa}\sigma(\rho)}}$$

et permet d'obtenir ainsi la fonction de grande déviation sous forme paramétrique c'est à dire

$$\phi(j_1) = \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} \left( \frac{j_1^2 + \kappa\sigma(\rho)}{\sqrt{j_1^2 + 2\kappa\sigma(\rho)}} - j_1 \right) \quad \Leftrightarrow \quad \boxed{\phi(j_1) = j_1 \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} \left( \frac{1 + \tilde{\kappa}\sigma(\rho)}{\sqrt{1 + 2\tilde{\kappa}\sigma(\rho)}} - 1 \right) d\rho}.$$

où  $\tilde{\kappa} = \frac{\kappa}{j_1}$ .

Pour  $\rho_a > \rho_b$ , le profil stationnaire est monotone décroissant et

$$j_1 = \int_{\rho_b}^{\rho_a} D(\rho) d\rho .$$

Cela correspond au cas  $\tilde{\kappa} = 0$  et  $D(\rho)\rho' = -j_1$ . En développant  $\phi$  et  $j_1$  en puissance de  $\tilde{\kappa}$  on obtient

$$j_1 = I_1 - I_2 \tilde{\kappa} + \frac{3I_3}{2} \tilde{\kappa}^2 + \dots$$

$$\phi(j_1) = \frac{I_1 I_2}{2} \tilde{\kappa}^2 - \left( \frac{I_2^2}{2} + I_1 I_3 \right) \tilde{\kappa}^3 + \dots$$

où les intégrales  $I_n$  sont données par

$$I_n = \int_{\rho_b}^{\rho_a} D(\rho) \sigma(\rho)^{n-1} d\rho .$$

En éliminant  $\tilde{\kappa}$  cela permet d'obtenir le développement de  $\phi(j_1)$  près de son minimum

$$\phi(j_1) = \frac{I_1}{2I_2} (j_1 - I_1)^2 + \frac{I_2^2 - I_1 I_3}{2I_2^3} (j_1 - I_1)^3 + \dots$$

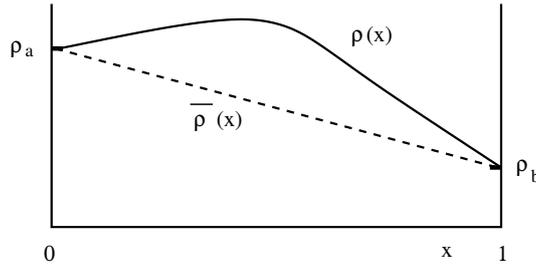


FIGURE 35: Le profil optimal  $\rho(x)$  qui minimise l'action pour une valeur  $j_1$  du courant donnée est en général différent du profil moyen  $\bar{\rho}(x)$

*Remarques :*

Dans ce qui précède, nous avons calculé la fonction de grande déviation  $\phi$  du courant en fonction des variables macroscopiques  $j_1$  et  $\tau$  (voir la section 9.1)

$$P \left( \int_0^\tau j(x, \tau') d\tau' = j_1 \tau \right) \sim \exp[-\tau \phi(j_1)] .$$

On peut en déduire pour les variables microscopiques  $Q_t$  (le nombre de particules qui ont traversé une section quelconque du système) pendant le temps microscopique  $t = L^2 \tau$  que

$$\text{Pro}(Q_t = J_1 t) \sim \exp \left[ -\frac{t}{L} \phi(L J_1) \right] .$$

A partir du développement de  $\phi(j_1)$  autour de  $I_1$  on peut obtenir l'expression des cumulants de  $Q_t$ . On trouve [101] dainsi ans la limite d'échelle ( $L$  grand et  $t \gg L^2$ ) en utilisant les relations entre une fonction de grande déviation et les cumulants [15]

$$\frac{\langle Q_t \rangle}{t} = \frac{1}{L} I_1 \quad ; \quad \frac{\langle Q_t^2 \rangle_c}{t} = \frac{1}{L} \frac{1}{\phi''(I_1)} = \frac{1}{L} \frac{I_2}{I_1^2} \quad ; \quad \frac{\langle Q_t^3 \rangle_c}{t} = -\frac{\phi'''(I_1)}{\phi''(I_1)^3} = \frac{1}{L} \frac{3(I_3 I_1 - I_2^2)}{I_1^3} \quad \dots$$

Dans le cas de l'exclusion symétrique ( $D(\rho) = 1, \sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$ ), ces expressions qui sont une conséquence de la théorie macroscopique des fluctuations coïncident avec celles calculées par une approche microscopique [102].

