



HAL
open science

Grandes déviations, physique statistique et systèmes dynamiques

Julien Tailleur

► **To cite this version:**

Julien Tailleur. Grandes déviations, physique statistique et systèmes dynamiques. Physique mathématique [math-ph]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2007. Français. NNT : . tel-00325956v1

HAL Id: tel-00325956

<https://theses.hal.science/tel-00325956v1>

Submitted on 1 Oct 2008 (v1), last revised 1 Oct 2008 (v2)

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THÈSE DE DOCTORAT DE
L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

Spécialité

PHYSIQUE THÉORIQUE

Présentée par

Julien TAILLEUR

Pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE

Sujet de la thèse :

**Grandes déviations, physique statistique et
systèmes dynamiques**

soutenue le 8 octobre 2007

devant le jury composé de :

Dr. <i>Hugues Chaté</i>	Examineur
Dr. <i>Krzysztof Gawedzki</i>	Examineur
Prof. Dr. <i>Peter Grassberger</i>	Rapporteur
Dr. <i>Jorge Kurchan</i>	Directeur de thèse
Dr. <i>Frédéric van Wijland</i>	Rapporteur
Pr. <i>Jean-Bernard Zuber</i>	Examineur

Table des matières

0	Introduction	1
I	Grandes déviations et dynamique biaisée	5
1	Grandes déviations et chaoticité	7
1.1	Introduction	7
1.2	Grandes déviations des exposants de Lyapunov	8
1.2.1	Définition du chaos	8
1.2.2	Exposants de Lyapunov	9
1.2.3	Grandes déviations et chaoticité	12
1.2.4	Grandes déviations de l'exposant de Lyapunov maximal	12
1.2.4.1	Intérêt du plus grand exposant	12
1.2.4.2	Grandes déviations	13
	Construction des fonctions de grandes déviations	13
	Une température pour la chaoticité	15
1.2.5	Système hamiltonien	17
1.3	Algorithme	19
1.3.1	Dynamique biaisée par les Lyapunov	19
1.3.2	Quelques remarques sur l'implémentation numérique	20
1.3.2.1	Taille de la population	20
1.3.2.2	Implémentation du bruit	21
1.3.2.3	Reproduction, mutation et sélection	22
1.4	Quelques applications	22
1.4.1	Double puits de potentiel	23
1.4.2	Transition vers le chaos	23
1.4.2.1	L'application standard	24
	Systèmes intégrables	24
	Ruptures des tores rationnels et séparatrices	25
	Séparatrices et chaos	26
	Application de l'algorithme	26

1.4.2.2	Toile d'Arnold	30
	Diffusion d'Arnold	30
	Exemple	32
	Pour quelques degrés de liberté de plus	33
1.4.3	Chaîne d'oscillateurs de Fermi-Pasta-Ulam	35
1.4.3.1	Présentation du modèle	35
1.4.3.2	Application de la dynamique biaisée par les Lyapunov	35
1.5	Énergie libre dynamique et transition de phase	38
1.5.1	Présentation	38
1.5.2	Limite thermodynamique	41
1.6	Spectre d'exposants de Lyapunov	42
1.6.1	Exposants de Lyapunov et k -volume	42
1.6.2	Procédé de Gram-Schmidt	45
1.6.2.1	Deuxième exposant de Lyapunov	45
1.6.2.2	k^e Exposant de Lyapunov	47
1.6.3	Grandes déviations du k^e exposant de Lyapunov	49
1.6.4	Grandes déviations de l'entropie de Kolmogorov-Sinai	50
1.6.5	Probabilité jointe	50
1.7	Conclusion	51
2	Grandes déviations et temps continu	53
2.1	Introduction	53
2.2	Grandes déviations	54
2.3	Formalisme et algorithme	55
2.3.1	Chaînes de Markov en temps continu	55
2.3.2	Fonction de grandes déviations	56
2.3.3	Dynamique de population	57
2.3.4	Intégration thermodynamique	58
2.4	Trois exemples	59
2.4.1	Le processus symétrique d'exclusion simple (SSEP)	59
2.4.2	Le processus asymétrique d'exclusion simple (ASEP)	60
2.4.3	Le processus de contact	60
2.5	Conclusion	63
II	Grandes déviations et instantons	65
3	Modèle dual et grandes déviations	67
3.1	Introduction	67
3.2	Présentation du modèle et limite hydrodynamique	68
3.2.1	Présentation	68

3.2.2	Limite hydrodynamique	69
3.3	Grandes déviations et instantons	72
3.4	Une stratégie pour calculer les grandes déviations	73
3.4.1	À l'équilibre	73
3.4.2	Hors équilibre	75
3.5	Une solution spécifique au SSEP	76
3.5.1	Une profusion suspecte de bilans détaillés	76
3.5.2	Une étonnante succession de changements de variables	76
3.6	Le modèle dual	79
3.6.1	Un changement de variables non local	79
3.6.2	Les variables de spin	80
3.6.3	Conditions aux limites spatiales	81
3.6.4	Transformation des trajectoires	81
3.6.5	L'origine des symétries	82
3.7	Conclusion	83
III	Chemins de réaction, topologie et supersymétrie	85
4	Introduction	87
4.1	Méthodes numériques	88
4.2	Hamiltonien de Fokker-Planck	89
4.3	Approche supersymétrique de l'équation de Kramers	91
5	Supersymétrie et équation de Kramers	93
5.1	Dynamique de Langevin et intégrales de chemin	93
5.1.1	Propagateur	94
5.1.2	Représentation supersymétrique	96
5.1.2.1	Déterminant et variables de Grassman	96
5.1.2.2	Opérateur généralisé	97
5.1.2.3	Supersymétrie	98
5.2	Équation de Kramers	99
5.2.1	Formalisme supersymétrique	99
5.2.2	Spectre du Hamiltonien SUSY	102
5.2.2.1	Vecteurs propres de valeur propre non nulle	102
5.2.2.2	Valeur propre nulle et topologie	104
6	De la supersymétrie aux chemins de transition	107
6.1	Dynamique stochastique et secteur à k fermions	107
6.1.1	Fonctions d'onde à 0 fermion	108
6.1.2	Fonctions d'onde à 1 fermion	108

6.1.3	Fonctions d'onde à k fermions	109
6.1.4	États propres de basse valeur propre de H	110
6.2	Chemins de transition et courants réduits	110
6.2.0.1	Algorithme	112
6.2.1	Quelques applications	113
6.2.1.1	Le double puits de potentiel	113
6.2.1.2	Trouver le col le plus proche	113
6.2.1.3	Potentiel rugueux	114
6.2.1.4	Vers des problèmes plus réalistes	115
6.3	Conclusion	116
7	Supersymétrie et topologie	119
7.1	Limite de basse température	120
7.1.1	Fonction génératrice	120
7.1.1.1	De la fonction génératrice aux orbites périodiques classiques	120
7.1.1.2	Contribution des orbites périodiques classiques	121
7.1.2	Reconstruction du spectre de faible valeur propre	123
7.1.2.1	Orbite de période τ , égale à celle de \mathcal{H}	123
7.1.2.2	Orbite de période multiple de celle du Hamiltonien	124
7.2	Hamiltonien non dépendant du temps et théorie de Morse	125
7.2.1	Fermions, formes différentielles et topologie	125
7.2.2	Inégalités de Morse	126
7.3	Une approche WKB	127
7.3.1	Forces conservatives	128
7.3.2	Approximation gaussienne	128
7.3.3	Sous-espace propre de valeur propre nulle	129
7.4	Supersymétrie et dépendance temporelle	131
7.4.1	Théorie de Floquet	131
7.4.2	Structure du spectre – quadruplets	132
7.4.3	Trace de l'opérateur d'évolution	134
8	Conclusion	137
9	Discussion et perspectives	139
	Appendices	140
A	Bruit conservatif	141
A.1	Équations du mouvement	141
A.2	Équation de Fokker-Planck	142

B	Une famille de billards	145
B.1	Section de Poincaré du billard	147
B.2	Naissance du chaos	148
C	Application standard amortie	153
D	Solution de l'équation maîtresse	155
E	Lien vers les modèles de spin et processus d'exclusion partielle	157
E.1	Présentation	157
E.2	Équation maîtresse	157
F	Fermions et formes différentielles	161
F.1	Produits extérieur et intérieur	161
F.2	Dérivée extérieure	162
G	Évaluation de la contribution d'une orbite périodique	163
H	Développement gaussien - WKB	167
I	Dynamique biaisée par les Lyapunov et limite de faible friction	169
I.1	Limite $\gamma \rightarrow 0$	169
I.2	Friction nulle et température infinie	170
I.2.0.1	Extension fermionique et symétries	171
I.2.0.2	Des marcheurs aux fermions	172
	Bibliographie	175
	Publications	187

Remerciements

Remercier ici tous ceux qui le méritent nécessiterait probablement une quatrième année de thèse, entièrement dédiée à ce projet. Ne pouvant résister plus longtemps à l'appel du haggis, je suis contraint d'y renoncer et m'excuse donc par avance auprès de tous ceux qui ne manqueront pas de trouver que je ne leur rends pas un hommage suffisamment prononcé.

Je tiens en premier lieu à remercier Peter Grassberger et Frédéric Van Wijland d'avoir accepté la lourde tâche de rapporteurs, ainsi que Hugues Chaté, Krzysztof Gawedski et Jean-Bernard Zuber pour leur présence dans mon jury.

Mes remerciements vont ensuite à l'ensemble des membres du laboratoire PMMH où s'est faite ma thèse. Je tiens à remercier plus particulièrement Antoine, Bruno, Chay, Denis et Philippe pour les interactions scientifiques que nous avons pu avoir, malgré notre éloignement thématique. De plus, le PMMH ne serait rien sans l'efficacité de Frédérique qui seule saisit les arcanes de l'Administration. Je tiens aussi à saluer Antonio, l'ingénieur système du labo, avec qui parler chiffons fut extrêmement agréable, ainsi qu'Emmanuel Dreyfus, Grand Manitou de l'ESPCI qui, malgré une obédience BSDienne douteuse, est quelqu'un de très bien et m'a appris énormément. Notons encore que ma thèse a été réalisée [pratiquement] exclusivement à l'aide de logiciels libres, dont la qualité toujours croissante est le résultat du travail de millions d'utilisateurs anonymes qui acceptent de travailler plus, pour le bénéfice de tous. Je tiens à les remercier ici chaleureusement, tant pour ce qu'ils font que ce qu'ils représentent.

Parmi les nombreux collègues avec qui j'ai eu la chance d'interagir, je tiens à remercier particulièrement Frédéric Van Wijland, pour ses conseils et son humour, Stefano Ruffo pour nos nombreuses discussions et sa disponibilité (une semaine de cette thèse s'est déroulée avec lui à Florence) et bien sûr Vivien Lecomte, pour notre collaboration fructueuse et nos innombrables discussions. Le laboratoire PCT a souvent joué le rôle de labo d'accueil, surtout à l'heure du déjeuner. Je souhaite donc remercier tous ses membres pour leur hospitalité. Je tiens également à remercier l'ensemble de l'équipe enseignante de Mathématiques pour physiciens (LP206) de P6 avec qui j'ai passé deux années très agréables. L'ambiance chaleureuse et constructive, ainsi que la volonté de tous de dispenser un enseignement de qualité, contribuèrent fortement au plaisir que j'ai pris à enseigner. Merci donc à Claude, Jean-Bernard, Dominique, Eli, Philippe, Wilfrid, Razvan et Cristian.

Au cours de cette thèse, j'ai eu la chance d'être entouré d'une génération de « grands frères » qui ont fortement contribué à la rendre aussi agréable. Je ne peux résumer en quelques

lignes ce qu'ont représenté à mes yeux Sorin, Ivan, Jacco, Florent, Cristian, Hugo. Tant sur les plans scientifique que personnel, leur présence a compté énormément pour moi. Et puis il y a aussi « le thésard du bureau d'à côté », Thomas, qu'une grande carrière politique attend désormais. Puisqu'il écrira ses remerciements après les miens, je ne m'attarderai pas ici sur les détails de sa personnalité qui en font quelqu'un d'aussi attachant et lui dirai donc simplement « merci » :-)

Réduire à quelques mots ces trois années d'interaction avec Jorge me semble bien difficile. Le plus simple est probablement de commencer par le plan scientifique. Ce qui m'a principalement décidé à faire une thèse avec lui est certainement l'ouverture évidente dont il fait preuve face à la physique. La diversité des sujets qu'il a abordés en atteste et cette impression initiale ne fut que renforcée au cours de ma thèse. C'est un plaisir que de travailler avec quelqu'un qui vous injecte inlassablement des idées originales sur le sujet du moment, tant sur les plans technique que conceptuel. Cette ouverture s'est par ailleurs traduite par la grande liberté, parfois un peu déroutante pour l'étudiant scolaire qu'il avait recueilli, qu'il m'a laissée. Tout au long de ces trois années, il a essayé de m'inculquer sa vision de la physique, transversale, unifiée, originale, tout en me forçant à abandonner mes vieux démons (formalisme, quand tu nous tiens. . .). Je ne sais pas s'il a réussi, mais je suis ravi du voyage. Au delà de notre interaction scientifique, je souhaite saluer l'homme avec lequel j'ai eu d'innombrables discussions et débats, mélangeant le personnel et le politique, car si un trait de cet éternel iconoclaste mérite d'être souligné, c'est son ouverture et le respect des opinions qui diffèrent des siennes, tant que celles-ci sont argumentées. Je connais peu de personnes aussi aptes au débat, qu'il soit scientifique ou d'une autre nature. Si j'ai fortement apprécié l'encadrant, c'est avant tout l'ami qui compte aujourd'hui à mes yeux.

Cette thèse aurait été bien fade sans les innombrables soirées passées avec le groupe des physiciens, Vivien, Marc, Pierre, Leticia, dont les diverses origines culinaires ont toujours donné des résultats appréciables, les soirées « risk » avec les ex de Cachan - parce que la relâche, c'est 'achement important aussi -, les soirées « canard » avec Luc, Adrian, Mélanie, les monday beer avec le groupe des biologistes et les trop rares interactions avec Caro, Claire, Marie, Lydia, Alain, Pierre, Noé, Jarod, Nolwenn, Émilie. Mon taux de sucre dans le sang fut sponsorisé par Erwin, un mec super chouette tant qu'on n'est pas un hamster, pendant les deux années où nous avons fait tanière commune.

Je ne serai jamais arrivé là où j'en suis si je n'avais dès le départ eu la chance de naître au bon endroit, dans une famille qui m'a toujours aimé, entouré et exigé de moi que je trouve un domaine où m'épanouir. Ce fut long mais c'est fait. Merci finalement à Anne, pour ce qu'elle est et représente à mes yeux.

Je tiens à remercier les lecteurs courageux qui liront également la suite de cette thèse :-)

Chapitre 0

Introduction

La physique macroscopique prit son essor au XVIII^e siècle, avec le développement de la machine à vapeur et l'apparition des premières fonderies, mais c'est au XIX^e qu'elle connut son apogée, sous l'effet de l'accélération de la révolution industrielle. Toutefois, sa suprématie fut progressivement remise en question par le développement de la chimie, à la suite des travaux de Lavoisier, qui fit une place de plus en plus grande à l'hypothèse atomique. Si les premières apparitions de l'atomisme remontent au VI^e siècle avant notre ère, dans la philosophie hindouiste, sa première apparition dans un cadre strictement scientifique date en effet de 1805 et des travaux du chimiste anglais John Dalton [95], repris et poursuivis par Avogadro [6]. Cependant, la notion d'atome ne fut alors utilisée en chimie que comme une hypothèse de travail, permettant d'expliquer certains phénomènes observés, et elle ne donna lieu pas plus à des observations expérimentales qu'à une base théorique systématique. Il fallut ainsi attendre les travaux du botaniste écossais Robert Brown en 1827 pour la première observation, indirecte, de la nature moléculaire de l'eau et ceux d'Einstein en 1905 [64] pour la compréhension théorique du mouvement brownien. Finalement, les confirmations expérimentales de Jean Perrin [153] constituèrent la première preuve, statistique, de l'hypothèse atomique.

Entre temps, la deuxième moitié du XIX^e siècle vit le développement de la théorie cinétique des gaz, sous l'impulsion des travaux de Kelvin [181], Maxwell [125–129] et Boltzmann [29–31]. Tous les éléments furent alors réunis pour que Gibbs [81] puisse poser en 1902 les bases de la physique statistique moderne¹. Bien qu'éclipsée par l'avènement des deux ruptures paradigmatiques majeures que furent les théories quantique et relativiste, la physique statistique constitua néanmoins une révolution scientifique de premier ordre : pour la première fois, des lois macroscopiques étaient expliquées à partir de propriétés microscopiques. Ramenant le tout à l'interaction des éléments qui le composent et montrant que ce tout peut être caracté-

¹Notons que les travaux de Gibbs *n'avaient pas* pour but de fonder microscopiquement la thermodynamique. Ils visaient à formuler une extension de la mécanique newtonienne à des systèmes à grand nombre de degrés de liberté. Gibbs se « contenta » donc de remarquer que sa théorie donnait, sous certaines hypothèses, les mêmes prédictions que la thermodynamique [138]. Au contraire, Einstein avait pour but explicite de fonder cette dernière sur l'hypothèse atomique [65–67].

térisé par un faible nombre de paramètres macroscopiques, elle fit le lien entre un monde microscopique chaotique et un ordre macroscopique relatif.

La physique statistique d'équilibre dut son succès au fait qu'elle permit de remplacer l'étude dynamique de systèmes complexes par une approche statique. Ainsi, pour décrire un système à l'équilibre, la résolution complète des équations du mouvement peut être avantageusement remplacée par le calcul de moyennes d'observables à l'aide de mesures ad hoc, déterminées par les conditions expérimentales d'observation². Ceci peut bien sûr s'avérer ardu pour un système générique, mais le problème est *conceptuellement* beaucoup plus simple.

Toutefois, lorsque le système étudié n'est pas dans un état d'équilibre thermodynamique, aucune approche générale n'est disponible et le recours aux études dynamiques semble nécessaire. Soulignons ici que l'obtention d'un cadre de pensée efficace applicable aux systèmes hors équilibre n'est ni un exercice académique ni une modification à la marge de la mécanique statistique d'équilibre ; il s'agit d'un profond changement de paradigme rendu d'autant plus nécessaire qu'une communauté toujours croissante de physiciens s'intéresse aujourd'hui aux problèmes biologiques, pour lesquels le hors équilibre règne en maître.

Parallèlement aux efforts entrepris pour dépasser le cadre de la physique statistique d'équilibre, la communauté des physiciens s'empara, à la suite de Lorenz découvrant *l'effet papillon* [122], de la théorie du chaos. En effet, alors que les mathématiciens avaient remis en question les fondements du déterminisme laplacien depuis Poincaré, il fallut attendre les années 70 pour que ces notions pénètrent durablement le monde de la physique³. L'engouement des physiciens statisticiens pour la théorie des systèmes dynamiques s'explique principalement pour deux raisons. En premier lieu, l'émergence de structures aléatoires dans le cadre de systèmes déterministes fit naître l'espoir, par la suite déçu, d'une justification rapide de l'hypothèse ergodique de Boltzman [29] et d'un fondement rigoureux de la physique statistique. Ensuite, l'utilisation de dynamiques symboliques permit de reformuler l'étude des systèmes dynamiques en terme de fluctuations dans l'espace des trajectoires. Or, si la physique statistique s'avérait pertinente pour décrire les fluctuations de *configurations* d'un système, certains pensèrent qu'elle devait pouvoir être étendue à l'espace des *trajectoires*, pour caractériser des fluctuations spatio-temporelles. Cette idée est à la base du *formalisme thermodynamique* [35, 164, 172] et de nombreux développements ultérieurs [14, 27, 77, 86, 180]. Toutefois, si ce cadre théorique est remarquablement complet, celui-ci n'a été appliqué qu'à des systèmes modèles, loin des préoccupations usuelles du physicien⁴.

Ainsi, tant pour répondre aux besoins d'une physique statistique hors équilibre que pour l'étude de systèmes chaotiques, le développement d'approches d'ensemble dans un cadre dynamique est un enjeu majeur. Ceci explique en partie le regain d'intérêt pour la théorie des

²L'ensemble statistique pertinent est déterminé en fonction des contraintes extérieures imposées sur le système (nombre de particules fixé, volume fixé, température fixée, etc.).

³C'est-à-dire pour que l'imprédictibilité d'équations du mouvement déterministes soit naturellement acceptée.