Si on réécrit l'action à minimiser sous la forme

$$\phi(j_1) = \min_{\{\rho(x)\}} \int_0^1 dx \frac{(j_1 + D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} = \min_{\{\rho(x)\}} \left[ -j_1 \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} d\rho + \int \int_0^1 dx \frac{j_1^2 + (D(\rho)\rho')^2}{2\sigma(\rho)} \right]$$

on voit que le profil optimal est le même pour  $j_1$  et pour  $-j_1$ .

On en déduit que

$$\phi(j_1) = \phi(-j_1) - 2j_1 \int_{\rho_b}^{\rho_a} \frac{D(\rho)}{\sigma(\rho)} d\rho$$

qui n'est rien d'autre que le théorème de fluctuation.

Dans les cas où le profil optimal est indépendant du temps, on peut généraliser [103] le calcul de la fonction de grande déviation du courant à des systèmes en dimension supérieure à 1. On peut

### 16.3 Les transitions de phases

L'hypothèse que l'action est minimisée par un profil de densité indépendant du temps n'est pas toujours vérifiée. Il a été montré [104, 105] qu'une condition suffisante pour que cela se produise est que

$$D(\rho) \sigma''(\rho) \leq D'(\rho) \sigma'(\rho) .$$

Cette condition est satisfaite pour le modèle d'exclusion ( $\sigma(\rho) = 2\rho(1 - \rho)$  et  $D(\rho) = 1$ ) mais ne l'est pas pour le modèle KMP [55, 104] ( $\sigma(\rho) = 2\rho^2$  et  $D(\rho) = 1$ ).

Lorsque le profil optimal dépend du temps, l'expression paramétrique de  $\phi(j_1)$  obtenue plus haut devient une fois encore une borne supérieure pour la fonction de grande déviation. Le calcul

de  $\phi(j_1)$  nécessite de trouver les profils de  $\rho(x, \tau)$  et de courant  $j(x, \tau)$  dépendant du temps qui minimisent l'action [104]

$$\phi(j_1) = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \min_{\{\rho(x, \tau'), j(x, \tau')\}} \left[ \int_0^\tau d\tau' \int_0^1 dx \frac{[j(x, \tau') + D(\rho(x, \tau'))\rho'(x, \tau')]^2}{2\sigma(\rho)(x, \tau')} \right]$$

où le courant  $j$  satisfait la contrainte

$$\int_0^\tau j(x, \tau') d\tau' = j_1 \tau$$

et  $\rho$  et  $j$  sont liés par la loi de conservation

$$\frac{d\rho}{d\tau} = -\frac{dj}{dx}$$

Le plus souvent quand le profil optimal dépend du temps, on n'a pas d'expression plus explicite de la fonction de grande déviation  $\phi_1$ . Dans certains cas, quand on varie les paramètres qui définissent le modèle comme par exemple les densités aux bords ou un champ extérieur, on peut observer des transitions de phase entre une phase où le profil optimal ne dépend pas du temps et une phase où il se met à en dépendre [106, 107, 108, 109, 110].

La difficulté de déterminer un profil optimal dépendant du temps se retrouve lorsqu'on s'intéresse à des régimes non stationnaires [111] ce qui fait qu'assez peu de résultats existent dans ce cas en dehors de quelques modèles exactement solubles [112, 113, 114, 115, 116, 117].

## Références

- [1] <http://www.bibnum.education.fr/sciencesdelaterre/climatologie/la-theorie-de-la-chaleur-de-fourier-appliquee-la-temperature-de-la-te>
- [2] Lepri, S., Livi, R., Politi, A. (2016). Heat transport in low dimensions : introduction and phenomenology. In *Thermal Transport in Low Dimensions* (pp. 1-37). Springer International Publishing.
- [3] Narayan, O., Ramaswamy, S. (2002). Anomalous heat conduction in one-dimensional momentum-conserving systems. *Physical review letters*, 89(20), 200601.
- [4] Dhar, A. (2008). Heat transport in low-dimensional systems. *Advances in Physics*, 57(5), 457-537.
- [5] Lepri, S., Livi, R., Politi, A. (2003). Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Physics Reports*, 377(1), 1-80.
- [6] Spohn, H. (2016). Fluctuating hydrodynamics approach to equilibrium time correlations for anharmonic chains. In *Thermal Transport in Low Dimensions* (pp. 107-158). Springer International Publishing.
- [7] Lepri, S. (Ed.). (2016). *Thermal Transport in Low Dimensions : From Statistical Physics to Nanoscale Heat Transfer* (Vol. 921). Springer.
- [8] Chang, C. W. (2016). Experimental Probing of Non-Fourier Thermal Conductors. In *Thermal Transport in Low Dimensions* (pp. 305-338). Springer International Publishing.
- [9] Marchetti, M. C., Joanny, J. F., Ramaswamy, S., Liverpool, T. B., Prost, J., Rao, M., Simha, R. A. (2013). Hydrodynamics of soft active matter. *Reviews of Modern Physics*, 85(3), 1143.

- [10] Buttinoni, I., Volpe, G., Kümmel, F., Volpe, G., Bechinger, C. (2012). Active Brownian motion tunable by light. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 24(28), 284129.
- [11] Bonetto, F., Lebowitz, J. L., Rey-Bellet, L. (2000). Fourier's law : A challenge for theorists. arXiv preprint math-ph/0002052.
- [12] Kubo, R. (1966). The fluctuation-dissipation theorem. *Reports on progress in physics*, 29(1), 255.
- [13] Ianiro, N., Lebowitz, J. L. (1985). Stationary nonequilibrium solutions of model Boltzmann equation. *Foundations of physics*, 15(5), 531-544.
- [14] Gerschenfeld, A., Derrida, B., Lebowitz, J. L. (2010). Anomalous Fourier's law and long range correlations in a 1D non-momentum conserving mechanical model. *Journal of Statistical Physics*, 141(5), 757-766.
- [15] Derrida, B., cours 2015-2016 Fluctuations et grandes déviations autour du Second Principe <https://www.college-de-france.fr/site/bernard-derrida/Resumes-annuels.htm>
- [16] Alder, B. J., Wainwright, T. E. (1970). Decay of the velocity autocorrelation function. *Physical review A*, 1(1), 18.
- [17] Pomeau, Y., Resibois, P. (1975). Time dependent correlation functions and mode-mode coupling theories. *Physics Reports*, 19(2), 63-139.
- [18] Pomeau, Y., communication privée
- [19] Dhar, A. (2001). Heat conduction in a one-dimensional gas of elastically colliding particles of unequal masses. *Physical review letters*, 86(16), 3554.
- [20] Grassberger, P., Nadler, W., Yang, L. (2002). Heat conduction and entropy production in a one-dimensional hard-particle gas. *Physical review letters*, 89(18), 180601.
- [21] Casati, G., Prosen, T. (2003). Anomalous heat conduction in a one-dimensional ideal gas. *Physical Review E*, 67(1), 015203.
- [22] Deutsch, J. M., Narayan, O. (2003). One-dimensional heat conductivity exponent from a random collision model. *Physical Review E*, 68(1), 010201.
- [23] Brunet, E., Derrida, B., Gerschenfeld, A. (2010). Fluctuations of the heat flux of a one-dimensional hard particle gas. *EPL (Europhysics Letters)*, 90(2), 20004.
- [24] Dhar, A., Saito, K., Roy, A. (2015). Energy current cumulants in one-dimensional systems in equilibrium. arXiv preprint arXiv :1512.00561.
- [25] Spohn, H. : The phonon Boltzmann equation, properties and link to weakly anharmonic lattice dynamics. *J. Stat. Phys.* 124(2-4), 1041-1104 (2006). doi :10.1007/s10955-005-8088-
- [26] Fermi, E., Pasta, J., Ulam, S. (1955). Studies of nonlinear problems. Los Alamos Report LA-1940, 978.
- [27] Ford, J. (1992). The Fermi-Pasta-Ulam problem : paradox turns discovery. *Physics Reports*, 213(5), 271-310.
- [28] Kardar, M., Parisi, G., Zhang, Y. C. (1986). Dynamic scaling of growing interfaces. *Physical Review Letters*, 56(9), 889.
- [29] Halpin-Healy, T., Zhang, Y. C. (1995). Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that. *Aspects of multidisciplinary statistical mechanics. Physics reports*, 254(4), 215-414.
- [30] Rieder, Z., Lebowitz, J. L., Lieb, E. (1967). Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state. *Journal of Mathematical Physics*, 8(5), 1073-1078.