⁴à l'exception notable du gaz de Lorenz [136, 187, 188]. Notons également une extension intéressante aux chaînes de Markov en temps discret [77] ou continu [119, 120].

fonctions de grandes déviations [68] puisque ces dernières constituent l’extension de la notion d’entropie (ou d’énergie libre de Landau) à des situations hors équilibre ou des observables dynamiques. Tant l’intégration d’ingrédients dynamiques à la physique statistique que l’utilisation d’un formalisme statistique dans la théorie des systèmes dynamiques sont à l’origine d’une interaction féconde entre ces deux domaines. C’est dans ce cadre que se situe cette thèse.

La première partie (chapitres 1 et 2) porte principalement sur une méthode de détermination numérique des fonctions de grandes déviations. Le premier chapitre est consacré aux fluctuations de chaotité dans les systèmes dynamiques. Plus précisément, après avoir montré que les exposants de Lyapunov sont la mesure naturelle du chaos, nous présentons une méthode numérique pour calculer les fonctions de grandes déviations associées. Nous l’appliquons ensuite à une succession de systèmes de complexité croissante, pour finir par une chaîne d’oscillateurs anharmoniques possédant un millier de degrés de liberté. Dans le deuxième chapitre, nous montrons que ce type de méthode peut être étendue au cas des chaînes de Markov continues en temps pour une large classe d’observables.

La deuxième partie de cette thèse (chapitre 3) porte sur l’utilisation des fonctions de grandes déviations pour étendre la notion de fonction thermodynamique à des situations hors équilibre. En partant d’une formulation hamiltonienne de la théorie des fluctuations macroscopiques [18], nous montrons que les calculs de fonctions de grandes déviations de systèmes hors équilibre peuvent se ramener, dans certains cas, à un calcul d’équilibre. Nous présentons explicitement une telle correspondance dans le cas du processus d’exclusion simple, un modèle unidimensionnel de transport de particules. En particulier, nous montrons que c’est l’existence d’un modèle dual à l’équilibre qui permet le calcul explicite de la fonction de grandes déviations du profil de densité.

Enfin, dans la dernière partie de cette thèse (chapitres 4 à 8), nous présentons une alternative aux approches d’ensemble : une étude directe du spectre de l’opérateur d’évolution d’un système hamiltonien couplé à un bain thermique. Nous montrons en particulier comment la supersymétrie de l’équation de Kramers fournit de nouveaux outils pour étudier les transitions entre états métastables. Ce formalisme suggère l’introduction d’un nouveau courant de probabilité, dont l’implémentation numérique est présentée au chapitre 6. Nous illustrons cette dernière par quelques exemples simples et décrivons finalement son utilisation par Mossa et al [132] pour caractériser la transition « hélice-pelote » d’une chaîne de polypeptides.

Première partie

Grandes déviations et dynamique
biaisée

Chapitre 1

Grandes déviations et chaoticité

1.1 Introduction

Dans de nombreux systèmes physiques, les situations typiques ne sont pas nécessairement les plus intéressantes et le physicien est donc contraint à la recherche de trajectoires rares. Par exemple, de tous les jeux possibles de conditions initiales d'un système de huit planètes, seul un nombre infime entraîne une stabilité comparable à celle du système solaire [111, 134, 135]. De même, l'étude des propriétés de transport des systèmes quasi-intégrables nécessite la localisation de couches chaotiques extrêmement fines, seules responsables des mécanismes de diffusion globale de ces systèmes. De plus, au-delà de la rareté d'une trajectoire, sa stabilité peut également être une source de difficultés. Ainsi, de nombreuses structures instables suscitent l'intérêt du physicien. Par exemple, des structures localisées comme les solitons ou les modes de respiration contribuent au transport d'énergie dans des systèmes non linéaires tels des condensats de Bose-Einstein ou des macromolécules [47, 183]. De même, l'étonnant phénomène d'intermittence, qui se caractérise par des irruptions chaotiques dans un environnement régulier, est difficile à étudier en raison de l'instabilité de la phase turbulente. Finalement, les résonances et séparatrices jouent un rôle prépondérant dans la stabilité des systèmes planétaires [111, 134].

Pour toutes ces raisons, de nombreux efforts ont été dédiés dans le passé à la localisation de ces trajectoires rares, souvent caractérisées par une chaoticité atypique. Puisqu'il est analytiquement très difficile de travailler sur un système dynamique générique possédant plusieurs degrés de liberté, de nombreuses méthodes numériques ont été développées à cette fin [74, 116, 124, 156, 174]. À de rares exceptions près [124], ces méthodes nécessitent un échantillonnage systématique de l'espace des phases. Celui-ci peut reposer sur l'utilisation d'une grille aux noeuds de laquelle on effectue une étude systématique du système [74, 116, 174] ou encore sur l'existence de trajectoires ergodiques qui échantillonnent tout l'espace. Si ces méthodes ont remporté de nombreux succès lors de l'étude de systèmes possédant peu de degrés de liberté, elles sont en revanche inapplicables en plus haute dimension [72] : le nombre de noeuds d'un maillage et le temps de Poincaré d'une trajectoire ergodique divergent exponen-

tiellement avec la dimension de l'espace des phases. Nous allons montrer dans ce chapitre que l'application aux systèmes dynamiques de méthodes issues de la physique statistique permet de contourner ce problème.

Historiquement, la mécanique statistique fut avant tout développée pour donner un fondement microscopique à la thermodynamique, mais sa capacité à rendre compte des fluctuations d'observables statiques fut rapidement mise en évidence [64]. Au cours des années 70, Bowen, Ruelle, Sinai et bien d'autres [35, 163, 164, 172] réalisèrent qu'elle offre de plus un cadre théorique pertinent pour l'étude de fluctuations d'observables dynamiques : plutôt que construire des ensembles (microcanonique, canonique, etc...) dans l'espace des configurations, ceux-ci se tournèrent vers l'espace des trajectoires, pour poser les premières bases d'une thermodynamique spatio-temporelle.

La formulation moderne de la physique statistique repose sur le formalisme des fonctions de grandes déviations [68]. Celui-ci a pour but l'étude asymptotique d'événements rares et offre donc un cadre théorique idéal pour les limites macroscopiques. Il permet, par exemple, de quantifier les variations d'observables physiques extensives lorsque le nombre de constituants élémentaires d'un système devient grand.

1.2 Grandes déviations des exposants de Lyapunov

La question des grandes déviations reposée en terme de chaoticité s'énonce de la manière suivante : sachant qu'un système dynamique macroscopique présente une chaoticité typique, quelles sont les réalisations de ce système qui s'éloignent fortement de ce comportement moyen ? À quel point sont-elles rares ? Jouent-elles néanmoins un rôle important ? Pour tenter de répondre à ces questions, nous montrons ci-dessous que les fonctions de grandes déviations sont les outils pertinents à étudier et proposons une implémentation numérique de leur détermination dans le cadre des systèmes dynamiques. Cette méthode sera par la suite généralisée à d'autres types de systèmes et d'observables au chapitre 2.

1.2.1 Définition du chaos

Historiquement, le chaos fut étudié par différentes communautés (mathématiciens, physiciens, théoriciens de l'information...) qui en donnèrent chacune une définition légèrement différente.

En mathématiques par exemple, il est courant de présenter le chaos d'un point de vue purement topologique : un système dynamique est dit chaotique s'il est topologiquement transitif et possède un ensemble dense d'orbites périodiques. Derrière ces termes quelque peu abscons se trouvent en réalité des idées intuitives. Ainsi, la transitivité signifie simplement que si l'on considère deux voisinages quelconques de deux états distincts d'un système dynamique, il existe une trajectoire qui passe de l'un à l'autre¹. Cela garantit que l'ensemble des

¹Notons que cette définition fait référence uniquement à la notion de voisinage (d'ouvert) et non de distance. C'est bien une propriété purement topologique.

configurations du système soit complètement « mélangé » par la dynamique.

Pour le physicien, la notion de chaos est fortement liée à celle de mesure et d'imprédictibilité. Ainsi un système est dit chaotique si quelle que soit sa condition initiale, il existe une perturbation infinitésimale autour de celle-ci qui se traduit par un futur radicalement distinct. C'est le phénomène de sensibilité aux conditions initiales, intrinsèquement lié aux problèmes concrets du monde expérimental. En effet, si le temps typique pour que deux trajectoires initialement proches diffèrent sensiblement est inférieur au temps expérimental caractéristique, le système étudié « apparaît » non-déterministe : une connaissance nécessairement imparfaite des conditions initiales plonge l'expérimentateur dans l'impossibilité de prédire l'évolution du système avec une précision égale à celle des données dont il dispose².

Englobant ces différentes approches, Devaney proposa une définition du chaos qui est aujourd'hui largement acceptée [59] : un système dynamique est chaotique si et seulement si

- il est topologiquement transitif,
- il possède un ensemble dense d'orbites périodiques,
- il présente le phénomène de sensibilité aux conditions initiales.

Notons que les deux premières hypothèses impliquent la troisième [7], sans, bien sûr, que la réciproque soit vraie³. Toutefois, elles ne permettent pas une quantification simple de la chaoticité et sont donc peu adaptées à une étude pratique d'un système dynamique. Au contraire, la sensibilité aux conditions initiales peut être quantifiée grâce aux exposants de Lyapunov⁴ et se prête donc bien à l'étude d'exemples concrets.

1.2.2 Exposants de Lyapunov

Les exposants de Lyapunov sont des observables dynamiques qui caractérisent la divergence *exponentielle* de trajectoires initialement proches et donnent donc une information *quantitative* sur la sensibilité aux conditions initiales d'un système. Notons que si cette dernière ne suppose pas que la séparation entre deux trajectoires augmente exponentiellement au cours du temps, c'est cependant génériquement le cas dans les systèmes chaotiques.

Considérons tout d'abord un système dynamique défini sur un espace de dimension N par N équations différentielles :

$$\forall i \in [1, \dots, N] \quad \dot{x}_i(t) = f_i[\mathbf{x}(t)] \quad (1.1)$$

où \mathbf{x} représente les coordonnées du système. L'évolution d'une petite perturbation $\delta\mathbf{x}(t)$ au-

²La précision des prédictions qu'il peut faire décroît au cours du temps, il « perd » de l'information sur son système. Cette perte d'information est souvent caractérisée par l'entropie de Kolmogorov-Sinai, dont nous parlerons succinctement à la section 1.6.

³C'est un résultat très intéressant puisqu'on déduit une propriété métrique en partant d'hypothèses purement topologiques.

⁴du nom du mathématicien russe Aleksandr Lyapunov qui étudia à la fin du XIX^e siècle les problèmes de stabilité d'équations différentielles ordinaires.

tour d'une trajectoire $\mathbf{x}(t)$ s'obtient via un développement de Taylor de l'équation précédente :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}[x_i(t) + \delta x_i(t)] &= f_i[\mathbf{x}(t) + \delta \mathbf{x}(t)] \\ &= f_i[\mathbf{x}(t)] + \sum_j \frac{\partial f_i[\mathbf{x}(t)]}{\partial x_j} \delta x_j(t) + \frac{1}{2} \sum_{jk} \delta x_k(t) \delta x_j(t) \frac{\partial^2 f_i[\mathbf{x}(t)]}{\partial x_k \partial x_j} + o[|\delta \mathbf{x}(t)|^2] \end{aligned} \quad (1.2)$$

Au premier ordre, ceci s'écrit :

$$\dot{x}_i(t) + \delta \dot{x}_i(t) \simeq f_i[\mathbf{x}(t)] + \sum_j \frac{\partial f_i[\mathbf{x}(t)]}{\partial x_j} \delta x_j(t) \quad (1.3)$$

soit d'après (1.1) :

$$\delta \dot{x}_i(t) \simeq \sum_j \frac{\partial f_i[\mathbf{x}(t)]}{\partial x_j} \delta x_j(t) \quad (1.4)$$

Matriciellement, (1.4) se note :

$$\delta \dot{\mathbf{x}} = -A \delta \mathbf{x} \quad (1.5)$$

où $A[\mathbf{x}(t)]$ est la matrice définie par $A_{ij} = -\frac{\partial f_i[\mathbf{x}(t)]}{\partial x_j}$. L'équation (1.5) est linéaire en $\delta \mathbf{x}(t)$, elle décrit la *dynamique tangente* associée à la dynamique (1.1) et donne l'évolution d'une perturbation infinitésimale autour d'une trajectoire $\mathbf{x}(t)$. Pour quantifier la sensibilité aux conditions initiales, il faut caractériser l'évolution de la perturbation $\delta \mathbf{x}(t)$. En notant $U(t)$ la solution de l'équation matricielle

$$\dot{U} = -AU \quad (1.6)$$

l'équation (1.5) s'intègre en

$$\delta \mathbf{x}(t) = U(t) \delta \mathbf{x}(0) \quad (1.7)$$

La norme de $\delta \mathbf{x}(t)$ s'obtient sous la forme :

$$|\delta \mathbf{x}(t)|^2 = \delta \mathbf{x}(0)^\dagger U^\dagger(t) U(t) \delta \mathbf{x}(0) \quad (1.8)$$

On définit les exposants de Lyapunov à temps fini comme les valeurs propres de $\frac{1}{2t} \log(U^\dagger U)$ ⁵ :

$$\{\lambda_i(t)\} \equiv \left\{ \text{v.p.} \left(\log[U^\dagger(t) U(t)]^{\frac{1}{2t}} \right) \right\} \quad \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_N \quad (1.9)$$

La matrice $[U^\dagger(t) U(t)]^{\frac{1}{2t}}$ converge lorsque $t \rightarrow \infty$ sous des conditions générales [150], ce qui permet de définir les exposants de Lyapunov :

$$\lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \lambda_i(t) \quad (1.10)$$

⁵Notons que de nombreux ouvrages définissent les exposants de Lyapunov comme le logarithme du module des valeurs propres de U et non à partir de $U^\dagger U$. Cette définition n'est valide que lorsque U et U^\dagger commutent (i.e. U est une matrice normale), ce qui n'est génériquement pas le cas.

Notons que si la définition (1.9) mène à des méthodes analytiques intéressantes [184], elle ne permet pas de suivre simplement l'évolution des exposants de Lyapunov au cours d'une simulation numérique ou à partir d'une série temporelle expérimentale. En effet, pour construire les $\lambda_i(t)$, il faut tout d'abord construire la matrice d'évolution U à chaque temps, puis son adjoint, diagonaliser le produit $U^\dagger U$, etc. Cela n'est guère pratique et il existe une alternative simple. Nous la présentons ici pour le calcul du plus grand exposant de Lyapunov $\lambda_1(t)$ et la généraliserons à la section 1.6 au calcul de λ_k , pour k quelconque. Il s'agit essentiellement de paraphraser les approches présentées dans [11–13] et [170].

Considérons l'évolution de la norme d'un vecteur tangent \mathbf{u} sous la dynamique (1.5) :

$$\frac{d}{dt} |\mathbf{u}(t)|^2 = \sum_i 2u_i \dot{u}_i = - \sum_{ij} 2u_i A_{ij} u_j \quad (1.11)$$

En introduisant les vecteurs tangents normalisés $v_i = \frac{u_i}{|\mathbf{u}|}$, dont l'évolution est donnée par

$$\dot{v}_i = - \sum_j A_{ij} v_j + v_i \sum_{kl} v_k A_{kl} v_l \quad (1.12)$$

l'équation (1.11) s'écrit :

$$\frac{d}{dt} |\mathbf{u}(t)|^2 = - \sum_{ij} 2v_i A_{ij} v_j |\mathbf{u}(t)|^2 \quad (1.13)$$

et finalement :

$$|\mathbf{u}(t)| = |\mathbf{u}(0)| e^{-\sum_{ij} \int_0^t v_i(t') A_{ij} [\mathbf{x}(t')] v_j(t') dt'} \quad (1.14)$$

Le plus grand exposant de Lyapunov est alors donné par

$$\lambda_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \frac{|\mathbf{u}(t)|}{|\mathbf{u}(0)|} = - \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \int_0^t dt' \left\{ \sum_{ij} v_i(t') A_{ij} [\mathbf{x}(t')] v_j(t') \right\} \quad (1.15)$$

Si au lieu de faire évoluer un vecteur \mathbf{u} , nous avons fait évoluer une k surface orientée, nous aurions de même pu définir les k premiers exposants de Lyapunov (voir section 1.6). On définit également l'exposant à temps fini :

$$\lambda_1(t) = - \frac{1}{t} \int_0^t dt' \left\{ \sum_{ij} v_i(t') A_{ij} [\mathbf{x}(t')] v_j(t') \right\} \quad (1.16)$$

En principe, cette deuxième définition de l'exposant de Lyapunov à temps fini est moins satisfaisante sur le plan conceptuel. Tout d'abord, si (1.10) et (1.15) sont bien équivalentes [150], (1.9) et (1.16) ne coïncident que dans la limite $t \rightarrow \infty$. De plus, la définition (1.16) est ambiguë car contrairement à (1.9), elle dépend de l'orientation initiale du vecteur tangent \mathbf{v} . Toutefois, nous nous intéresserons dans la suite de notre travail à des temps finis (puisque numériques) mais toujours grands devant $\frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2}$ (où λ_2 est le deuxième plus grand exposant de Lyapunov) et la différence entre les définitions (1.9) et (1.16) sera indolore.

1.2.3 Grandes déviations et chaoticité

Nous avons donné ci-dessus une définition locale des exposants de Lyapunov : nous avons linéarisé la dynamique autour d'une trajectoire bien précise et défini par la suite un ensemble d'exposants pour caractériser la divergence autour de celle-ci. Il est donc normal de s'interroger sur la dépendance de ces exposants vis-à-vis de la trajectoire de référence considérée. Si le système possède une mesure ergodique, toutes les conditions initiales⁶ mènent aux mêmes exposants de Lyapunov [150]. Toutefois, si l'on considère des exposants à temps fini ou des systèmes moins chaotiques, les exposants peuvent varier d'une trajectoire à une autre. Il est alors naturel de chercher à quantifier ces variations.

L'objet de cette thèse n'est pas de se concentrer sur l'étude de systèmes dynamiques particuliers de basse dimension, mais plutôt de se tourner vers la frontière entre la théorie des systèmes dynamiques et la physique statistique. De la même manière que les observables statiques se concentrent autour de leur valeur moyenne dans la limite thermodynamique, on s'attend à ce que les fluctuations d'exposants de Lyapunov soient de plus en plus faibles lorsque l'on passe de modèles à faible nombre de degrés de liberté à des systèmes méso- ou macroscopiques [72]. Les outils de la physique statistique, telles les grandes déviations, sont alors un moyen adapté de quantifier les fluctuations d'observables dynamiques.

Cette ligne de recherche n'est pas nouvelle et les idées présentées dans cette section trouvent leur source dans les travaux de Ruelle à la fin des années 70 [164]. La construction des fonctions de grandes déviations effectuée ci-dessous est en particulier très proche de celle présentée dans [86]. L'utilisation de ce type d'approche pour des systèmes stochastiques a, par ailleurs, été proposée dans [14].

1.2.4 Grandes déviations de l'exposant de Lyapunov maximal

1.2.4.1 Intérêt du plus grand exposant

Dans un premier temps, nous allons nous concentrer sur les grandes déviations de l'exposant de Lyapunov maximal, qui est une observable particulièrement intéressante. En effet, il correspond tout d'abord à la norme infini du vecteur d'exposants de Lyapunov :

$$|\boldsymbol{\lambda}|_\infty = \sup_i |\lambda_i| = |\lambda_1| \quad (1.17)$$

Ainsi, bien qu'il ne permette pas une description complète du spectre d'exposants, il recèle néanmoins une information non-triviale sur celui-ci. Ensuite, il est la mesure naturelle de l'imprédictibilité d'un système dynamique. De fait, considérons une base $\{\mathbf{e}_i\}$ de vecteurs propres orthonormaux⁷ de $U^\dagger(t)U(t)$, une perturbation quelconque autour d'une certaine condition initiale aura typiquement une composante non nulle suivant chaque vecteur propre :

$$\delta\mathbf{x}(0) = \sum_i \alpha_i \mathbf{e}_i, \quad \alpha_i \neq 0 \quad (1.18)$$

⁶Sauf pour un ensemble de mesure nulle.

⁷ $U^\dagger U$ est hermitienne. Elle est donc diagonalisable en base orthonormée et ses valeurs propres sont réelles.

Au temps t , la norme de la perturbation s'écrit⁸ :

$$\begin{aligned}
 |\delta\mathbf{x}(t)|^2 &= \sum_{ij} \alpha_i^* \alpha_j e_i^\dagger U^\dagger(t) U(t) e_j \\
 &= \sum_{ij} \alpha_i^* \alpha_j \exp[2t\lambda_j(t)] e_i^\dagger e_j \\
 |\delta\mathbf{x}(t)|^2 &= \sum_i |\alpha_i|^2 \exp[2t\lambda_i(t)]
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

Cette somme est rapidement dominée par le plus grand exposant de Lyapunov λ_1 et l'on a donc :

$$|\delta\mathbf{x}(t)| \simeq |\alpha_1| \exp[t\lambda_1] \propto |\delta\mathbf{x}(0)| \exp[t\lambda_1] \tag{1.20}$$

À chaque fois qu'un temps $\tau = \frac{1}{\lambda_1}$ s'écoule, on perd un facteur e dans la précision des données⁹. τ s'appelle le temps de Lyapunov du système. Par exemple, le temps de Lyapunov des planètes internes du système solaire (Mercure, Vénus, la Terre et Mars) est d'environ 5 millions d'années [111, 115, 178]. Cela veut dire que si l'on a une précision initiale d'une centaine de mètres sur la position d'une planète, elle n'est plus au bout de 10 millions d'années¹⁰ que d'un kilomètre, au bout de 20 millions d'années de 10 kilomètres, etc. On voit sur cet exemple tout le sens physique de la sensibilité aux conditions initiales, plus agréable au physicien qu'une définition purement topologique du chaos, quelle que soit l'élégance de celle-ci.

1.2.4.2 Grandes déviations de λ_1

Dans cette partie, nous allons présenter l'application du formalisme des grandes déviations à l'étude des systèmes dynamiques. Ce formalisme étant à la base de la physique statistique, nous essaierons de faire référence à celle-ci dès qu'une analogie sera susceptible d'apporter un éclairage intéressant aux notions introduites.

Construction des fonctions de grandes déviations

Pour étudier les fluctuations de $\lambda_1(t)$, nous cherchons donc à obtenir des informations sur la distribution de probabilité $P(\lambda_1, t)$ d'observer un exposant maximal λ_1 au bout d'un temps t . Cette probabilité correspond aux différentes conditions initiales, réalisations du bruit¹¹, etc. Si l'on suppose que les corrélations temporelles du système sont finies, $P(\lambda_1, t)$ se met génériquement sous la forme :

$$P(\lambda, t) \sim e^{S(\lambda)} \quad S(\lambda) = ts(\lambda) \quad s(\lambda) \underset{t}{\sim} \mathcal{O}(1) \tag{1.21}$$

⁸On identifie le produit scalaire entre vecteurs $e_i \cdot e_j$ avec sa représentation matricielle $e_i^\dagger e_j$.

⁹Si l'on écrivait les données en base e et non en base 10, on perdrait un chiffre significatif à chaque fois qu'un temps τ s'écoule.

¹⁰ $5 \log 10 \simeq 10$.

¹¹dans le cadre d'un système stochastique.

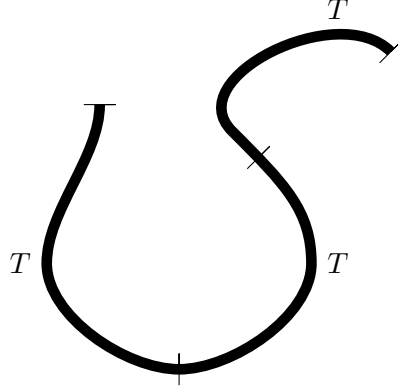


Fig. 1.1 : Si les corrélations temporelles sont finies, on peut toujours couper une trajectoire suffisamment longue en des segments plus petits que l'on considère indépendants en première approximation.

Donnons une justification intuitive à cette loi d'échelle. Lorsque le temps de corrélation τ est fini, on peut découper une trajectoire en n tronçons de durée $T \gg \tau$ grande, mais d'ordre 1 en t , ceux-ci pouvant être considérés indépendants (voir figure 1.1). La probabilité que la trajectoire totale ait un exposant de Lyapunov maximal λ s'écrit alors :

$$P(\lambda, t) = \sum_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_{t/T})T = \lambda t} P_1(\lambda_1, T) \dots P_{t/T}(\lambda_{t/T}, T) = \sum_{(\lambda_1 + \dots + \lambda_{t/T})T = \lambda t} e^{S_1(\lambda_1, T) + \dots + S_{t/T}(\lambda_{t/T}, T)} \quad (1.22)$$

L'exposant de chaque terme du membre de droite est la somme de t/T facteurs d'ordre 1 et est donc d'ordre t . Aux temps longs, $P(\lambda, t)$ est dominée par le plus grand des facteurs exponentiels et la loi d'échelle (1.21) est donc bien satisfaite.

Notons une première analogie avec la mécanique statistique. On procède en effet de manière similaire lorsque l'on cherche à montrer qu'une observable, par exemple l'entropie S d'un macro-état d'aimantation m donnée d'un système de N spins, est extensive, i.e. :

$$\tilde{P}(m) \sim e^{\tilde{S}(m)} \quad \tilde{S}(m) = N\tilde{s}(m) \quad \tilde{s}(m) \underset{N}{\sim} \mathcal{O}(1) \quad (1.23)$$

On suppose alors que la longueur de corrélation ξ est finie et l'on découpe le système en N/n sous-systèmes de taille n , grande devant ξ mais d'ordre 1 en N . Ces derniers peuvent ainsi être considérés indépendants. La probabilité d'observer une aimantation m est dans ce cas :

$$\tilde{P}(m) = \sum_{n(m_1 + \dots + m_{N/n}) = mN} \tilde{P}_1(m_1) \dots \tilde{P}_{N/n}(m_{N/n}) = \sum_{n(m_1 + \dots + m_{N/n}) = mN} e^{\tilde{S}_1(m_1) + \dots + \tilde{S}_{N/n}(m_{N/n})} \quad (1.24)$$

Il y a N/n termes d'ordre 1 dans les exposants du membre de droite et ceux-ci sont donc d'ordre N . Le plus grand des exposants domine exponentiellement la somme¹² et $P(m)$ est donc bien égal à l'exponentielle d'un nombre d'ordre N .

¹²Pour trouver quel est ce terme, il faut imposer que l'exposant soit maximal. Si tous les sous-systèmes sont identiques, ils auront alors typiquement la même aimantation. En effet, en remarquant que $m_{N/n} = \frac{mN}{n} - m_1 - \dots - m_{m/n-1}$ et en dérivant l'exposant par rapport à m_j , on obtient alors $\tilde{S}'(m_j) = \tilde{S}'(m_{N/n})$.

Pour calculer $P(\lambda_1, t)$, il faut « compter » le nombre de trajectoires qui ont un exposant maximal égal à λ_1 . Cela ressemble fortement à la construction de l'ensemble microcanonique en physique statistique, où l'on détermine le nombre $\Omega(E)$ de micro-état d'énergie E . La fonction de grandes déviations $S(\lambda_1, t)$ joue donc un rôle similaire à l'entropie $S(E)$. Remarquons que le rôle de grand paramètre que joue N en physique statistique est ici occupé par t . C'est tout le sens du « formalisme thermodynamique » de Ruelle [164]. De la même manière qu'en physique statistique, il est plus simple de travailler dans l'ensemble canonique que dans le microcanonique, nous introduisons par conséquent une fonction de partition dynamique

$$Z(\alpha, t) = \left\langle e^{\alpha t \lambda_1(t)} \right\rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} e^{t\mu(\alpha)} \quad (1.25)$$

où la moyenne $\langle . \rangle$ est réalisée par rapport à la probabilité $P(\lambda_1, t)$, i.e. sur les conditions initiales, les réalisations d'un éventuel bruit, etc. $\mu(\alpha)$ est l'analogie de $-\beta F$ où F est l'énergie libre de Helmholtz dans l'ensemble canonique.

Dans un langage plus mathématique, l'alternative à la construction explicite de $P(\lambda_1, t)$ est le calcul de la fonction génératrice des moments $Z(\alpha, t)$ ou de la fonction génératrice des cumulants $\mu(\alpha)$.

Une température pour la chaoticité

Arrêtons-nous quelques instants sur la définition de Z et sur l'interprétation physique du paramètre α . Si l'on poursuit l'analogie avec la mécanique statistique, $e^{\alpha \lambda_1 t}$ joue le rôle du poids de Boltzmann et α celui de $-\beta$, i.e. l'opposé d'une température inverse. Notons qu'au lieu d'être définies sur l'espace des configurations, ces quantités sont ici définies dans l'espace des trajectoires. Nous avons en quelque sorte construit une thermodynamique « spatio-temporelle » de notre système. Il s'agit simplement d'une image et ce formalisme est toutefois beaucoup moins puissant pour les systèmes dynamiques que la thermodynamique usuelle ne l'est pour les systèmes à l'équilibre, principalement en raison de l'absence d'un sens physique évident pour la température α^{-1} et de son inaccessibilité expérimentale. Nous reviendrons sur ce point par la suite dans la section 1.5 lorsque nous aborderons le problème des transitions de phase dynamiques.

L'analyse du poids $e^{\alpha \lambda_1 t}$ que l'on met sur les trajectoires donne une interprétation simple de l'influence de α , que nous présentons ci-dessous. Nous avons vu précédemment que

$$P(\lambda_1, t) = e^{ts(\lambda_1)} \quad (1.26)$$

Aux temps longs, cette mesure est dominée par les trajectoires dont l'exposant λ_1^* est un maximum global de s qui satisfait donc $s'(\lambda_1^*) = 0$ et les déviations de ces valeurs sont exponentiellement rares. Si l'on pèse désormais les trajectoires avec le « facteur de Boltzmann »

Cela signifie que le terme qui domine correspond à une même aimantation $m_j = m$ pour tous les sous-systèmes. L'analogie pour les trajectoires serait de prendre un temps T grand devant le temps de Poincaré d'un système ergodique. Les tronçons de trajectoire explorent alors typiquement les mêmes régions de l'espace des phases et ont tous le même exposant λ .

$e^{\alpha\lambda_1 t}$, on induit alors sur l'espace des trajectoires la mesure

$$\tilde{P}_\alpha(\lambda_1, t) = \frac{P(\lambda_1, t) e^{\alpha t \lambda_1}}{\int d\lambda_1 P(\lambda_1, t) e^{\alpha \lambda_1 t}} \propto P(\lambda_1, t) e^{\alpha \lambda_1 t} \sim e^{t[s(\lambda_1) + \alpha \lambda_1]} \quad (1.27)$$

qui est dominée aux temps longs par les trajectoires dont l'exposant λ_1^{**} satisfait

$$s'(\lambda_1^{**}) = -\alpha \quad (1.28)$$

De la même manière que fixer la température en physique statistique sélectionne dans la limite thermodynamique une densité d'énergie typique, imposer α revient ici à sélectionner une valeur de λ particulière. Concrètement, si α est positif, les trajectoires ont un poids d'autant plus grand que leur exposant de Lyapunov maximal est grand tandis qu'à l'inverse α négatif favorise des trajectoires atypiquement régulières.

Expliquons schématiquement pourquoi l'observation de trajectoires de chaoticité atypique est généralement difficile. Supposons que l'ensemble des trajectoires d'un système dynamique soit dominé par une seule valeur de λ_1 , c'est-à-dire que $s(\lambda_1, t)$ ait un unique maximum global λ_1^* . Si l'on essaie de construire Z en faisant N simulations et en calculant pour chacune $e^{\alpha\lambda_1 t}$, celles-ci donneront des valeurs de λ_1 qui fluctuent autour de λ_1^* . Or Z est dominée par des trajectoires dont l'exposant maximal λ_1^{**} satisfait $s'(\lambda_1^{**}) = -\alpha$. Les valeurs λ_1^* et λ_1^{**} sont des propriétés intrinsèques de s et ne dépendent donc pas de t aux temps longs. La différence $\lambda_1^* - \lambda_1^{**}$ est par conséquent d'ordre 1 en t . La distribution $P(\lambda_1, t)$ étant exponentiellement piquée autour de λ_1^* , il faut un nombre exponentiel de réalisations pour observer avec une probabilité d'ordre 1 de telles déviations de λ_1 . Ainsi, pour échantillonner correctement $Z(\alpha, t)$, il faut un nombre exponentiellement grand de simulations, ce qui est numériquement inaccessible. C'est en ce sens que l'on parle de *grandes déviations*.

Au contraire, si l'on sait réaliser un thermostat imposant α , on peut alors rendre typique des trajectoires au préalable exponentiellement rares. Un nombre fini de mesures n'est alors plus gênant puisque l'on échantillonne avec des probabilités d'ordre 1 le voisinage de λ_1^{**} . Pour faire un parallèle avec la mécanique statistique, échantillonner brutalement $Z(\alpha)$ revient à essayer de construire la fonction de partition d'un gaz à une température T_1 à partir de simulations réalisées à une température T_2 : les configurations échantillonnées ont une énergie typique sensiblement différentes de celles correspondant à T_1 et leur contribution à la fonction de partition est exponentiellement faible. Cela revient à essayer de construire la distribution de Boltzmann en n'échantillonnant que sa queue.

L'intérêt d'introduire ce formalisme pour les systèmes dynamiques est double. D'abord, il permet d'exporter tout le langage de la physique des transitions de phase vers la dynamique, ce que nous ferons dans la section 1.5, mais surtout, bien que la réalisation expérimentale d'un thermostat qui fixerait α soit « difficilement envisageable », son implémentation numérique est très simple. C'est la base de la *dynamique biaisée par les Lyapunov* que nous présentons dans la section 1.3.

1.2.5 Système hamiltonien

Avant de présenter l'implémentation algorithmique d'un thermostat pour la chaoticité, nous allons tout d'abord construire le formalisme présenté dans la section précédente pour une classe particulière de systèmes dynamiques : les systèmes hamiltoniens. Si la dynamique biaisée s'applique dans un cadre beaucoup plus général¹³, cela nous permettra néanmoins d'introduire l'algorithme sur un exemple concret. Considérons donc un système hamiltonien possédant N degrés de liberté, dont l'évolution s'écrit :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (1.29)$$

On souhaite tout d'abord construire la fonction de partition dynamique (1.25), ce qui impose de donner un sens à la valeur moyenne $\langle \cdot \rangle$. La question des mesures invariantes dans les systèmes hamiltoniens est ardue. Une manière simple de la contourner est d'introduire un petit bruit, rendant ainsi la dynamique stochastique. Par exemple, si l'on impose un bruit tangent à la surface d'énergie, on peut montrer que la mesure invariante est simplement la mesure microcanonique (annexe A). La moyenne (1.25) revient alors à prendre une distribution de conditions initiales uniforme sur la surface d'énergie et à échantillonner sur les différentes réalisations du bruit. Toutefois, l'addition d'un bruit perturbe a priori le système étudié et l'on aimerait savoir ce qui se passe dans la limite de bruit nul. C'est la question de la stabilité stochastique [46] du système. Cette notion, qui remonte à Kolmogorov (voir [173]), est une manière très naturelle pour le physicien de se poser la question de l'existence d'une « bonne » mesure pour un système hamiltonien. Ce que l'on en retiendra est que la limite de faible bruit est une manière tout à fait légitime de définir la mesure SRB d'un système physique lorsque celle-ci existe [46] et l'approche que nous suivons ici est donc moralement acceptable.

Considérons donc une dynamique légèrement différente :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} + \sqrt{2\varepsilon}\eta_i \quad (1.30)$$

où les η_i sont des bruits blancs gaussiens de variance 1. Notons tout de suite que les η_i induisent une diffusion en énergie, ce qui, de manière générale, n'est pas souhaitable. On montre dans l'annexe A comment procéder avec un bruit conservatif. L'équation d'évolution pour la densité de probabilité de ce système est fournie par l'équation de Liouville modifiée :

$$\frac{\partial P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} = -H_\varepsilon P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad H_\varepsilon = \sum_i -\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial p_i^2} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \quad (1.31)$$

On peut alors définir une distribution de probabilité d'exposant de Lyapunov maximal au temps t par

$$P(\lambda_1, t) = \int \mathcal{D}[\mathbf{q}, \mathbf{p}] \delta[\lambda_1 - \lambda_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)] \quad (1.32)$$

¹³par exemple pour des applications ou encore des systèmes continus en temps, mais dissipatifs.

où $\lambda_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ est défini à la formule (1.16). L'échantillonnage des trajectoires correspond, comme nous l'avons dit précédemment, aux diverses réalisations du bruit et aux différentes conditions initiales. L'évolution des vecteurs tangents unitaires \mathbf{v} est donnée par (1.12) :

$$\dot{v}_i = - \sum_j A_{ij} v_j + v_i \sum_{kl} v_k A_{kl} v_l \quad (1.33)$$

où A est la matrice $2N \times 2N$ définie comme

$$A = \begin{pmatrix} -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} & -\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} & \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

Dans la suite, on note $N(\mathbf{v}) = - \sum_{ij} v_i A_{ij} v_j$.

Avant de pouvoir implémenter le calcul de Z , nous allons réécrire la formule (1.25) en terme d'intégrales de chemin, pour reconnaître un opérateur d'évolution généralisé, dans lequel nous lirons l'algorithme à utiliser. Nous souhaitons calculer

$$\langle e^{\alpha \lambda_1 t} \rangle_{\text{traj.}} = \langle e^{-\alpha \sum_{ij} \int_0^t v_i A_{ij} v_j dt} \rangle_{\text{traj.}} \quad (1.35)$$

où la moyenne est réalisée sur les différentes trajectoires possibles. Grâce au bruit que nous avons ajouté, la mesure stationnaire est la mesure plate¹⁴ et la probabilité d'une trajectoire se réduit donc à celle de la réalisation du bruit :

$$\begin{aligned} \langle e^{\alpha \lambda t} \rangle_{\text{traj.}} &= \int \mathcal{D}[\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{v}, \boldsymbol{\eta}] \prod_i \delta \left(\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) \delta \left(\dot{p}_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \sqrt{2\varepsilon} \eta_i \right) \\ &\delta \left(\dot{v}_i + \sum_j A_{ij} v_j - v_i \sum_{kl} v_k A_{kl} v_l \right) e^{-\sum_i \int_0^t dt \frac{\eta_i^2}{2}} e^{-\sum_{ij} \int_0^t dt \alpha v_i A_{ij} v_j} \end{aligned} \quad (1.36)$$

L'intégrale porte sur toutes les trajectoires possibles du système, les fonctions δ imposent que ces trajectoires soient des solutions des équations du mouvement (1.30) et la gaussienne correspond à la probabilité de la réalisation du bruit. Puisque nous allons simplement utiliser cette intégrale de chemin pour reconnaître un opérateur d'évolution, et que le bruit n'est pas multiplicatif, nous ne faisons pas attention à la discrétisation des équations du mouvement¹⁵. En utilisant la représentation de Fourier des fonctions δ et en effectuant l'intégrale gaussienne sur le bruit, on trouve alors :

$$\langle e^{\alpha \lambda t} \rangle_{\text{traj.}} = \int \mathcal{D}[\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{v}] e^{\int dt \left\{ \sum_{i=1}^N \left[\hat{q}_i \dot{q}_i + \hat{p}_i \dot{p}_i + \varepsilon \hat{p}_i^2 - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \hat{q}_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \hat{p}_i \right] + \sum_{i=1}^{2N} \left[\hat{v}_i \dot{v}_i + \hat{v}_i \left(\sum_{j=1}^{2N} A_{ij} v_j + v_i N(\mathbf{v}) \right) \right] + \alpha N(\mathbf{v}) \right\}} \quad (1.37)$$

Ceci correspond à l'élément de matrice

$$\langle e^{\alpha \lambda t} \rangle_{\text{traj.}} = \langle - | e^{-t(H - \alpha N(\mathbf{v}))} | P_0(\mathbf{x}_0, \mathbf{v}_0) \rangle \quad (1.38)$$

¹⁴Dans le cas d'un bruit conservatif, présenté dans l'annexe A, il s'agit de la mesure microcanonique.