- [31] Lepri, S., Livi, R., Politi, A. (2008). Anomalous heat conduction. *Anomalous Transport : Foundations and Applications*, R. Klages, G. Radons, and IM Sokolov, Eds. Wiley-VCH Verlag, Weinheim.
- [32] Dhar, A., Saito, K. (2016). Heat Transport in Harmonic Systems. In *Thermal Transport in Low Dimensions* (pp. 39-105). Springer International Publishing.
- [33] Eckmann, J. P., Zabey, E. (2004). Strange heat flux in (an) harmonic networks. *Journal of Statistical physics*, 114(1-2), 515-523.
- [34] Bonetto, F., Lebowitz, J. L., Lukkarinen, J. (2004). Fourier's law for a harmonic crystal with self-consistent stochastic reservoirs. *Journal of Statistical physics*, 116(1-4), 783-813.
- [35] Casher, A., Lebowitz, J. L. (1971). Heat flow in regular and disordered harmonic chains. *Journal of Mathematical Physics*, 12(8), 1701-1711.
- [36] Anderson, P. W. (1958). Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical review*, 109(5), 1492.
- [37] Arnol'd, V. I. (2013). *Mathematical methods of classical mechanics* (Vol. 60). Springer Science Business Media.
- [38] Benettin, G. (2005). Time scale for energy equipartition in a two-dimensional FPU model. *Chaos : An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 15(1), 015108.
- [39] Toda, M. (1967). Vibration of a chain with nonlinear interaction. *Journal of the Physical Society of Japan*, 22(2), 431-436.
- [40] Toda, M. (2012). *Theory of nonlinear lattices* (Vol. 20). Springer Science Business Media.
- [41] Hénon, M. (1974). Integrals of the Toda lattice. *Physical Review B*, 9(4), 1921.
- [42] Flaschka, H. (1974). The Toda lattice. II. Existence of integrals. *Physical Review B*, 9(4), 1924.
- [43] Hatano, T. (1999). Heat conduction in the diatomic Toda lattice revisited. *Physical Review E*, 59(1), R1.
- [44] Basile, G., Bernardin, C., Olla, S. (2006). Momentum conserving model with anomalous thermal conductivity in low dimensional systems. *Physical review letters*, 96(20), 204303.
- [45] Basile, G., Bernardin, C., Olla, S. (2009). Thermal conductivity for a momentum conservative model. *Communications in Mathematical Physics*, 287(1), 67-98.
- [46] Lepri, S., Mejía-Monasterio, C., Politi, A. (2008). A stochastic model of anomalous heat transport : analytical solution of the steady state. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 42(2), 025001.
- [47] Lepri, S., Mejía-Monasterio, C., Politi, A. (2010). Nonequilibrium dynamics of a stochastic model of anomalous heat transport. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 43(6), 065002.
- [48] Cividini, J., Kundu, A., Miron, A., Mukamel, D. (2016). Temperature profile and boundary conditions in an anomalous heat transport model. *arXiv preprint arXiv :1609.06614*.
- [49] Cipriani, P., Denisov, S., Politi, A. (2005). From anomalous energy diffusion to Levy walks and heat conductivity in one-dimensional systems. *Physical review letters*, 94(24), 244301.
- [50] Lepri, S., Politi, A. (2011). Density profiles in open superdiffusive systems. *Physical Review E*, 83(3), 030107.
- [51] Dhar, A., Saito, K., Derrida, B. (2013). Exact solution of a Lévy walk model for anomalous heat transport. *Physical Review E*, 87(1), 010103.