¹⁵Cela sera fait aux sections 5.1.1 et 5.2.1, lorsque nous construirons la supersymétrie associée aux équations de Langevin avec et sans inertie.

où P_0 est la distribution initiale des positions, impulsions et vecteurs tangents, et H est donné par

$$H = H_\varepsilon - \sum_i \frac{\partial}{\partial v_i} \left[\sum_j A_{ij} v_j + N(\mathbf{v}) v_i \right] \quad (1.39)$$

Celui-ci traduit simplement le fait que les positions et vecteurs tangents évoluent via (1.30) et (1.33). Cet élément de matrice ne correspond pas à une équation de Langevin usuelle car le terme $-\alpha N(\mathbf{v})$ ne conserve pas la probabilité. En effet, l'évolution

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -(H_\varepsilon + \alpha v_i A_{ij} v_j) P \quad (1.40)$$

se traduit par

$$\int d\mathbf{x} d\mathbf{v} \frac{\partial P}{\partial t} = -\alpha \int d\mathbf{x} d\mathbf{v} v_i A_{ij} v_j P \quad (1.41)$$

Cela signifie simplement que si l'on représente $P(t)$ par une population de marcheurs dans l'espace des $(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{v})$, chaque marcheur est répliqué ou tué au cours de l'évolution avec un taux $-\alpha N(\mathbf{v})$, soit α fois le taux d'extension du vecteur tangent non normalisé $\mathbf{u}(t)$. C'est la base de la *dynamique biaisée par les Lyapunov*.

1.3 Algorithme

1.3.1 Dynamique biaisée par les Lyapunov

Pour calculer la fonction de partition Z et réaliser la distribution correspondant à la température α^{-1} , nous allons implémenter l'évolution induite par $H_{FP} + \alpha v_i A_{ij} v_j$. Pour cela, nous utilisons une dynamique de population, propice à représenter des évolutions ne conservant pas la probabilité. Ce type d'algorithme est fréquemment utilisé en mécanique quantique, pour le calcul d'états excités d'Hamiltonien de Schrödinger, et appartient à la classe des algorithmes de type *Diffusion Monte Carlo* [2, 21, 42, 79, 99, 145, 146]. Notons qu'une alternative à ce type de méthode est l'utilisation de *Monte Carlo* standard¹⁶ directement dans l'espace des trajectoires (c'est, par exemple, la stratégie suivie par *Transition path sampling* [51]). Une telle stratégie a été proposée par le passé pour la recherche de trajectoires stables [124] et pourrait probablement être modifiée pour reproduire la distribution à température α^{-1} . Toutefois, il est très difficile de travailler avec ce type de méthode sur des trajectoires longues dans des systèmes chaotiques¹⁷ et nous pensons que les dynamiques de population sont plus adaptées à ce genre de système.

On considère une population de \mathcal{N} marcheurs dans l'espace des phases dont on note \mathbf{q} et \mathbf{p} les positions et impulsions. À chaque marcheur on associe de plus un vecteur tangent unitaire \mathbf{v} . On choisit alors un pas de temps dt et on fait évoluer le système sur un temps

¹⁶de type *Metropolis*, par exemple.

¹⁷D'une part, la moindre modification de la trajectoire a des conséquences dramatiques, d'autre part, maintenir la structure de la trajectoire est alors difficile.

total $t = Tdt$. À $t = 0$, les \mathcal{N} marcheurs démarrent d'une distribution de positions initiales que l'on choisit librement. À chaque temps $t' = ndt$:

1] pour chaque marcheur

- on fait évoluer (\mathbf{q}, \mathbf{p}) avec la dynamique hamiltonienne bruitée (1.30),
- le vecteur \mathbf{v} évolue suivant la dynamique tangente

$$\dot{v}_i = -A_{ij}v_j \quad (1.42)$$

- \mathbf{v} est ensuite renormalisé et l'on retient le facteur de renormalisation $N(n)$ appliqué au temps $t = ndt$,

2] chaque marcheur est alors répliqué avec le taux $N(n)^\alpha$ lui correspondant. Pour cela, on tire au hasard un nombre ε entre 0 et 1 et l'on calcule¹⁸ $\tau = \lfloor \varepsilon + N(n)^\alpha \rfloor$,

- si $\tau = 0$, on supprime le clone,
- si $\tau > 1$, on en crée $\tau - 1$ copies identiques,

3] après la phase de réplication, la population de marcheurs est composée de $\mathcal{N}(n+1)$ particules, au lieu des $\mathcal{N}(n)$ initiales. On garde la valeur du facteur $R(n) = \frac{\mathcal{N}(n+1)}{\mathcal{N}(n)}$,

- si $\mathcal{N}(n+1) < \mathcal{N}(n)$, on clone au hasard $\mathcal{N}(n+1) - \mathcal{N}(n)$ particules,
- si $\mathcal{N}(n+1) > \mathcal{N}(n)$, on en tue aléatoirement $\mathcal{N}(n+1) - \mathcal{N}(n)$,

On récupère finalement $\mathcal{N}(n+1) = \mathcal{N}(n) = \mathcal{N}(0)$ marcheurs.

La fonction de partition dynamique s'obtient grâce aux facteur $R(n)$:

$$Z(\alpha, t) = \prod_{n=1}^T R(n) \quad (1.43)$$

et la pression topologique via

$$\mu(\alpha, t) = \frac{1}{t} \sum_{n=1}^T \log R(n) \quad (1.44)$$

La distribution de trajectoires décrite par les marcheurs converge vers la « distribution de Boltzmann » à la température α^{-1} .

1.3.2 Quelques remarques sur l'implémentation numérique

1.3.2.1 Taille de la population

La renormalisation de la population n'est *en principe* pas nécessaire puisque les deux premiers pas représentent à eux seuls la dynamique stochastique correspondant à (1.40). Sans le 3^e pas de l'algorithme, $Z(\alpha, t)$ serait simplement donnée par le ratio entre les populations au temps t et à l'instant initial. Toutefois, Z augmente ($\alpha > 0$) ou décroît ($\alpha < 0$) exponentiellement avec t et la population ferait donc de même, ce qui n'est pas souhaitable pour des raisons numériques évidentes. Nous avons proposé ici une manière possible de contourner ce problème sans endommager l'échantillonnage.

¹⁸ $\lfloor x \rfloor$ est la partie entière de x .

Une alternative consiste à suivre une stratégie du type *Go with the winner* (voir [85] et les références que contient cet article). L'idée est d'associer à chaque particule un poids W qui augmente à chaque pas de temps de $N(n)^\alpha$. Si l'on s'en tenait là, chaque particule aurait au bout d'un temps t un poids $\exp(\alpha\lambda_1 t)$. Toutefois, comme nous l'avons expliqué à la section 1.2.4.2, les trajectoires échantillonnées seraient les trajectoires typiques ($s'(\lambda_1) = 0$) et non celles qui réalisent un échantillonnage correct de Z ($s'(\lambda_1) = -\alpha$). Il faut donc avoir à nouveau recours à une méthode d'enrichissement de l'échantillonnage pour favoriser les trajectoires pertinentes.

Pour cela, on définit deux taux W^+ et W^- tels que si le poids W d'une particule dépasse W^+ , on la remplace par deux particules de poids $W/2$ et s'il devient plus petit que W^- , on la tue avec probabilité $1/2$ et on lui donne un poids $2W$ autrement. Ceci assure à nouveau que les trajectoires ayant un poids fort soient bien échantillonnées et que l'on ne perde pas de temps à échantillonner des trajectoires qui ne contribuent pas à Z . De plus, la réplication proposée respecte bien en moyenne le poids de chaque trajectoire. La difficulté est alors de bien choisir $W^+(t)$ et $W^-(t)$. Pour cela, on utilise au temps t' l'estimation $Z_{\text{est}}(t')$ entre les temps 0 et t' de Z sur l'ensemble des clones dont on dispose au temps t' . On choisit typiquement $W^+(t') = CZ_{\text{est}}(t')$, $W^- = \frac{1}{C}Z_{\text{est}}(t')$, où C est une constante comprise entre 1 et 10. Si au début de la simulation, cette approximation est a priori mauvaise (puisque Z est dominée par des trajectoires rares), elle s'améliore au cours du temps et on est assuré de ne pas avoir de prolifération exponentielle aux temps longs¹⁹.

Notons finalement que si l'on remplace, dans l'algorithme que nous avons proposé, le taux de réplication $N_\beta(n)^\alpha$ du clone β par un taux normalisé

$$\frac{N_\beta(n)^\alpha}{\sum_\gamma N_\gamma(n)^\alpha}, \quad (1.45)$$

on obtient une stratégie très proche des simulations de type *Go with the winner*.

1.3.2.2 Implémentation du bruit

Le mouvement des particules dans l'espace des phases est décrit par une dynamique hamiltonienne bruitée. Pour implémenter numériquement ce type d'équation, on cherche en général à satisfaire deux contraintes : d'abord, lorsque le bruit tend vers zéro, on souhaite récupérer la structure symplectique des équations hamiltoniennes ; ensuite, lorsque le bruit est fini, on désire obtenir une distribution d'équilibre qui corresponde à la distribution théorique²⁰.

Dans le cadre de l'équation de Kramers (Hamilton+bruit+friction), de nombreux algorithmes ont été développés pour cela (voir par exemple [123]) et nous les utilisons dans la troisième partie de cette thèse, lorsque la distribution d'équilibre est réellement importante.

Ici, la principale utilité du bruit est d'assurer la diversité des clones : si la dynamique sous-jacente est déterministe, deux copies d'un même marcheur ont nécessairement le même

¹⁹Notons que, puisque les trajectoires intéressantes sont exponentiellement rares, l'estimation initiale de Z sera nécessairement mauvaise, ce qui peut avoir des conséquences dramatiques sur le début de la simulation.

²⁰uniforme sur l'espace des phases pour un bruit additif, microcanonique pour un bruit conservatif, etc.

avenir et la réplication est alors inefficace ; au contraire, la présence d'un bruit assure la diversité des histoires des différents clones après clonage. En principe, on aurait pu de manière équivalente simuler une dynamique purement hamiltonienne et effectuer un clonage légèrement imparfait²¹, puis laisser la chaotité de la dynamique s'assurer de la diversité des futurs des clones. L'implémentation du bruit est donc beaucoup moins importante que celle de la dynamique sous-jacente.

Concrètement, nous avons utilisé deux types d'intégrateur symplectique, un d'ordre 2 (Leap Frog) et un d'ordre 8 (introduit par Yoshida [197]) pour intégrer les équations du mouvement. Pour appliquer le bruit, nous tirons au hasard un vecteur $\boldsymbol{\eta}$ sur une sphère de dimension N et de rayon $\sqrt{2\varepsilon dt}$ et l'ajoutons à \mathbf{p} . Lorsque l'on souhaite conserver l'énergie, il suffit alors de projeter ce vecteur sur la surface d'énergie :

$$\tilde{\eta}_i = \left(\delta_{ij} - \frac{p_i p_j}{|\mathbf{p}|^2} \right) \eta_j \quad (1.46)$$

On vérifie simplement que dans ce cas $\mathbf{p} \cdot \tilde{\boldsymbol{\eta}} = 0$. On peut de plus montrer que la mesure microcanonique est alors stationnaire. De même, en prenant dans la formule précédente

$$\eta_i = \mu_i - \frac{1}{N} \sum_j \mu_j \quad (1.47)$$

où $\boldsymbol{\mu}$ est un vecteur tiré au hasard sur une sphère de dimension N et de rayon $\sqrt{2\varepsilon dt}$, on obtient un bruit qui conserve l'impulsion totale. Tous les détails sur ces bruits multiplicatifs sont présentés dans l'annexe A.

1.3.2.3 Reproduction, mutation et sélection

Une manière simple de comprendre l'efficacité de ce type d'algorithme est de faire le parallèle avec la théorie de l'évolution. En effet, les trois principaux ingrédients de celle-ci sont l'existence d'une population de taille finie, qui se reproduit, est soumise à des mutations et est sélectionnée en fonction de son « adaptation » à l'environnement. Ici, notre population de clone est finie, se reproduit, est soumise à des « mutations » à travers la présence de bruit et subit une sélection puisque son taux de reproduction dépend de sa chaotité. Ainsi, c'est l'existence d'une pression de sélection qui explique la convergence de cet algorithme.

1.4 Quelques applications

Nous allons à présent appliquer la *dynamique biaisée par les Lyapunov* à différents exemples de complexité croissante. Le but final est bien sûr d'étudier ce qui était jusqu'à présent hors d'atteinte : des exemples de haute dimensionnalité. Cela sera fait à la section 1.4.3 pour une chaîne d'oscillateurs non-linéaires, possédant plusieurs centaines de degrés de liberté. Mais avant tout, pour illustrer l'algorithme, nous allons l'appliquer à des systèmes de basse dimensionnalité pour lesquels une représentation directe de l'espace des phases est possible.

²¹c'est-à-dire ajouter le bruit uniquement lors du clonage.

1.4.1 Double puits de potentiel

Les séparatrices jouent un rôle fondamental dans la théorie des systèmes dynamiques, car elles sont le berceau du chaos (cf section 1.4.2.1). Dans les systèmes intégrables²², la *dynamique biaisée par les Lyapunov* converge vers ces structures pour $\alpha = 1$ et les peuple uniformément. Ceci est illustré sur la figure 1.2 dans le cas d'un double puits de potentiel unidimensionnel, défini par $\mathcal{H}(p, q) = p^2/2 + q^4 - 2q^2$. Un système hamiltonien possède automatiquement une constante du mouvement : le Hamiltonien \mathcal{H} . Ainsi, un système unidimensionnel est nécessairement intégrable.

Les particules peuvent soit osciller dans un des puits, soit passer de l'un à l'autre. La séparatrice est la courbe limite entre ces deux régimes. Le seul point présentant un exposant de Lyapunov non nul étant le point selle, sa variété instable (l'ensemble des trajectoires qui en émanent) est l'attracteur naturel de la dynamique biaisée. Pour $\alpha = 1$, les clones diffusent lentement en énergie sous l'effet du bruit avant de converger vers la séparatrice, où ils se multiplient plus favorablement. Puisque la population totale est maintenue constante, les clones qui s'éloignent de la zone stochastique sont répliqués moins favorablement et disparaissent donc par pression de sélection.

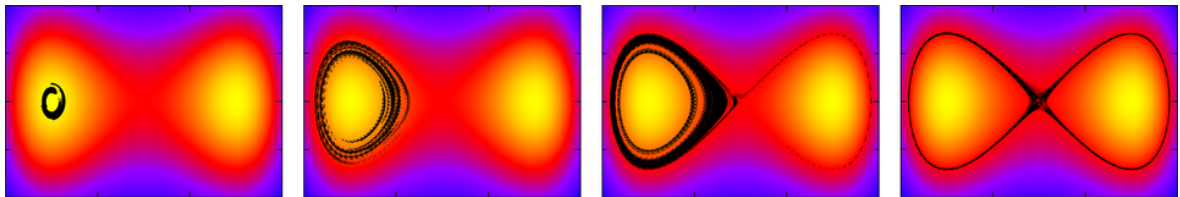


Fig. 1.2 : Convergence vers la séparatrice. L'axe horizontal correspond aux positions q , l'axe vertical aux impulsions p . Le code couleur représente la valeur du Hamiltonien. Les marcheurs démarrent dans le puits de gauche ($t \sim 3000$) et diffusent en énergie ($t \sim 11450$) jusqu'à atteindre la séparatrice ($t \sim 11725$) où ils convergent finalement ($t > 12000$). 2000 marcheurs ont évolué avec la dynamique biaisée par les Lyapunov, pour $\varepsilon = 10^{-5}$ et $\alpha = 1$.

1.4.2 Transition vers le chaos

Nous allons étudier dans les deux prochaines sections des systèmes dont la chaotité est fixée par un paramètre extérieur qui permet de les faire passer de l'intégrabilité au chaos. Un troisième exemple (une famille de billards) est présenté dans l'annexe B. L'objet de cette thèse n'étant pas de traiter la théorie KAM [3, 103, 131], nous renvoyons aux nombreux ouvrages de référence qui présentent les théories de perturbation des systèmes intégrables [5, 121, 151]. Nous rappellerons toutefois succinctement les éléments de ces théories nécessaires à la compréhension des exemples présentés.

²²Un système est dit intégrable s'il possède autant de constantes du mouvement indépendantes que de degrés de liberté.

1.4.2.1 L'application standard

Chirikov a montré [45] que la dynamique d'un système hamiltonien au voisinage d'une résonance peut génériquement se ramener à l'étude d'un système plus simple, de type pendulaire. Pour étudier ce dernier, il a introduit un système dynamique symplectique désormais célèbre : l'application standard. Celle-ci est définie par

$$p_{n+1} = p_n - \frac{k\delta}{2\pi} \sin(2\pi q_n) \quad q_{n+1} = q_n + \delta p_{n+1} \quad (1.48)$$

sur espace périodique en q ²³. Elle représente l'évolution d'un rotor libre, soumis régulièrement à une force constante, d'orientation fixée [151]. δ caractérise la période du système et k l'intensité de la force. La limite $k \rightarrow 0$ correspond à des translations discrètes de q :

$$q_{n+1} = q_n + \delta p_n \quad p_n = p_0 \quad (1.49)$$

ce qui correspond à un système intégrable. De même, la limite $\delta \rightarrow 0$ correspond au pendule pesant et est intégrable. Lorsque k et δ sont strictement positifs, le système est d'autant plus chaotique que ceux-ci sont grands. Pour comprendre le paradigme de la transition vers le chaos, illustrée sur la figure (1.4), quelques éléments de théorie sont nécessaires.

Systèmes intégrables

Tout d'abord, on peut montrer que si $\mathcal{H}_0(q, p)$ est le Hamiltonien d'un système intégrable, il existe un jeu de coordonnées symplectiques²⁴ (I, θ) , dites variables d'angle-action, telles que les équations du mouvement s'écrivent :

$$\dot{I}_k = 0 \quad \dot{\theta}_k = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I_k} \equiv \omega_k(I) \quad (1.50)$$

Les I_k correspondent à N intégrales premières du mouvement tandis que les θ_k décrivent des trajectoires confinées sur des tores de dimension N , invariants sous la dynamique (1.50). La valeur des fréquences $\omega_k(I)$ dépend uniquement du tore sur lequel le mouvement a lieu, mais varie généralement en fonction de celui-ci. Il existe essentiellement deux types de tores : les tores dits « résonants » ou « rationnels », sur lesquels les fréquences ω_k satisfont une ou plusieurs relation du type

$$\sum_k n_k \omega_k = 0 \quad n_k \in \mathbb{Z} \quad (1.51)$$

et les autres. Une trajectoire d'un tore non-résonant le remplit densément tandis que celle d'un tore résonant remplit sur celui-ci un ensemble de mesure nulle. Notons qu'en dimension strictement supérieure à 2, la relation (1.51) *n'implique pas* un mouvement périodique tandis que c'est le cas pour $N = 1, 2$ et en particulier pour l'application standard et la famille de billards présentée dans l'annexe B.

²³On identifie $q = 0$ et $q = 1$.

²⁴i.e. obtenues à partir de (q, p) par un changement de variables canoniques.

Illustrons la différence entre ces deux types de tore sur l'exemple de l'application standard. Lorsque $k = 0$, les impulsions p sont des constantes du mouvement, le système est intégrable et chaque tore invariant est défini par la valeur correspondante de l'impulsion p_0 . Les trajectoires qui le composent correspondent à l'évolution (1.49). Elles sont périodiques si p_0 est rationnel et correspondent alors à un nombre fini de points : le tore correspondant est résonant. Au contraire, si p est irrationnel, l'ensemble des images d'un point par (1.49) remplit densément la ligne $p = p_0$ et le tore n'est pas résonant.

Ruptures des tores rationnels et séparatrices

La question de la généralité du caractère intégrable a longtemps traversé la communauté des physiciens et des mathématiciens. La structure décrite précédemment est-elle générique ou exceptionnelle ? Cette question se pose naturellement en terme de stabilité : si l'on perturbe un système intégrable, que se passe-t-il ? L'intégrabilité laisse-t-elle place à un chaos total ou au contraire survit-elle, avec des constantes du mouvement légèrement modifiées ? La réponse à cette question trouve son origine dans les travaux de Kolmogorov [103, 105] qui utilisa une suite de transformations canoniques astucieuses (méthode de superconvergence) pour montrer que les tores suffisamment non-résonants survivent à la perturbation tandis que les tores rationnels sont détruits. Puisque les tores rationnels sont denses, on pourrait penser que leur destruction va entraîner une complète chaoticité de l'espace des phases. Toutefois, ils forment un ensemble de mesure nulle et laissent donc de la « place » pour que des tores intégrables survivent²⁵. Le résultat final, qui fut démontré par Moser [131] et Arnold [3], est que, pour une valeur suffisamment faible de la perturbation, une zone chaotique de mesure finie apparaît tandis que la majeure partie de l'espace des phases reste dominée par des tores intégrables. Notons que la représentation de cet espace est toutefois délicate puisque l'ensemble des tores qui survivent est fractal. Pour comprendre ce qu'il advient des tores rationnels lorsque l'on perturbe le système étudié, mentionnons à présent le théorème de Poincaré-Birkhoff [22, 23, 37, 155]. Celui-ci stipule que lorsque lorsqu'un tore résonant se brise, il laisse lieu à une alternance de points fixes²⁶ elliptiques et hyperboliques. C'est ce que l'on voit sur la figure 1.4, où le tore résonant correspondant à $p = 1/3$ se casse, pour laisser place à 3 îles intégrables centrées chacune sur un point fixe elliptique. Autour de ces îles sont apparues des zones chaotiques qui émanent de 3 points fixes instables. Lorsque la perturbation augmente, les zones chaotiques entourant les îlots elliptiques issus des différents tores résonants fusionnent pour donner une seule grande mer stochastique.

²⁵Ceci peut se comprendre sur un exemple simple : si l'on prend l'ensemble des nombres rationnels p/q entre 0 et 1, on obtient un ensemble dense de mesure nulle. Si l'on ajoute une petite zone chaotique de largeur $e^{-\alpha(p+q)}$ autour de chacun d'eux, la taille de cette zone est strictement plus petite que 1. On peut, par exemple, la majorer par $\sum_{q \geq 2, 1 \leq p < q} e^{-\alpha(p+q)} = \frac{1}{(e^\alpha + 1)(e^\alpha - 1)^2}$. Pour $\alpha = 1$, cette borne supérieure vaut à peu près 0.09.

²⁶Pour $p = \frac{a}{b}$, il apparaît un nombre pair de points fixes, proportionnel à b .

Séparatrices et chaos

Le dernier ingrédient qui permet de comprendre intuitivement l'apparition du chaos est le devenir des séparatrices entourant des points fixes elliptiques et la raison pour laquelle la couche stochastique apparaît à leur niveau. À tout point fixe x_s , on associe des variétés *stable* et *instable*. La première correspond à l'ensemble des points qui convergent asymptotiquement vers x_s à temps infini tandis que la deuxième correspond aux points qui étaient confondus avec x_s à $t = -\infty$ ²⁷ (figure 1.3).

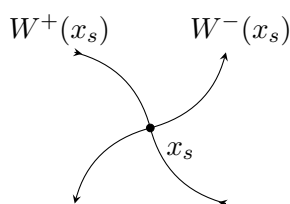


Fig. 1.3 : La variété stable $W^+(x_s)$ correspond à l'ensemble des points qui convergent vers x_s lorsque $t \rightarrow \infty$. La variété instable $W^-(x_s)$ correspond à l'ensemble des points qui convergent vers le point fixe x_s lorsque $t \rightarrow -\infty$.

Imaginons deux points fixes hyperboliques x_1 et x_2 entourant un point fixe elliptique x_e . Pour un système intégrable, la variété stable de x_1 correspondrait parfaitement à la variété instable de x_2 et réciproquement (figure 1.5.a). Ces variétés définiraient donc une séparatrice, entre une région oscillant autour du point fixe elliptique et le reste de l'espace des phases.

On comprend aisément que ce cas est exceptionnel et que $W^+(x_1)$ et $W^-(x_2)$ ne sont en général pas confondues. Effectivement, lorsque l'on perturbe un système intégrable, ces variétés ne coïncident plus et vont génériquement s'intersecter (figure 1.5.b). Nommons X un tel point d'intersection. Puisque celui-ci est sur la variété stable de x_1 , tel est également le cas de ses images par la dynamique. Mais puisque si l'on applique la dynamique renversée dans le temps, les images de X reviennent sur X , celles-ci sont également sur la variété instable de x_2 . Ainsi, on peut montrer que $W^+(x_1)$ et $W^-(x_2)$ s'intersectent un nombre infini de fois. En fait, tout point entre X et x_1 est une intersection de $W^+(x_1)$ et $W^-(x_2)$. Ces dernières sont de plus en plus sinueuses et les images itérées de X remplissent « stochastiquement » l'enchevêtrement créé par $W^+(x_1)$ et $W^-(x_2)$. La première représentation d'un enchevêtrement, tel celui présenté figure 1.5, est due à Melnikov, qui représenta ce que Poincaré avait décrit sans « oser » le dessiner.

Application de l'algorithme

Regardons à présent les structures vers lesquelles converge la *dynamique biaisée par les Lyapunov* le long de la transition vers le chaos. Notons que la méthode que nous avons présentée dans la section 1.3 ne se limite pas au cas hamiltonien. En particulier, on pourrait

²⁷ autrement dit à la variété stable de la dynamique renversée dans le temps.

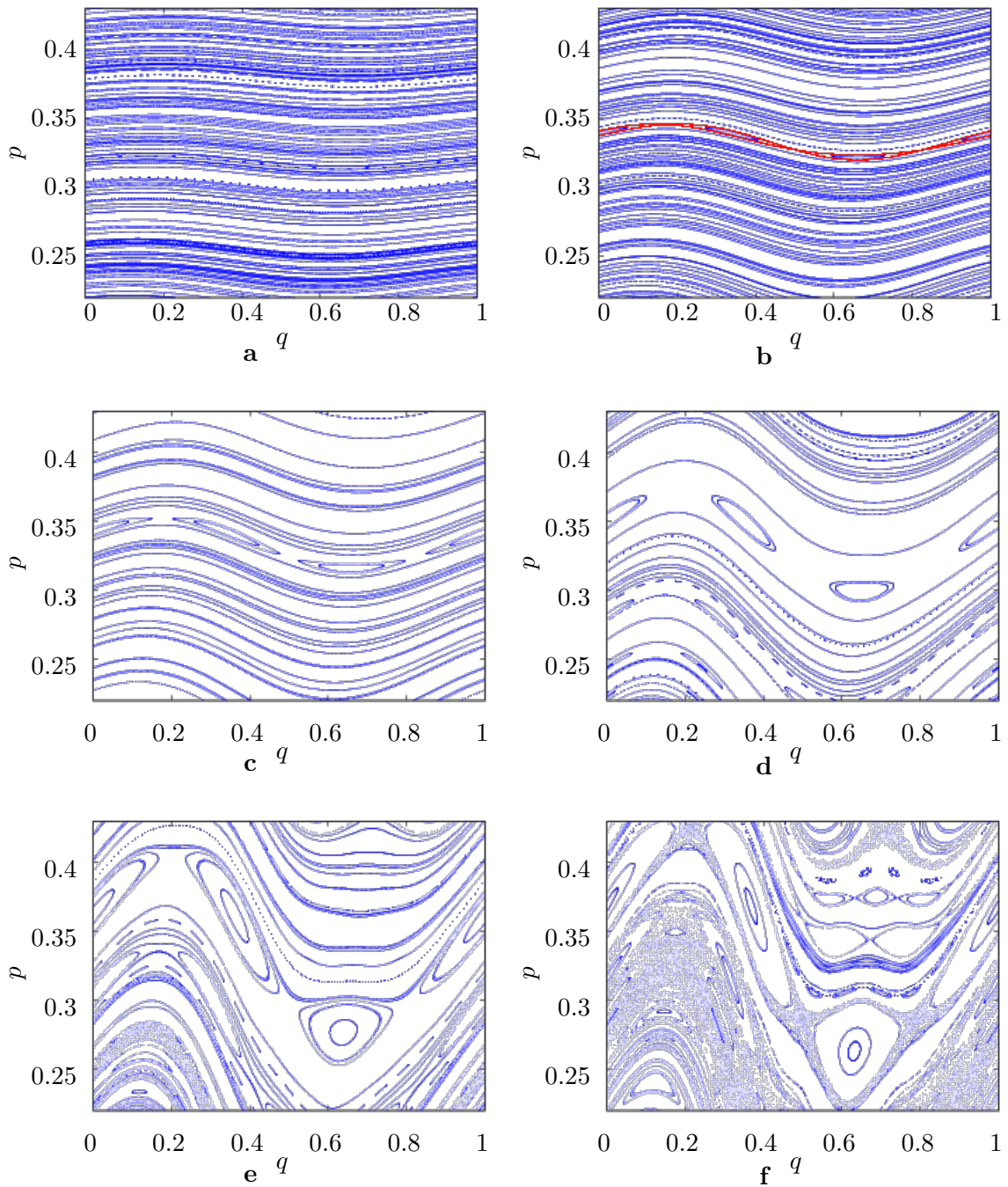


Fig. 1.4 : Trajectoires de l'application standard pour différentes valeurs de k . **a** : Limite quasi intégrable $k = 0,05$, les lignes iso- p du cas intégrable sont légèrement déformées, mais on ne voit pas à cette échelle de tores intégrables détruits. **b** : Lorsque k augmente (ici $k = 0,13$), les brisures de tores résonants sont plus apparentes. Le tore rationnel correspondant à $p = \frac{1}{3}$ a laissé place à 3 îles résonantes entourant 3 points fixes stables (elliptiques) et à 3 points fixes instables dont émane une courbe séparatrice (en rouge). **c**, **d** et **e** : Au fur et à mesure que k augmente (dans l'ordre $k = 0,2; 0,4; 0,7$) les courbes correspondant aux tores irrationnels se déforment de plus en plus et les îles résonantes grandissent. **f** : Lorsque k est suffisamment grand ($k = 0,9$ ici), on voit très nettement la zone chaotique entourant les îles résonantes.

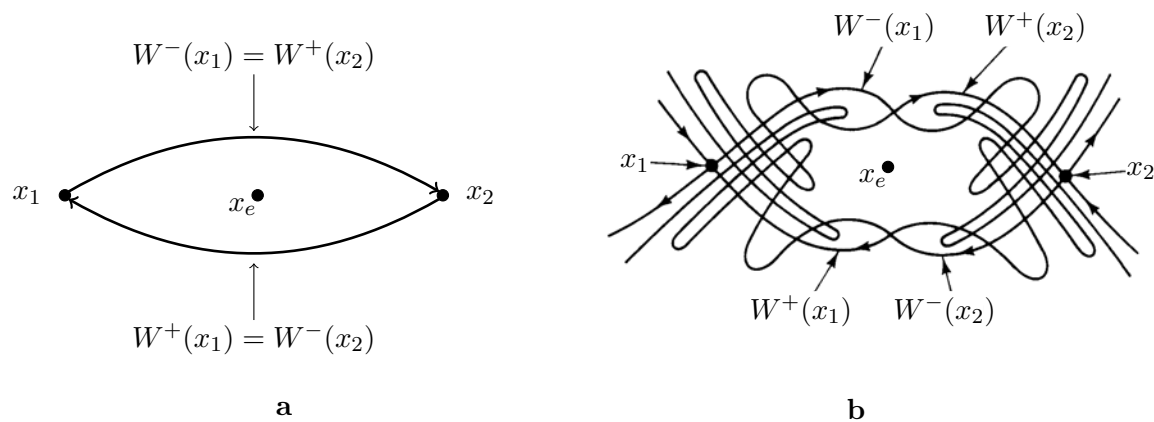


Fig. 1.5 : Deux points fixes instables x_1 et x_2 entourant un point fixe stable x_e . W^+ et W^- correspondent respectivement aux variétés stables et instables. **a :** Cas intégrable. La variété instable de x_1 correspond à la variété stable de x_2 et réciproquement. Ces variétés forment une courbe séparatrice qui isole les trajectoires oscillant autour du point fixe stable x_e du reste de l'espace des phases. **b :** Cas chaotique. L'enchevêtrement des variétés stables et instables de x_1 et x_2 correspond à une région où les images des points semblent évoluer stochastiquement. (Adapté de [151]).

la construire dans le cas des applications et non des flots. Il est toutefois plus simple de faire le lien entre ces deux types d'évolution. Ainsi, l'application standard peut être vue comme une évolution continue en temps, que l'on regarde stroboscopiquement :

$$\begin{aligned} \dot{q} = 0 \quad \dot{p} = \frac{k}{2\pi} \sin(2\pi q) & \quad \text{pour } t \in [2n\delta, (2n+1)\delta] \\ \dot{q} = p \quad \dot{p} = 0 & \quad \text{pour } t \in [(2n+1)\delta, (2n+2)\delta] \end{aligned} \quad (1.52)$$

et l'algorithme peut donc être appliqué directement. En particulier, la dynamique tangente est donnée par

$$u_q(n+1) = u_q(n) + \delta u_p(n+1) \quad u_p(n+1) = u_p(n) - k\delta \cos(2\pi q_n) u_q(n) \quad (1.53)$$

Pour $\alpha = 1$ dans un régime proche de l'intégrabilité (figure 1.6), les marcheurs se concentrent sur la variété instable qui émane du point fixe instable ($p = 0$; $q = 0, 5$). On reconnaît dans l'encart une structure typique de l'enchevêtrement décrit à la section précédente. Si l'on appliquait la dynamique biaisée sur l'application standard renversée dans le temps, on pourrait construire également la variété stable et obtenir l'enchevêtrement homocline complet²⁸.

Lorsque le chaos augmente, de nombreuses résonances secondaires apparaissent, autour desquelles de nouvelles zones chaotiques s'étendent. La couche la plus chaotique, qui est donc la zone de convergence privilégiée des marcheurs, entoure la résonance principale. Notons ici que les trajectoires intégrables sont des courbes de dimension 1. Elles séparent donc le plan

²⁸On parle respectivement d'enchevêtrements homocline et hétérocline lorsque les variétés stable et instable appartiennent à un seul point fixe ou à deux points fixes distincts.

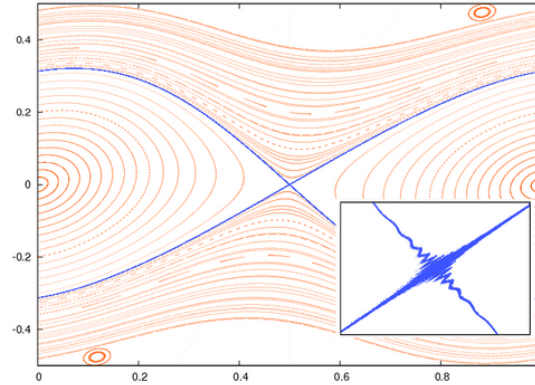


Fig. 1.6 : Application standard - limite quasi-intégrable - $\delta = 0,41$, $k = 1$. Les trajectoires de l'application standard non biaisée sont représentées en orange. En bleu, un millier de marcheurs à $t = 10\,000$, évoluant avec un bruit de variance $\varepsilon = 10^{-16}$. L'application est très légèrement chaotique et les marcheurs convergent pour $\alpha = 1$ vers la trajectoire instable émanant du point fixe instable. L'ecart est élargi 75 fois.

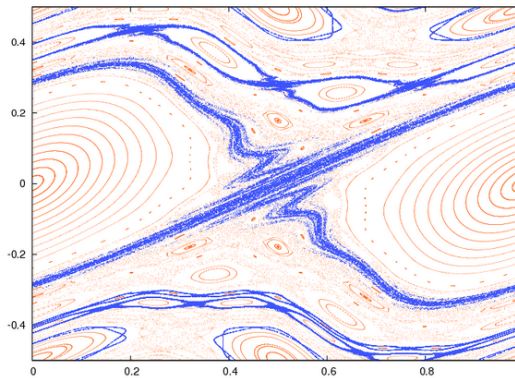


Fig. 1.7 : Application standard - structures secondaires - $\delta = 1$, $k = 1$. Les trajectoires de l'application standard non biaisée sont représentées en orange. En bleu, un millier de marcheurs à $t = 10\,000$, évoluant avec un bruit de variance $\varepsilon = 10^{-16}$. Plusieurs zones chaotiques secondaires sont révélées, en commençant la simulation avec les marcheurs localisés dans différentes îles intégrables avec $\alpha = 1$.

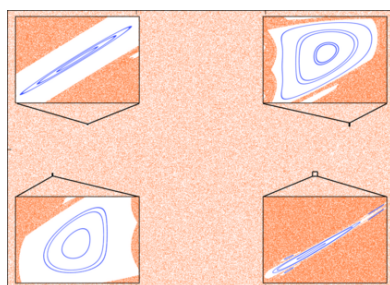


Fig. 1.8 : Application standard - îles intégrables - $\delta = 1$, $k = 7,7$ $\alpha = -1$. Les trajectoires de l'application standard non biaisée sont représentées en orange. En bleu, un millier de marcheurs à $t = 10\,000$, évoluant avec un bruit de variance $\varepsilon = 10^{-16}$. Les quatre dernières îles intégrables sont localisées dans un cas fortement chaotique [39]. Les encarts sont agrandis de 25 (en bas à droite) à 150 fois (haut) et sont centrés autour de : $(0, 207; 0, 09)$, $(0, 883; 0, 09)$, $(0, 116; -0, 09)$ et $(0, 8; -0, 09)$.

(q, p) , et jouent le rôle de barrière : les différentes couches chaotiques sont des états métastables pour la diffusion des marcheurs (figure 1.7). Démarrant d'une île intégrable secondaire, les marcheurs peuplent dans un premier temps la couche stochastique qui l'entoure, avant de converger vers des structures plus chaotiques.

Dans le cas d'un système extrêmement chaotique, lorsque la mer stochastique remplit quasiment tout l'espace des phases, la recherche d'îles intégrables devient un problème difficile. En basse dimension, l'utilisation d'un quadrillage systématique peut être utilisé, mais cette stratégie n'est pas applicable dès que le système possède plusieurs degrés de liberté. Ici, nous utilisons de manière alternative la dynamique biaisée avec $\alpha = -1$. Ce faisant, nous favorisons des trajectoires intégrables et révélons des îles chaotiques [39] (figure 1.8). Le cas de l'application standard amortie, qui est une application dissipative, est traitée dans l'annexe C.

1.4.2.2 Toile d'Arnold

Diffusion d'Arnold

Si tout ce que nous avons décrit jusqu'à présent reste qualitativement valide en plus haute dimension, il existe toutefois une différence majeure dès que le nombre de degrés de liberté d'un système hamiltonien dépasse 2. En effet, on a vu jusqu'à présent que les tores KAM séparent les différentes régions chaotiques de l'espace des phases. Ainsi, tant que la mer stochastique n'a pas envahi ce dernier, il n'y a pas de diffusion « globale » : le système peut parcourir stochastiquement de fines couches, mais reste prisonnier entre des tores invariants. Les variables d'action ne sont certes plus des constantes du mouvement mais leurs variations sont confinées.

Dès que le nombre de degrés de liberté dépasse 2, la topologie de la couche chaotique est profondément différente. En effet, un système hamiltonien ayant N degrés de liberté

possède un espace des phases de dimension $2N$. Puisque le Hamiltonien est nécessairement une constante du mouvement, les trajectoires sont confinées sur des variétés de dimension $2N - 1$. Par ailleurs, les tores rationnels correspondent à fixer les valeurs de N constantes du mouvement et sont donc des variétés de dimension N . Pour qu'une sous-variété puisse « séparer » un espace de dimension k , elle doit être de dimension $k - 1$. C'est par exemple le cas des droites dans le plan, des plans dans l'espace, etc... Par contre, si elle est de dimensionnalité plus faible, ce n'est plus le cas ²⁹. De la même manière, dès que $N < 2N - 2$, c'est-à-dire $N > 2$, les tores rationnels ne séparent plus l'espace des phases en régions déconnectées. Ainsi, dès que le système est perturbé, les différentes couches stochastiques forment génériquement une toile connexe sur laquelle le système diffuse. Entre autres, des variations globales des variables d'action sont désormais possibles dès la moindre perturbation. Ce phénomène porte le nom de diffusion d'Arnold [4]. Notons toutefois que cette diffusion est extrêmement lente lorsque la perturbation est faible³⁰.

Cette diffusion peut se comprendre de la manière suivante. Si le système démarre dans le voisinage d'un tore rationnel, il commence par « tomber » le long de sa variété instable. Celle-ci coupe alors la variété stable d'un autre tore, vers lequel évolue par conséquent le système, avant de s'échapper le long de la variété instable de ce deuxième tore et ainsi de suite. La succession d'intersections de variétés stables et instables forment une sorte de « toboggan stochastique » qui induit une diffusion dans l'espace des phases [16].