- [52] Spohn, H. (2014). Nonlinear fluctuating hydrodynamics for anharmonic chains. *Journal of Statistical Physics*, 154(5), 1191-1227.
- [53] Mendl, C. B., Spohn, H. (2013). Dynamic correlators of Fermi-Pasta-Ulam chains and nonlinear fluctuating hydrodynamics. *Physical review letters*, 111(23), 230601.
- [54] Evans, M. R., Hanney, T. (2005). Nonequilibrium statistical mechanics of the zero-range process and related models. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 38(19), R195.
- [55] Kipnis, C., Marchioro, C., Presutti, E. (1982). Heat flow in an exactly solvable model. *Journal of Statistical Physics*, 27(1), 65-74.
- [56] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C. (2015). Macroscopic fluctuation theory. *Reviews of Modern Physics*, 87(2), 593.
- [57] Derrida, B. (2007). Non-equilibrium steady states : fluctuations and large deviations of the density and of the current. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2007(07), P07023.
- [58] Evans, M. R., Kafri, Y., Koduvely, H. M., Mukamel, D. (1998). Phase separation in one-dimensional driven diffusive systems. *Physical review letters*, 80(3), 425.
- [59] Clincy, M., Derrida, B., Evans, M. R. (2003). Phase transition in the ABC model. *Physical Review E*, 67(6), 066115.
- [60] Derrida, B., Evans, M. R., Hakim, V., Pasquier, V. (1993). Exact solution of a 1D asymmetric exclusion model using a matrix formulation. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 26(7), 1493.
- [61] Blythe, R. A., Evans, M. R. (2007). Nonequilibrium steady states of matrix-product form : a solver's guide. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 40(46), R333.
- [62] Garrahan, J. P., Sollich, P., Toninelli, C. (2011). Kinetically constrained models. *Dynamical heterogeneities in glasses, colloids, and granular media*, 150, 111-137.
- [63] Kipnis, C., Landim, C., Olla, S. (1994). Hydrodynamical limit for a nongradient system : the generalized symmetric exclusion process. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 47(11), 1475-1545.
- [64] Kipnis, C., Landim, C. (2013). *Scaling limits of interacting particle systems (Vol. 320)*. Springer Science & Business Media.
- [65] Spohn, H. (1991). *Large scale dynamics of interacting particles*. Springer Verlag, Heidelberg, 1991.
- [66] Arita, C., Krapivsky, P. L., Mallick, K. (2014). Generalized exclusion processes : Transport coefficients. *Physical Review E*, 90(5), 052108.
- [67] Arita, C., Krapivsky, P. L., Mallick, K. (2016). Reply to "Comment on 'Generalized exclusion processes : Transport coefficients'". *Physical Review E*, 94(1), 016101.
- [68] Katz, S., Lebowitz, J. L., Spohn, H. (1984). Nonequilibrium steady states of stochastic lattice gas models of fast ionic conductors. *Journal of Statistical physics*, 34(3), 497-537.
- [69] Kipnis, C., Olla, S., Varadhan, S. R. S. (1989). Hydrodynamics and large deviation for simple exclusion processes. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 42(2), 115-137.
- [70] Eyink, G. L., Lebowitz, J. L., Spohn, H. (1996). Hydrodynamics and fluctuations outside of local equilibrium : driven diffusive systems. *Journal of Statistical physics*, 83(3), 385-472.
- [71] Eyink, G., Lebowitz, J. L., Spohn, H. (1991). Lattice gas models in contact with stochastic reservoirs : local equilibrium and relaxation to the steady state. *Communications in mathematical physics*, 140(1), 119-131.