Notons que cette diffusion n'a pas qu'une importance conceptuelle. En effet, elle est, par exemple, préjudiciable dans les expériences de type synchrotron puisqu'elle peut déboucher sur la déstabilisation précoce du faisceau d'électrons [160]. De même, en mécanique céleste, elle peut être responsable de l'éjection de corps apparemment stables. Sa détection numérique fut par conséquent l'objet de nombreuses études. L'une des méthodes les plus célèbres pour la détecter est certainement l'analyse en fréquence [116], qui repose sur une analyse de Fourier subtile et met en évidence une diffusion du vecteur ω défini dans (1.50). Notons que cette méthode est très précise pour décrire les parties régulières de l'espace des phases et c'est donc la disparition de la régularité, plus que la quantification du chaos, qui est la signature d'une zone stochastique. Elle repose toutefois sur un échantillonnage systématique de l'espace des phases et est peu adaptée à l'échantillonnage de systèmes de haute dimension. Au contraire, la dynamique biaisée par les Lyapunov va directement se concentrer sur les régions chaotiques. En principe, rien n'interdirait de combiner ces deux types d'approches, par exemple en proposant un taux de réplification dépendant de la constante de diffusion du vecteur ω .

²⁹une droite ne sépare pas l'espace en deux régions déconnectées.

³⁰Une évaluation non rigoureuse de la constante de diffusion dans une résonance définie par des fréquences ω_i est donnée dans [45] : $D \sim \exp(-|\omega|/\sqrt{\varepsilon})$ où $|\omega| = \sum_i |\omega_i|$ et ε est l'intensité de la perturbation. Pour une borne supérieure rigoureuse, voir les travaux de Nekhoroshev [139].

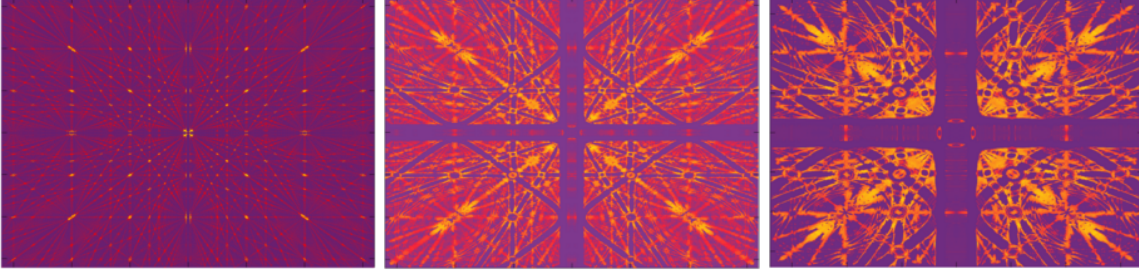


Fig. 1.9 : Toile d'Arnold. Résultat de la simulation avec la dynamique biaisée ($\alpha = 1$) pour différentes valeurs de μ (de gauche à droite 10^{-4} , $3 \cdot 10^{-3}$, $3 \cdot 10^{-2}$). Le code couleur représente le taux moyen de réplication. Les zones jaunes correspondent à des couches stochastiques tandis que les parties violettes correspondent à des tores intégrables. Lorsque la perturbation est faible, on reconnaît les lignes de résonance. La largeur de la zone chaotique est d'autant plus faible que l'ordre de la résonance est élevé.

Exemple

Considérons un système hamiltonien défini par [74] :

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + p_{N+1} + \frac{\mu}{\sum_{i=1}^{N+1} \cos q_i + N + 2} \quad (1.54)$$

Lorsque $\mu = 0$, le système est intégrable et les résonances sont définies par

$$\sum_{i=1}^N n_i p_i = n_{N+1} \quad \mathbf{n} \in \mathbb{Z}^{N+1} \quad (1.55)$$

Pour de petites valeurs de μ , le théorème KAM prédit l'apparition de fines couches chaotiques autour de ces résonances. Lorsque $N = 2$, ces dernières sont simplement des lignes dans le plan (p_1, p_2) . En utilisant la dynamique biaisée pour $\alpha = 1$, nous pouvons les localiser en représentant le taux de réplication en fonction des valeurs de p_1 et p_2 (figure 1.9). On voit apparaître en jaune les régions avec un taux de clonage élevé qui correspondent aux couches stochastiques apparues au niveau des résonances. Celles-ci forment bien un réseau de lignes décrit par

$$n_1 p_1 + n_2 p_2 = n_3 \quad (1.56)$$

Notons que si les trajectoires des marcheurs correspondent à celles de la diffusion d'Arnold, la diffusion des actions est induite par le bruit que nous avons ajouté à la dynamique et est donc beaucoup plus rapide que la réelle diffusion d'Arnold. Lorsque la perturbation augmente, la taille des zones stochastiques s'accroît, celles-ci fusionnent alors suivant le mécanisme de recouvrement de résonances [45] et le système entre dans un régime de chaos nettement plus prononcé.

Des figures telles que 1.9 ont été obtenues dans [74] en calculant sur une grille les exposants de Lyapunov aux temps courts. Bien qu'elle introduise de nombreux artefacts (comme

la rupture de symétrie $p_1 \leftrightarrow p_2$), cette méthode permet de capturer l'essentiel de la diffusion. Toutefois, elle est inapplicable en plus haute dimension puisque le nombre de points nécessaires pour faire une grille augmente exponentiellement avec le nombre de degrés de liberté.

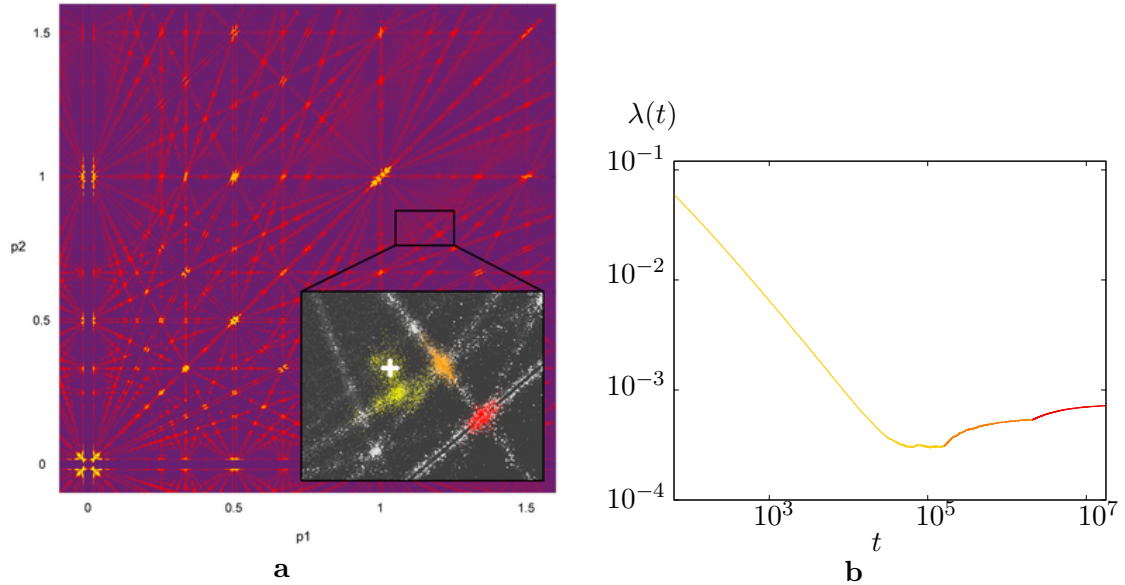


Fig. 1.10 : Convergence pour $\mu = 10^{-3}$. **a** : Démarrant d'un point choisi au hasard (croix blanche), les clones évoluent en trois temps : en jaune $0 < t < 160\,000$, orange pour $160\,000 < t < 2\,000\,000$ et rouge pour $2\,100\,000 < t < 2\,200\,000$. La toile complète est produite en répétant l'opération en partant de différentes conditions initiales. Bien que la diffusion suive les traces de la diffusion d'Arnold, le mouvement des marcheurs est induit par le bruit et est donc des ordres de grandeurs plus rapide. **b** : Évolution de l'exposant de Lyapunov au cours du temps. À chaque fois que les marcheurs pénètrent dans une résonance plus chaotique, la courbe $\lambda_1(t)$ subit une inflexion. La première partie, qui évolue en $\frac{1}{t}$, est simplement due à la disparition de la condition initiale dans le calcul de $\lambda_1(t) = \frac{1}{t} \int_0^t v_i A_{ij} v_j dt$.

Pour quelques degrés de liberté de plus

Sur la figure 1.10.b, on représente l'évolution de l'exposant de Lyapunov maximal des marcheurs lors d'une simulation reportée sur la figure 1.10.a. On voit qu'à chaque fois que les marcheurs trouvent une zone de plus forte chaotité (une résonance d'ordre plus petit), une inflexion apparaît dans la courbe de l'exposant de Lyapunov en fonction du temps. Si des représentations explicites de l'espace des phases sont impossibles dès que $N > 2$, il est en revanche toujours possible de suivre l'évolution de $\lambda_1(t)$. Nous avons suivi cette approche pour le système décrit par (1.54) avec $N = 6$. On voit sur la figure 1.11 que la courbe $\lambda_1(t)$ est marquée par deux inflexions. Si l'on connaît les valeurs de p_1, \dots, p_6 , on peut regarder si

elles sont solutions d'une équation diophantienne :

$$n_1 p_1 + n_2 p_2 + n_3 p_3 + n_4 p_4 + n_5 p_5 + n_6 p_6 = n_7 \quad (1.57)$$

avec des n_i entiers. C'est effectivement le cas au niveau de chaque inflexion : la première correspond à la résonance d'ordre 6 $(0,0,2,1,1,0,1)$ tandis que la deuxième correspond à $(0,0,1,1,1,0,1)$, qui est d'ordre 5. Notons que la limitation à $N = 6$ n'est pas due à la difficulté d'appliquer la dynamique biaisée en plus haute dimension mais à la nécessité de résoudre des équations diophantiennes dans des temps raisonnables (la complexité de l'algorithme augmentant exponentiellement avec N).

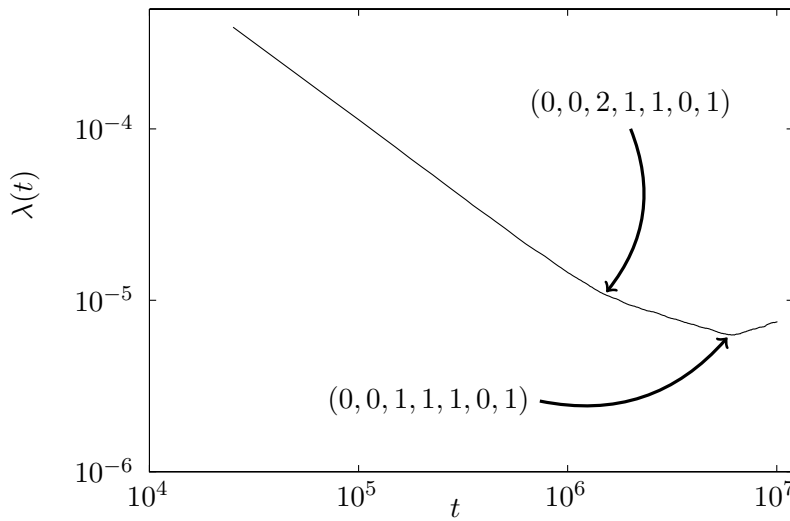


Fig. 1.11 : Localiser des résonances stochastiques en haute dimension. Évolution du plus grand exposant de Lyapunov au cours du temps, pour une population de marcheurs simulés avec la dynamique biaisée, à partir d'une position générique. Le système correspondant est décrit par le Hamiltonien (1.54), pour $\mu = 5 \cdot 10^{-6}$ et $N = 6$. Les deux points d'inflexions indiqués par des flèches correspondent aux temps d'arrivée dans des résonances, dont l'ordre est donné par $(n_1, n_2, n_3, n_4, n_5, n_6, n_7)$.

Les systèmes dynamiques composés de quelques planètes sont clairement à la portée de ce type de simulation³¹. La dynamique biaisée par les Lyapunov pourrait donc être utilisée en mécanique céleste pour sonder l'espace des phases au voisinage de trajectoires en accord avec les données actuelles, dans l'esprit de [117]. Ce serait en particulier plus pertinent que travailler sur des sections bidimensionnelles qui ne permettent pas un bon échantillonnage dès que $N > 2$. En particulier, rien n'assure aujourd'hui qu'il n'existe pas de trajectoires en accord avec les données expérimentales prédisant des chaoticités plus faibles que celles qui ont été mesurées. Utiliser la dynamique biaisée par les Lyapunov pour chercher de telles trajectoires pourrait être intéressant [89].

³¹Si le système solaire est composé de 8 principales planètes, soit 24 degrés de liberté, des méthodes de moyennage permettent de réduire le problème à 16 degrés de liberté [117].

1.4.3 Chaîne d'oscillateurs de Fermi-Pasta-Ulam

1.4.3.1 Présentation du modèle

Quittons à présent le domaine des systèmes dynamiques de basse dimension pour étudier un problème plus proche de la physique statistique : une chaîne d'oscillateurs non-linéaires introduite au début des années 50 par Fermi, Pasta et Ulam, définie par

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2} + \sum_{i=1}^N \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2} + \beta \frac{(x_{i+1} - x_i)^4}{4} \quad (1.58)$$

où $x_{N+1} = x_1$. Cet Hamiltonien correspond à N particules couplées par des ressorts anharmoniques. Le cas $\beta = 0$ correspond à la limite intégrable : les particules sont reliées par des ressorts harmoniques et les modes de Fourier correspondent à N oscillateurs harmoniques indépendants de fréquences :

$$\omega_k = 2 \sin \left(\frac{\pi k}{N} \right) \quad (1.59)$$

Ce modèle fut l'objet d'études numériques extensives au cours des 50 dernières années (pour une revue, voir [15]) en raison de la richesse de sa phénoménologie. Dès que β est non nulle, la dynamique est chaotique. Toutefois, en partant de conditions initiales particulières, ce modèle admet des solutions solitoniques très régulières, liées à l'équation de Korteweg-de Vries modifiée [109, 198]. De même, une instabilité de modulation mène à l'apparition de modes de respiration chaotiques [47, 183] de courte durée de vie, lorsque l'on injecte de l'énergie dans les modes de haute fréquence. Si l'on effectue une simulation de la chaîne à l'équilibre, on observe typiquement un mélange entre des structures localisées de courtes durées de vie (solitons, modes de respiration) et un bain de phonons (figure 1.12).

1.4.3.2 Application de la dynamique biaisée par les Lyapunov

Nous nous intéressons ici aux phénomènes rencontrés lorsque le nombre de degrés de liberté N est grand. Il faut donc faire attention à la manière dont la probabilité des grandes déviations varie avec N . En effet, la distribution observée de l'exposant de Lyapunov maximal se pique autour de sa valeur typique [72] lorsque N augmente³². Il est donc raisonnable de postuler une loi d'échelle pour $P(\lambda_1, t)$ du type

$$P(\lambda_1, t) = \exp[Nt\tilde{s}(\lambda_1)] \quad (1.60)$$

Si l'on calcule $Z(\alpha, t)$ telle que nous l'avons définie précédemment :

$$Z(\alpha, t) = \left\langle e^{\alpha \lambda_1 t} \right\rangle \quad (1.61)$$

³²Ce qui ne signifie pas que celle-ci converge. En effet, il semblerait que $\langle \lambda_1 \rangle$ diverge logarithmiquement avec la taille du système [167]. En toute rigueur, il faudrait donc tenir compte du fait que le maximum de $P(\lambda_1, t)$ se déplace avec N . Toutefois, nous n'irons pas à des tailles suffisamment grandes pour que cet effet logarithmique soit sensible.

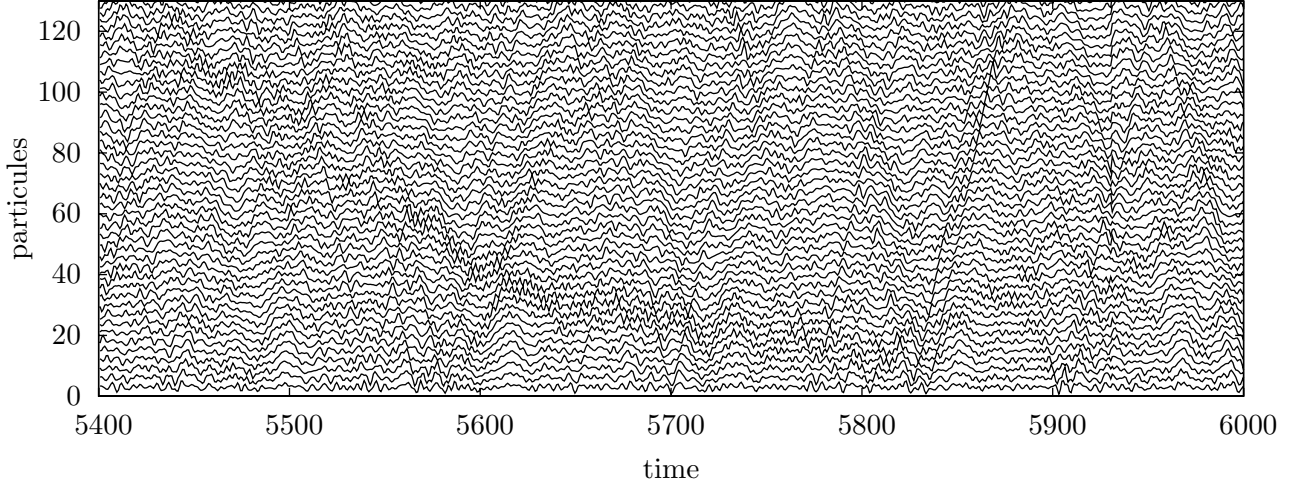


Fig. 1.12 : Simulation à l'équilibre de la chaîne FPU ($N = 128, \alpha = 0$). Exemple de simulation à l'équilibre de la chaîne de Fermi-Pasta-Ulam. On voit un ensemble incohérent de solitons de courte durée, superposé à un breather chaotique, caractérisé par une propagation non rectiligne (zone sombre particulièrement visible pour $t \in [5450, 5850]$), plus lente que celle du soliton.

elle sera dominée par les trajectoires dont l'exposant de Lyapunov maximal λ_1^{**} satisfait :

$$N\tilde{s}'(\lambda_1^{**}) = -\alpha \quad (1.62)$$

Le biais est donc de moins en moins fort lorsque N augmente. Dans la limite thermodynamique

$$\tilde{s}'(\lambda_1^{**}) = -\frac{\alpha}{N} \underset{N \rightarrow \infty}{\simeq} 0 \quad (1.63)$$

et λ_1^{**} correspond donc à l'exposant typique : le biais est alors nul. Nous devons donc redéfinir Z pour imposer des températures inverses $\tilde{\alpha}$ d'ordre N :

$$\tilde{Z}(\alpha, t) = \langle \exp[\tilde{\alpha} N t \lambda_1] \rangle \sim \exp[N t \tilde{\mu}(\tilde{\alpha})] \quad (1.64)$$

On a bien dans ce cas :

$$\tilde{s}'(\lambda_1^{**}) = -\tilde{\alpha} \quad (1.65)$$

et le biais est indépendant de N . Lorsque l'on applique la dynamique biaisée à un système de N degrés de liberté, il faut donc le faire avec des températures inverses $\tilde{\alpha}$ d'ordre 1 et donc α d'ordre N .