- [72] Spohn, H. (1983). Long range correlations for stochastic lattice gases in a non-equilibrium steady state. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 16(18), 4275.
- [73] Garrido, P. L., Lebowitz, J. L., Maes, C., Spohn, H. (1990). Long-range correlations for conservative dynamics. *Physical Review A*, 42(4), 1954.
- [74] Dorfman, J. R., Kirkpatrick, T. R., Sengers, J. V. (1994). Generic long-range correlations in molecular fluids. *Annual Review of Physical Chemistry*, 45(1), 213-239.
- [75] Bodineau, T., Derrida, B., Lecomte, V., van Wijland, F. (2008). Long range correlations and phase transitions in non-equilibrium diffusive systems. *Journal of Statistical Physics*, 133(6), 1013-1031.
- [76] Sadhu, T., Majumdar, S. N., Mukamel, D. (2014). Long-range correlations in a locally driven exclusion process. *Physical Review E*, 90(1), 012109.
- [77] Kipnis, C., Olla, S. (1990). Large deviations from the hydrodynamical limit for a system of independent Brownian particles. *Stochastics : An International Journal of Probability and Stochastic Processes*, 33(1-2), 17-25.
- [78] Sadhu, T., Derrida, B. (2016). Correlations of the density and of the current in non-equilibrium diffusive systems. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2016(11), 113202.
- [79] Freidlin, M. I., Wentzell, A. D. (1984). Random Perturbations. In *Random Perturbations of Dynamical Systems* (pp. 15-43). Springer US.
- [80] Messiah, A. (1958). *Quantum Mechanics MECHANICS*. North Holland
- [81] Faggionato, A., Gabrielli, D. (2012). A representation formula for large deviations rate functionals of invariant measures on the one dimensional torus. In *Annales de l'Institut Henri Poincaré, Probabilités et Statistiques* (Vol. 48, No. 1, pp. 212-234). Institut Henri Poincaré.
- [82] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C. (2001). Fluctuations in stationary nonequilibrium states of irreversible processes. *Physical Review Letters*, 87(4), 040601.
- [83] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C. (2002). Macroscopic fluctuation theory for stationary non-equilibrium states. *Journal of Statistical Physics*, 107(3-4), 635-675.
- [84] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C. (2007). Stochastic interacting particle systems out of equilibrium. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2007(07), P07014.
- [85] Derrida B., Sadhu T., work in preparation 2018
- [86] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C. (2009). Towards a nonequilibrium thermodynamics : a self-contained macroscopic description of driven diffusive systems. *Journal of Statistical Physics*, 135(5), 857-872.
- [87] Bunin, G., Kafri, Y., Podolsky, D. (2012). Non-differentiable large-deviation functionals in boundary-driven diffusive systems. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2012(10), L10001.
- [88] Derrida, B., Lebowitz, J. L., Speer, E. R. (2007). Entropy of open lattice systems. *Journal of Statistical Physics*, 126(4-5), 1083-1108.
- [89] Derrida, B., Lebowitz, J. L., Speer, E. R. (2001). Free energy functional for nonequilibrium systems : an exactly solvable case. *Physical Review Letters*, 87(15), 150601.
- [90] Derrida, B., Lebowitz, J. L., Speer, E. R. (2002). Large deviation of the density profile in the steady state of the open symmetric simple exclusion process. *Journal of Statistical physics*, 107(3-4), 599-634.