Dans le cadre de la chaîne FPU, on favorise soit les configurations solitoniques en utilisant des températures négatives, soit les modes de respirations chaotiques lorsque l'on favorise les trajectoires chaotiques ($\alpha \ll 1$). Pour observer cela, nous avons effectué des simulations de la

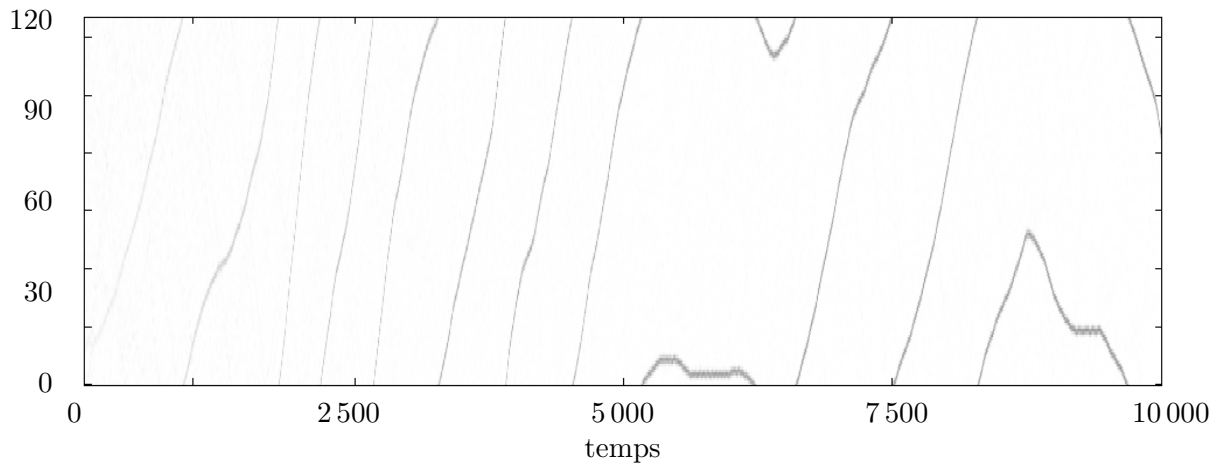


Fig. 1.13 : Révéler un mode de respiration chaotique ($N = 128$, $\alpha = 5N$) Simulation à énergie et impulsion fixées (densité d'énergie $E = 1$) avec conditions aux bords périodiques. Le niveau de gris représente l'énergie de chaque particule. Démarrant d'une configuration d'équilibre, la dynamique révèle un mode de respiration chaotique dont l'exposant de Lyapunov est trois fois l'exposant typique.

chaîne FPU pour $N = 128$, avec $\alpha = 5N$ et $-5N$. Le bruit utilisé était conservatif, aussi bien en p qu'en \mathcal{H} (cf annexe A). Les résultats, pour une densité d'énergie d'ordre 1 et $\beta = 0, 1$, correspondant à la transition entre les régimes faiblement et fortement chaotiques [47], sont présentés sur les figures 1.13 et 1.14. En biaisant de manière à obtenir des exposants de Lyapunov trois fois supérieurs à la valeur typique λ_1^* , nous observons un mode de respiration chaotique. Réciproquement, contraignant le système à avoir un exposant $\lambda_1^*/2$, nous observons une configuration avec quelques solitons de très grande stabilité temporelle.

Finalement, notons que l'algorithme est toujours aussi efficace pour une taille de système huit fois plus grande. Ainsi, sur la figure 1.15, nous montrons le résultat d'une simulation réalisée pour une chaîne de 1024 particules avec $\alpha = 5N$. À titre d'information, les simulations pour $N = 128$ nécessitent une quarantaine de minutes sur un ordinateur de bureau tandis que celles pour $N = 1024$ durent dix fois plus longtemps. Dans tous les cas, les configurations finales des trajectoires obtenues ont été utilisées comme conditions initiales pour un intégrateur symplectique d'ordre 8 [197]. Ces simulations ont permis de vérifier qu'elles correspondent bien à des trajectoires du système non bruité.

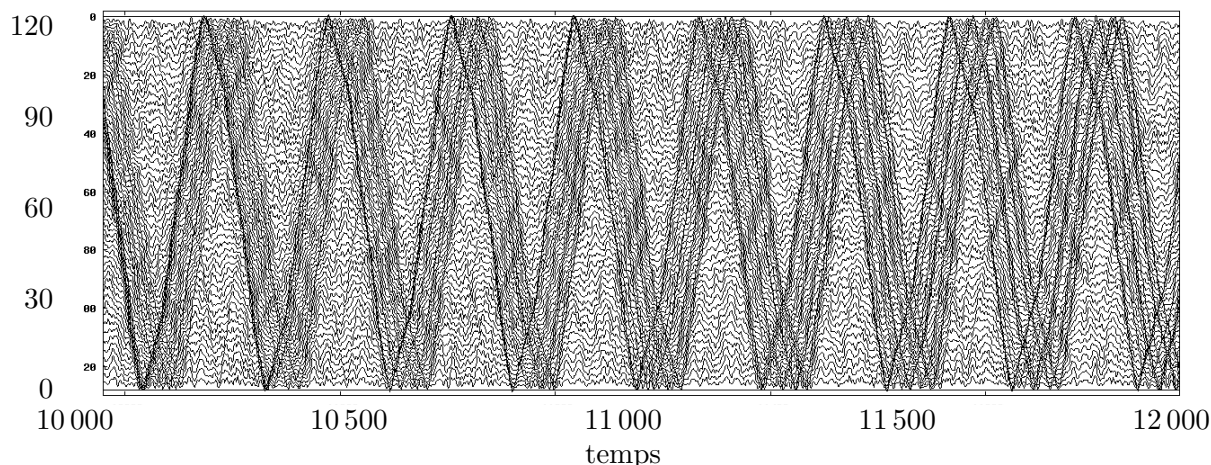


Fig. 1.14 : Localiser des solitons ($N = 128$, $\alpha = 5N$). Simulation à énergie fixée ($E = 1$) avec conditions aux bords fixes, obtenue en démarrant d'une configuration à l'équilibre microcanonique. La figure montre la position de chaque particule en fonction du temps. Plusieurs solitons rebondissent d'un bout à l'autre de la chaîne. L'exposant de Lyapunov est égal à la moitié de sa valeur typique. (Pour améliorer la visibilité, la position de chaque particule a été déplacée d'une quantité arbitraire.)

1.5 Énergie libre dynamique et transition de phase

1.5.1 Présentation

Au delà de la détection de trajectoires rares, l'algorithme que nous avons présenté à la section 1.3 peut également servir au calcul effectif de la fonction de partition dynamique et de l'énergie libre associée. Nous pouvons ainsi étudier l'analyticité de cette dernière et détecter d'éventuelles transitions de phase. Ceci peut être fait de deux manières. On peut utiliser directement la formule donnée à la section 1.3 :

$$\mu(\alpha, t) = \frac{1}{t} \sum_{n=1}^T \log R(n) \quad (1.66)$$

où $R(n)$ correspond au taux spontané d'augmentation de la population de clones au pas n . Si cette formule est exacte dans la limite où le nombre de clones est infini, elle fluctue pour des populations finies, ce qui peut rendre l'estimation de μ difficile. Une alternative est d'utiliser l'intégration thermodynamique, introduite par Kirkwood [101] et couramment utilisée pour les calculs d'énergie libre en dynamique moléculaire. Elle repose sur le calcul de la dérivée de μ en fonction de α :

$$\mu'(\alpha) = \frac{d}{d\alpha} \frac{1}{t} \log \langle \exp[\alpha t \lambda_1] \rangle = \frac{\langle \lambda_1 \exp[\alpha t \lambda_1] \rangle}{\langle \exp[\alpha t \lambda_1] \rangle} = \langle \lambda_1 \rangle_\alpha \quad (1.67)$$

qui n'est rien d'autre que la moyenne³³ de λ_1 parmi la population des marcheurs à la température α^{-1} . On peut ainsi effectuer le calcul de $\mu'(\alpha')$ pour α' entre 0 et α puis reconstruire $\mu(\alpha)$

³³Cette moyenne s'entend par rapport à la mesure (1.27).

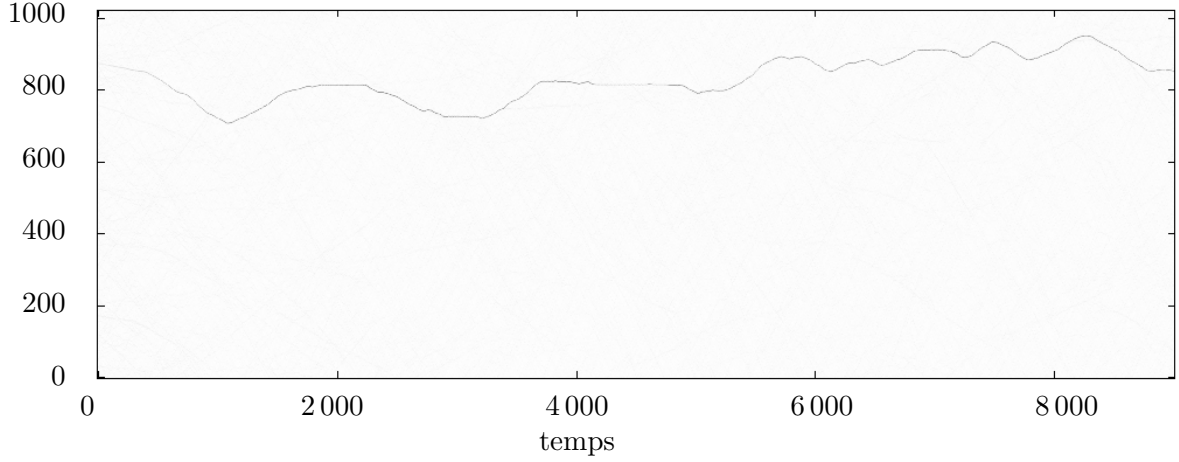


Fig. 1.15 : Révéler un mode de respiration chaotique ($N = 1024$, $\alpha = 5N$). *Simulation à énergie et impulsion fixées (densité d'énergie $E = 1$) avec conditions aux bords périodiques. Le niveau de gris représente l'énergie de chaque particule. Démarrant d'une configuration d'équilibre, la dynamique révèle à nouveau un mode de respiration chaotique.*

en intégrant. Cette stratégie a l'avantage de lisser le bruit présent lors de l'évaluation directe de $\mu(\alpha)$. Toutefois, lorsque $\langle \lambda_1 \rangle_\alpha$ présente une discontinuité, un échantillonnage grossier en α' se traduira par une erreur systématique sur $\mu(\alpha)$.

Si l'on construit $\mu(\alpha)$ dans le cadre de l'application standard, par exemple pour $\delta = k = 1$, on obtient le résultat présenté sur la figure 1.16. L'énergie libre dynamique μ n'est pas analytique en $\alpha = 0$: sa dérivée $\langle \lambda_1 \rangle_\alpha$ est en effet discontinue. C'est l'analogie d'une transition de phase du premier ordre en physique statistique. Pour comprendre simplement sa signification, il faut revenir à la définition de μ :

$$e^{t\mu(\alpha)} = Z(\alpha, t) = \int d\lambda_1 e^{t[s(\lambda_1) + \alpha\lambda_1]} \quad (1.68)$$

qui se traduit par
$$\mu(\alpha) = \sup_{\lambda_1} [\alpha\lambda_1 + s(\lambda_1)] = s(\lambda_1^{**}) + \alpha\lambda_1^{**} \quad (1.69)$$

On reconnaît dans cette formule la transformée de Legendre usuelle qui donne l'énergie libre en fonction de l'entropie :

$$-\beta F = \sup_E [-\beta E + S(E)] \quad (1.70)$$

En se rappelant de la construction de Boltzmann des transformées de Legendre [161, 182, 189], on voit qu'une discontinuité de la dérivée de $\mu(\alpha)$ correspond à une entropie $s(\lambda_1)$ non concave, présentée schématiquement sur la figure 1.17. La mesure est dominée par deux phases de

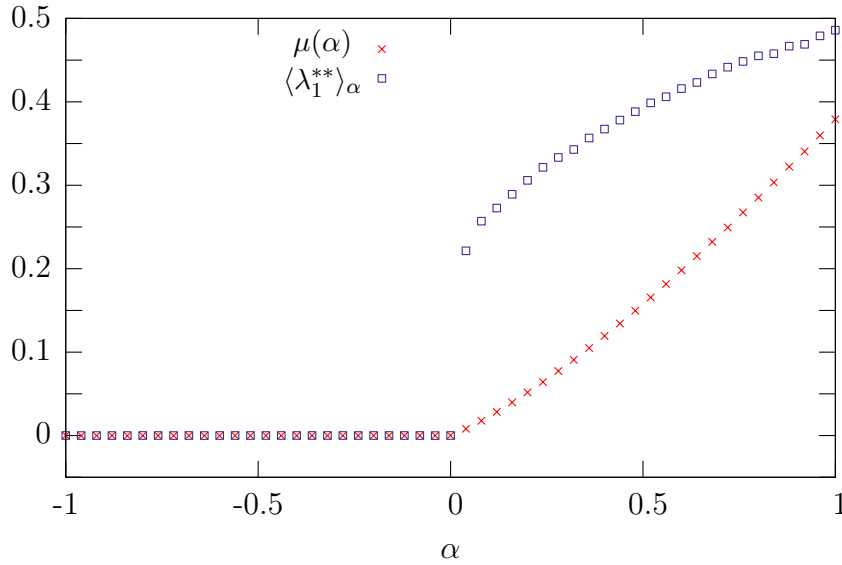


Fig. 1.16 : Représentation de l'énergie libre dynamique $\mu(\alpha)$ (croix rouges) et de l'exposant de Lyapunov typique (carrés bleus) à température α^{-1} en fonction de α . La discontinuité en $\alpha = 0$ est synonyme de transition de phase du premier ordre.

mesure finie : une correspondant à $\lambda_1 = 0$ (les îlots réguliers) et une à $\tilde{\lambda}_1 > 0$ correspondant à la chaoticité typique de la zone stochastique. Celles-ci sont représentées sur la figure 1.18. Ces résultats sont en accord avec ce que laissait présager des études précédentes de l'application standard [169], dans lesquelles $s(\lambda_1, t)$ fut construite pour des temps courts. Notons que la connaissance de $\mu(\alpha)$ ne suffit pas dans ce cas à reconstruire $s(\lambda)$. En effet, si l'on effectue la transformée de Legendre inverse :

$$\hat{s}(\lambda_1) = \sup_{\alpha} [\mu(\alpha) - \alpha \lambda_1] \quad (1.71)$$

on récupère seulement l'enveloppe convexe de l'entropie. C'est le phénomène usuel d'inéquivalence d'ensemble lors des transitions de phase du premier ordre.

L'utilisation de fonctions de grandes déviations pour caractériser le type de « mélange » que l'on observe dans l'espace des trajectoires est une approche intéressante, utilisée par exemple avec succès pour l'étude des systèmes cinétiquement contraints [76]. Il manque toutefois un ingrédient fondamental des transitions de phase usuelles : α n'est pas un paramètre physique. Ainsi, tout ce qui se passe hors du point $\alpha = 0$ n'est pas pertinent en pratique puisque cela ne concerne que des zones de mesures exponentielles faibles *et que l'on ne possède pas génériquement de moyens physiques de favoriser ces régions*. Autrement dit, on est en général incapable d'amener expérimentalement le système à visiter ces régions en changeant ses contraintes extérieures.

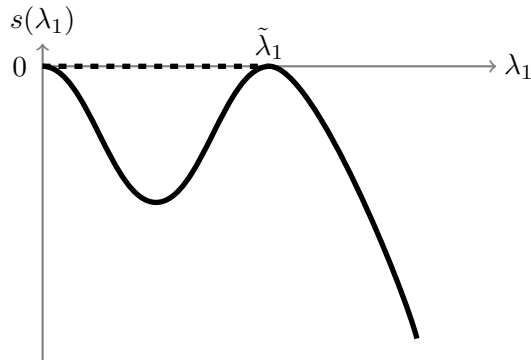


Fig. 1.17 : Représentation schématique de l'entropie $s(\lambda_1)$ correspondant à la discontinuité de la dérivée de μ présentée sur la figure 1.16. Deux phases dominent la mesure : l'une correspond aux îles intégrables et l'autre à la couche chaotique. En pointillé figure l'enveloppe convexe \hat{s} de l'entropie, que l'on obtiendrait en calculant la transformée de Legendre inverse de μ .

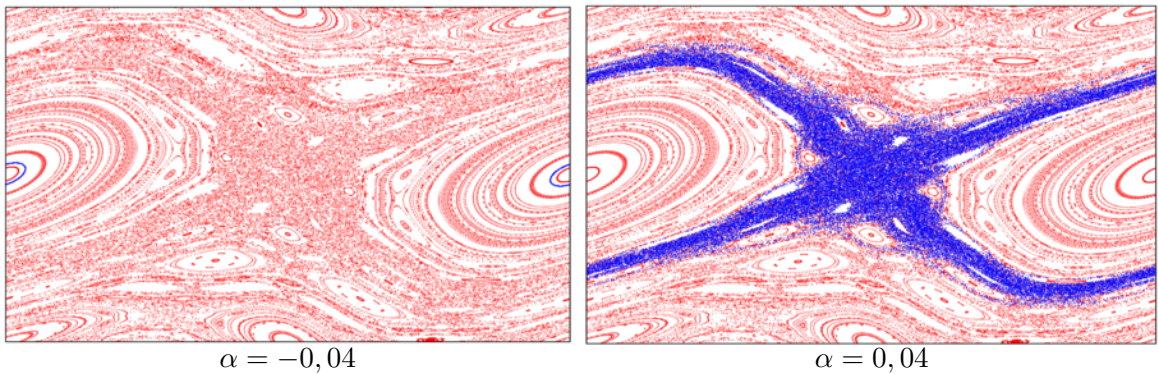


Fig. 1.18 : Configurations typiques pour $\alpha = \pm 0,04$. Les résultats de la dynamique biaisée sont présentés en bleu, l'espace des phases de l'application standard.

L'une des grandes questions de la physique statistique hors d'équilibre est justement d'essayer d'identifier le type d'observable *physique*, expérimentalement contrôlable, qui permette de construire ce type d'approche.

1.5.2 Limite thermodynamique

Comme nous l'avons expliqué à la section 1.4.3.2, lorsque le système est extensif, il faut, pour le biaiser, appliquer des températures extensives. La définition de l'énergie libre dynamique doit par conséquent être légèrement modifiée :

$$\tilde{\mu}(\tilde{\alpha}, N, t) = \frac{1}{Nt} \log \langle \exp[Nt\tilde{\alpha}\lambda_1] \rangle \quad (1.72)$$

La question des transitions de phase se pose alors aux longs temps, dans la limite thermodynamique. Il faut toutefois faire attention à l'ordre dans lequel on prend ces limites puisque rien n'assure que celles-ci commutent. L'ordre « correct » dépend dans ce cas de la situation expérimentale décrite. Considérons un système dont l'échelle de temps maximale³⁴ correspond à un temps τ_1 . Si on l'étudie sur des temps supérieurs à τ_1 , alors il est naturel de prendre la limite $t \rightarrow \infty$ *avant* la limite thermodynamique. Dans le cas inverse, probablement plus pertinent d'un point de vue expérimental³⁵, la limite de N grand doit être prise en premier.

1.6 Spectre d'exposants de Lyapunov

Comme nous l'avons dit précédemment, le plus grand exposant de Lyapunov est une quantité importante : sa non nullité suffit à impliquer la chaotité d'un système, il en fixe la limite de prédictibilité, etc. Toutefois, la connaissance du spectre complet d'exposants de Lyapunov permet une connaissance plus intime du système. Tout d'abord, comme nous l'avons mentionné précédemment, la question de la convergence dans la limite thermodynamique du plus grand exposant de Lyapunov n'est pas évidente et pour certains systèmes une divergence logarithmique semble avoir été observée [167]. Au contraire, la somme des exposants de Lyapunov positifs semble admettre une bonne limite. De plus, le théorème de Pesin [154] stipule que celle-ci est égale à l'entropie métrique ou entropie de Kolmogorov-Sinai [104, 106, 171] (KS)³⁶. Cette notion joue un rôle fondamental dans la théorie des systèmes dynamiques en ce sens qu'elle quantifie la « perte » d'information au cours du temps. Si l'on souhaite donner avec une précision fixée la position initiale d'un système dynamique à partir de la connaissance de sa position au temps t , l'entropie KS correspond schématiquement au nombre de décimales supplémentaires qu'il faut fournir lorsque t augmente d'une unité.

Géométriquement, nous avons vu que le plus grand exposant de Lyapunov correspond à l'étirement typique d'un vecteur tangent. Il est donc naturel de penser que pour étudier plusieurs Lyapunov, nous allons devoir regarder l'évolution de *volumes* de différentes dimensions dans l'espace des phases. Nous montrerons effectivement ci-dessous que la somme des k plus grands exposants de Lyapunov correspond au taux d'expansion d'un k -volume. Nous présenterons alors la méthode classiquement utilisée pour déterminer le spectre d'exposants et montrerons comment adapter la stratégie présentée pour λ_1 au calcul des grandes déviations des autres exposants.

1.6.1 Exposants de Lyapunov et k -volume

Montrons tout d'abord que la somme des k plus grands exposants de Lyapunov est bien donnée par le taux exponentiel d'expansion d'un k -volume. Si l'on considère k vecteurs tan-

³⁴celle-ci correspondant, par exemple, au temps nécessaire pour échantillonner tout l'espace des phases.

³⁵Par exemple, quand on observe un matériau ferromagnétique, on assiste rarement au retournement de son aimantation.