- [91] Enaud, C., Derrida, B. (2004). Large deviation functional of the weakly asymmetric exclusion process. *Journal of Statistical physics*, 114(3-4), 537-562.
- [92] Bertini, L., Gabrielli, D., Lebowitz, J. L. (2005). Large deviations for a stochastic model of heat flow. *Journal of Statistical physics*, 121(5-6), 843-885.
- [93] Carinci, G., Giardinà, C., Giberti, C., Redig, F. (2013). Duality for stochastic models of transport. *Journal of Statistical Physics*, 152(4), 657-697.
- [94] Vanicat, M. (2017). Exact solution to integrable open multi-species SSEP and macroscopic fluctuation theory. *Journal of Statistical Physics*, 1-22.
- [95] Hakim, V., Nadal, J. P. (1983). Exact results for 2D directed animals on a strip of finite width. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 16(7), L213.
- [96] Affleck, I., Kennedy, T., Lieb, E. H., Tasaki, H. (1988). Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. In *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models* (pp. 253-304). Springer Berlin Heidelberg.
- [97] Klümper, A., Schadschneider, A., Zittartz, J. (1993). Matrix product ground states for one-dimensional spin-1 quantum antiferromagnets. *EPL (Europhysics Letters)*, 24(4), 293.
- [98] Chetrite, R., Touchette, H. (2015, September). Nonequilibrium Markov processes conditioned on large deviations. In *Annales Henri Poincaré* (Vol. 16, No. 9, pp. 2005-2057). Springer Basel.
- [99] Touchette, H. (2009). The large deviation approach to statistical mechanics. *Physics Reports*, 478(1), 1-69.
- [100] Touchette, H. (2017). Introduction to dynamical large deviations of Markov processes. arXiv preprint arXiv :1705.06492.
- [101] Bodineau, T., Derrida, B. (2004). Current fluctuations in nonequilibrium diffusive systems : an additivity principle. *Physical review letters*, 92(18), 180601.
- [102] Derrida, B., Douçot, B., Roche, P. E. (2004). Current fluctuations in the one-dimensional symmetric exclusion process with open boundaries. *Journal of Statistical physics*, 115(3-4), 717-748.
- [103] Akkermans, E., Bodineau, T., Derrida, B., Shpielberg, O. (2013). Universal current fluctuations in the symmetric exclusion process and other diffusive systems. *EPL (Europhysics Letters)*, 103(2), 20001.
- [104] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C. (2006). Non equilibrium current fluctuations in stochastic lattice gases. *Journal of Statistical physics*, 123(2), 237-276.
- [105] Bertini, L., De Sole, A., Gabrielli, D., Jona-Lasinio, G., Landim, C. (2005). Current fluctuations in stochastic lattice gases. *Physical review letters*, 94(3), 030601.
- [106] Bodineau, T., Derrida, B. (2005). Distribution of current in nonequilibrium diffusive systems and phase transitions. *Physical Review E*, 72(6), 066110.
- [107] Bodineau, T., Derrida, B. (2007). Cumulants and large deviations of the current through non-equilibrium steady states. *Comptes Rendus Physique*, 8(5), 540-555.
- [108] Espigares, C. P., Garrido, P. L., Hurtado, P. I. (2013). Dynamical phase transition for current statistics in a simple driven diffusive system. *Physical Review E*, 87(3), 032115.
- [109] Hurtado, P. I., Garrido, P. L. (2009). Test of the additivity principle for current fluctuations in a model of heat conduction. *Physical review letters*, 102(25), 250601.
- [110] Hurtado, P. I., Garrido, P. L. (2011). Spontaneous symmetry breaking at the fluctuating level. *Physical review letters*, 107(18), 180601.

- [111] Derrida, B., Gerschenfeld, A. (2009). Current fluctuations in one dimensional diffusive systems with a step initial density profile. *Journal of Statistical Physics*, 137(5-6), 978-1000.
- [112] Derrida, B., Gerschenfeld, A. (2009). Current fluctuations of the one dimensional symmetric simple exclusion process with step initial condition. *Journal of Statistical Physics*, 136(1), 1-15.
- [113] Krapivsky, P. L., Meerson, B. (2012). Fluctuations of current in nonstationary diffusive lattice gases. *Physical Review E*, 86(3), 031106.
- [114] Meerson, B., Sasorov, P. V. (2014). Extreme current fluctuations in lattice gases : Beyond nonequilibrium steady states. *Physical Review E*, 89(1), 010101.
- [115] Krapivsky, P. L., Mallick, K., Sadhu, T. (2014). Large deviations in single-file diffusion. *Physical review letters*, 113(7), 078101.
- [116] Sadhu, T., Derrida, B. (2015). Large deviation function of a tracer position in single file diffusion. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2015(9), P09008.
- [117] Imamura, T., Mallick, K., Sasamoto, T. (2017). Large deviations of a tracer in the symmetric exclusion process. *Physical Review Letters*, 118(16), 160601.