³⁶pour une introduction pédagogique, se reporter à [10].

gents $\mathbf{u}_1(0), \dots, \mathbf{u}_k(0)$, on peut construire un k -vecteur $\mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k(0)$. Celui-ci représente un k volume orienté et son évolution est donnée par

$$\mathbf{V}(t) = U(t)\mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge U(t)\mathbf{u}_k(0) \quad (1.73)$$

Notons que le produit naturel de l'algèbre extérieure dans laquelle vivent les k -vecteurs est donné par

$$\langle \mathbf{u}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k | \mathbf{v}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{v}_k \rangle = \det M \quad (1.74)$$

où M est la matrice définie par³⁷

$$M_{ij} = \mathbf{u}_i \cdot \mathbf{v}_j \quad (1.75)$$

Cette formule peut sembler étonnante, mais elle dit simplement que si les \mathbf{u}_i et \mathbf{v}_i font partie de la même base orthonormée, le produit scalaire $\langle | \rangle$ est non nul si et seulement si les \mathbf{u}_i sont une permutation des \mathbf{v}_i et qu'il est dans ce cas égal à la signature de cette permutation. La généralisation à des familles arbitraires se fait grâce à la multilinéarité du produit extérieur et la distributivité du produit scalaire. Le carré de la norme du volume (1.73) est alors donné par

$$|\mathbf{V}(t)|^2 = \langle U(t)\mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge U(t)\mathbf{u}_k(0) | U(t)\mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge U(t)\mathbf{u}_k(0) \rangle \quad (1.76)$$

Par définition de l'adjoint U^\dagger , (1.76) se met sous la forme :

$$|\mathbf{V}(t)|^2 = \langle \mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k(0), U^\dagger(t)U(t)\mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge U^\dagger(t)U(t)\mathbf{u}_k(0) \rangle \quad (1.77)$$

Supposons tout d'abord que les $\mathbf{u}_i(0)$ soient des vecteurs propres orthonormaux de $U^\dagger(t)U(t)$, de valeur propre correspondante $\mu_i = \exp[2t\lambda_i(t)]$. Le carré de la norme de \mathbf{V} est alors :

$$|\mathbf{V}(t)|^2 = \mu_1 \dots \mu_k \langle \mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k(0), \mathbf{u}_1(0) \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k(0) \rangle = \mu_1 \dots \mu_k = e^{2t[\lambda_1(t) + \dots + \lambda_k(t)]} \quad (1.78)$$

Ainsi, aux temps longs,
$$\frac{1}{t} \log |\mathbf{V}(t)| = \lambda_1(t) + \dots + \lambda_k(t) \quad (1.79)$$

Si l'on considère désormais des vecteurs $\mathbf{u}_i(0)$ quelconques, on peut les décomposer sur les vecteurs propres de $U^\dagger U(t)$ que nous appelons désormais \mathbf{e}_i . Notons M la matrice $n \times k$

$$M = \begin{pmatrix} u_1^1 & u_2^1 & \dots & u_k^1 \\ u_1^2 & u_2^2 & \dots & u_k^2 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ u_1^n & u_2^n & \dots & u_k^n \end{pmatrix} \quad (1.80)$$

de décomposition des $\mathbf{u}_i(0)$ sur les \mathbf{e}_i :

$$\mathbf{u}_i(0) = \sum_{j=1}^n u_i^j \mathbf{e}_j \quad (1.81)$$

³⁷ $\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{v}_j$ représente le produit scalaire euclidien de \mathbb{R}^n si les vecteurs sont de dimensions n .

Le k -vecteur peut alors être décomposé sous la forme :

$$\mathbf{u}_1(0) \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k(0) = \left(\sum_{i_1=1}^n u_1^{i_1} \mathbf{e}_{i_1} \right) \wedge \cdots \wedge \left(\sum_{i_k=1}^n u_1^{i_k} \mathbf{e}_{i_k} \right) \quad (1.82)$$

Puisqu'un produit extérieur contenant deux fois le même vecteur est nul, (1.82) se réduit à

$$\mathbf{u}_1(0) \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k(0) = \sum_{i_1 \dots i_k} u_1^{i_1} \dots u_k^{i_k} \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k} \quad (1.83)$$

où l'on somme sur tous les k -uplets (i_1, \dots, i_k) ne contenant pas deux fois le même indice. Notons que si l'on ordonne les vecteurs unitaires, le produit s'écrit alors

$$\mathbf{u}_1(0) \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k(0) = \sum_{i_1 < \dots < i_k} \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) u_1^{\sigma(i_1)} \dots u_k^{\sigma(i_k)} \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k} \quad (1.84)$$

où σ est une permutation de (i_1, \dots, i_k) et $\varepsilon(\sigma)$ sa signature (le nombre de transpositions qui la composent). Notons que $M_{i_1 \dots i_k} = \sum_{\sigma} \varepsilon(\sigma) u_1^{\sigma(i_1)} \dots u_k^{\sigma(i_k)}$ est le mineur d'ordre k de la matrice (1.80) obtenue en ne retenant que les lignes correspondant à $\mathbf{e}_{i_1} \dots \mathbf{e}_{i_k}$.

Comme mentionné précédemment, deux k -volumes $\mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k}$ ne partageant pas les mêmes vecteurs sont orthogonaux. $V_k(0)$ est par conséquent une combinaison linéaire de k -vecteurs orthogonaux, construits sur des vecteurs propres unitaires de $U^\dagger U$:

$$V_k(0) = \sum_{i_1 < \dots < i_k} M_{i_1 \dots i_k} V_{i_1 \dots i_k} \quad (1.85)$$

où $V_{i_1 \dots i_k} = \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k}$. L'application de $U^\dagger U$ se traduit donc ici par

$$\begin{aligned} U^\dagger U \mathbf{u}_1(0) \wedge \cdots \wedge U^\dagger U \mathbf{u}_k(0) &= \sum_{i_1 < \dots < i_k} M_{i_1 \dots i_k} U^\dagger U \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge U^\dagger U \mathbf{e}_{i_k} \\ &= \sum_{i_1 < \dots < i_k} M_{i_1 \dots i_k} \mu_{i_1} \dots \mu_{i_k} \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k} \end{aligned} \quad (1.86)$$

et donc

$$\begin{aligned} |V_k(t)|^2 &= \left\langle \sum_{j_1 < \dots < j_k} M_{j_1 \dots j_k} \mathbf{e}_{j_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{j_k} \middle| \sum_{i_1 < \dots < i_k} M_{i_1 \dots i_k} \mu_{i_1} \dots \mu_{i_k} \mathbf{e}_{i_1} \wedge \cdots \wedge \mathbf{e}_{i_k} \right\rangle \\ &= \sum_{i_1 < \dots < i_k} M_{i_1 \dots i_k}^2 \mu_{i_1} \dots \mu_{i_k} \end{aligned} \quad (1.87)$$

$$\text{Finalement :} \quad |V_k(t)|^2 = \sum_{i_1 < \dots < i_k} M_{i_1 \dots i_k}^2 e^{2t[\lambda_{i_1}(t) + \dots + \lambda_{i_k}(t)]} \quad (1.88)$$

Aux temps longs, cette somme est dominée exponentiellement par $e^{2t[\lambda_1(t) + \dots + \lambda_k(t)]}$ où les $\lambda_i(t)$ ont été rangés dans l'ordre décroissant. Ainsi

$$\frac{1}{t} \log |V_k(t)| \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \lambda_1 + \dots + \lambda_k \quad (1.89)$$

1.6.2 Procédé de Gram-Schmidt

Si la construction présentée dans la section précédente est théoriquement satisfaisante, son implémentation numérique est difficile et la définition d'une fonction de grandes déviations pour le k^e exposant de Lyapunov n'apparaît pas clairement. La difficulté numérique vient du fait que pour le calcul de l'accroissement du k -volume, on est naturellement amené à renormaliser les vecteurs que l'on utilise pour éviter d'avoir à manipuler des nombres exponentiellement grands. Or, les k vecteurs que l'on évolue ont tous des composantes - aussi petites soient-elles - qui vont s'étirer dans la direction de plus grande extension. Lors de la renormalisation, ces composantes vont donc l'emporter sur les autres et l'arrondi numérique rend impossible l'évaluation du volume (figure 1.19).

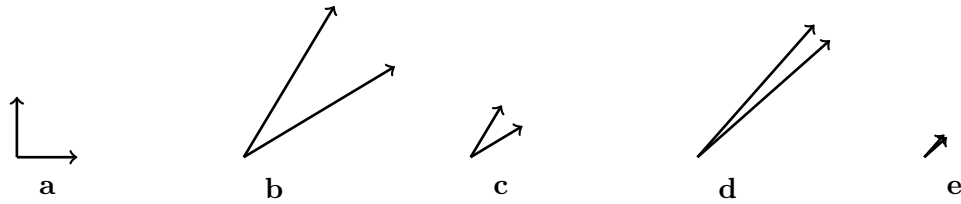


Fig. 1.19 : Évolution typique de deux vecteurs tangents. Deux vecteurs tangents initialement orthogonaux (a) évoluent typiquement en s'étirant beaucoup plus rapidement dans la direction de λ_1 (b). Lors de leur renormalisation (c), ils tendent à dégénérer. Le phénomène d'alignement s'amplifie lorsqu'ils évoluent à nouveau (d), jusqu'à ce que l'arrondi numérique entraîne leur dégénérescence exacte (e).

Une alternative fut proposée par Benetin et al. [12, 13] et Shimada et Naghishima [170] via l'utilisation d'une procédure d'orthonormalisation de Gram-Schmidt (voir également [195]) : on évolue une base orthonormée de dimension k , que l'on orthonormalise régulièrement. Les exposants sont alors calculés à partir des facteurs de renormalisation des vecteurs de la base.

1.6.2.1 Deuxième exposant de Lyapunov

Pour comprendre ce procédé sur un exemple simple, considérons le cas de deux vecteurs \mathbf{u}_1 et $\boldsymbol{\omega}_2$ non parallèles qui évoluent suivant

$$\dot{\mathbf{u}}_1 = -A\mathbf{u}_1, \quad \dot{\boldsymbol{\omega}}_2 = -A\boldsymbol{\omega}_2 \quad (1.90)$$

Le volume qu'ils engendrent est défini par

$$V_2 = \mathbf{u}_1 \wedge \boldsymbol{\omega}_2 \quad (1.91)$$

$\boldsymbol{\omega}_2$ peut se décomposer en une partie parallèle à \mathbf{u}_1 et une orthogonale :

$$\boldsymbol{\omega}_2 = \mathbf{u}_1 \frac{\mathbf{u}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_2}{\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1} + \underbrace{\boldsymbol{\omega}_2 - \mathbf{u}_1 \frac{\mathbf{u}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_2}{\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1}}_{\mathbf{u}_2} \quad \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{u}_1 = 0 \quad (1.92)$$

$$V_2 \text{ est alors égal à } \quad V_2 = \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 \quad (1.93)$$

car $\mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_1 = 0$. Plutôt qu'évoluer $\boldsymbol{\omega}_2$, on peut écrire l'évolution du vecteur \mathbf{u}_2 en dérivant (1.92) et utilisant (1.90) :

$$\dot{\mathbf{u}}_2 = -A\mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_1 \frac{\mathbf{u}_1 \cdot A\mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_2 \cdot A\mathbf{u}_1}{\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1} \quad (1.94)$$

Cette évolution est plus complexe que celle de $\boldsymbol{\omega}_2$ mais est très simple à implémenter numériquement : on démarre avec un couple de vecteurs $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2)$ orthogonaux, on les fait évoluer *tous les deux* avec la dynamique (1.90), puis on retire à \mathbf{u}_2 sa composante suivant \mathbf{u}_1 . Puisque les volumes engendrés par \mathbf{u}_1 et $\boldsymbol{\omega}_2$ d'une part et par \mathbf{u}_1 et \mathbf{u}_2 d'autre part sont égaux, ce dernier nous permet toujours de calculer le deuxième exposant de Lyapunov. De plus le lien entre λ_1, λ_2 et $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2$ est alors très simple. En effet, l'évolution de la norme de V_2 est donnée par

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}|V_2|^2 &= \frac{d}{dt}\langle \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 \rangle \\ &= 2\langle \dot{\mathbf{u}}_1 \wedge \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 \rangle + 2\langle \mathbf{u}_1 \wedge \dot{\mathbf{u}}_2 | \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 \rangle \\ &= -2\langle A\mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 | \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 \rangle + 2\left\langle \mathbf{u}_1 \wedge -A\mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_1 \frac{\mathbf{u}_1 \cdot A\mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_2 \cdot A\mathbf{u}_1}{\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1} \middle| \mathbf{u}_1 \wedge \mathbf{u}_2 \right\rangle \end{aligned} \quad (1.95)$$

En utilisant la définition du produit scalaire (1.74), le fait que $\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_2 = 0$ et $\mathbf{u}_i \wedge \mathbf{u}_i = 0$, l'équation précédente se réduit à

$$\frac{d}{dt}|V_2|^2 = -2 \det \begin{pmatrix} \mathbf{u}_1 \cdot A\mathbf{u}_1 & \mathbf{u}_2 \cdot A\mathbf{u}_1 \\ 0 & |\mathbf{u}_2|^2 \end{pmatrix} - 2 \det \begin{pmatrix} |\mathbf{u}_1|^2 & 0 \\ \mathbf{u}_1 \cdot A\mathbf{u}_2 & \mathbf{u}_2 \cdot A\mathbf{u}_2 \end{pmatrix} \quad (1.96)$$

En introduisant les vecteur unitaires $\mathbf{v}_1 = \frac{\mathbf{u}_1}{|\mathbf{u}_1|}$ et $\mathbf{v}_2 = \frac{\mathbf{u}_2}{|\mathbf{u}_2|}$, ceci se réécrit :

$$\frac{d}{dt}|V_2|^2 = -2|\mathbf{u}_1|^2|\mathbf{u}_2|^2(\mathbf{v}_1 \cdot A\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \cdot A\mathbf{v}_2) \quad (1.97)$$

Par ailleurs, puisque \mathbf{u}_1 et \mathbf{u}_2 sont orthogonaux, $|V_2| = |\mathbf{u}_1||\mathbf{u}_2|$. Ainsi, l'équation précédente s'écrit :

$$\frac{d}{dt}|V_2|^2 = -2(\mathbf{v}_1 \cdot A\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \cdot A\mathbf{v}_2)|V_2|^2 \quad (1.98)$$

et s'intègre en
$$|V_2|(t) = e^{-\int_0^t dt \{\mathbf{v}_1 \cdot A\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \cdot A\mathbf{v}_2\}} |V_2|(0) \quad (1.99)$$

Finalement :

$$\lambda_1(t) + \lambda_2(t) = -\frac{1}{t} \int_0^t dt \{\mathbf{v}_1 \cdot A\mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_2 \cdot A\mathbf{v}_2\} \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \lambda_1 + \lambda_2 \quad (1.100)$$

Par ailleurs, on sait depuis l'équation (1.9) que

$$\lambda_1(t) = -\frac{1}{t} \int_0^t dt \{ \mathbf{v}_1 \cdot A \mathbf{v}_1 \} \quad (1.101)$$

et l'on a donc une définition pour $\lambda_2(t)$ indépendante des autres λ_i :

$$\lambda_2(t) = -\frac{1}{t} \int_0^t dt \{ \mathbf{v}_2 \cdot A \mathbf{v}_2 \} \quad (1.102)$$

Tout comme l'évolution de \mathbf{v}_1 s'obtient à partir de celle de \mathbf{u}_1 en imposant une norme constante

$$\dot{\mathbf{v}}_1 = -A \mathbf{v}_1 + \mathbf{v}_1 (\mathbf{v}_1 \cdot A \mathbf{v}_1) \quad (1.103)$$

celle de \mathbf{v}_2 s'obtient à partie de celle de \mathbf{u}_2 :

$$\dot{\mathbf{v}}_2 = -A \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_1 (\mathbf{v}_1 \cdot A \mathbf{v}_2 + \mathbf{v}_2 \cdot A \mathbf{v}_1) + \mathbf{v}_2 (\mathbf{v}_2 \cdot A \mathbf{v}_2) \quad (1.104)$$

1.6.2.2 k^e exposant de Lyapunov

La généralisation au k^e exposant de Lyapunov est naturelle. On démarre avec k vecteurs $\boldsymbol{\omega}_i$ évoluant sous la dynamique tangente

$$\dot{\boldsymbol{\omega}}_i = -A \boldsymbol{\omega}_i \quad (1.105)$$

Ils définissent un volume $V_k = \boldsymbol{\omega}_1 \wedge \cdots \wedge \boldsymbol{\omega}_k$, qui est par ailleurs égal à celui engendré par les k vecteurs orthogonaux \mathbf{u}_i définis par

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1 &= \boldsymbol{\omega}_1 \\ \mathbf{u}_2 &= \boldsymbol{\omega}_2 - \mathbf{u}_1 \frac{\mathbf{u}_1 \cdot \boldsymbol{\omega}_2}{\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_1} \\ &\vdots \\ \mathbf{u}_k &= \boldsymbol{\omega}_k - \sum_{j=1}^{k-1} \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_j \cdot \boldsymbol{\omega}_k}{\mathbf{u}_j \cdot \mathbf{u}_j} \end{aligned} \quad (1.106)$$

L'évolution des \mathbf{u}_i s'obtient à partir de celles des $\boldsymbol{\omega}_i$:

$$\dot{\mathbf{u}}_i = -A \mathbf{u}_i + \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{u}_j \frac{\mathbf{u}_i \cdot A \mathbf{u}_j + \mathbf{u}_j \cdot A \mathbf{u}_i}{|\mathbf{u}_j|^2} \quad (1.107)$$

Il est immédiat de vérifier que si les \mathbf{u}_i sont orthogonaux au temps t , ils le restent, en constatant que $\frac{d}{dt}(\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{u}_j) = 0$. Puisque si un $\boldsymbol{\omega}_j$ est présent deux fois dans un produit extérieur, celui-ci est nul, on trouve :

$$\mathbf{u}_1 \wedge \cdots \wedge \mathbf{u}_k = \boldsymbol{\omega}_1 \wedge \cdots \wedge \boldsymbol{\omega}_k = V_k \quad (1.108)$$

De plus, les \mathbf{u}_i étant tous orthogonaux

$$|V_k| = \prod_{i=1}^k |\mathbf{u}_i| \quad (1.109)$$

Montrons à présent comment écrire $|V_k|$ sous la forme de l'exponentielle d'une intégrale :

$$\frac{d}{dt}|V_k|^2 = 2 \sum_j \langle \mathbf{u}_1 \wedge \dots \wedge \dot{\mathbf{u}}_j \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k | \mathbf{u}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k \rangle \quad (1.110)$$

La seule contribution non nulle de $\dot{\mathbf{u}}_j$ au produit extérieur est celle qui n'est pas explicitement parallèle aux autres \mathbf{u}_i :

$$\frac{d}{dt}|V_k|^2 = 2 \sum_j \langle \mathbf{u}_1 \wedge \dots \wedge -A\mathbf{u}_j \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k | \mathbf{u}_1 \wedge \dots \wedge \mathbf{u}_k \rangle \quad (1.111)$$

On doit donc calculer une somme de déterminants du type³⁸

$$\begin{vmatrix} |\mathbf{u}_1|^2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & |\mathbf{u}_2|^2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ \mathbf{u}_1 \cdot A\mathbf{u}_j & \mathbf{u}_2 \cdot A\mathbf{u}_j & \dots & \mathbf{u}_j \cdot A\mathbf{u}_j & \dots & \mathbf{u}_k \cdot A\mathbf{u}_k \\ \vdots & \vdots & \dots & & 0 \\ 0 & \dots & & \dots & |\mathbf{u}_k|^2 \end{vmatrix} = |\mathbf{u}_1|^2 \dots |\mathbf{u}_{j-1}|^2 \mathbf{u}_j \cdot A\mathbf{u}_j |\mathbf{u}_{j+1}|^2 \dots |\mathbf{u}_k|^2 \quad (1.112)$$

Ainsi
$$\frac{d}{dt}|V_k|^2 = -2 \prod_{i=1}^k |\mathbf{u}_i|^2 \sum_{i=1}^k \mathbf{v}_i \cdot A\mathbf{v}_i \quad (1.113)$$

où \mathbf{v}_i est le vecteur unitaire $\frac{\mathbf{u}_i}{|\mathbf{u}_i|}$ dont l'évolution est donnée par

$$\dot{\mathbf{v}}_i = -A\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_i(\mathbf{v}_i \cdot A\mathbf{v}_i) + \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{v}_j(\mathbf{v}_i \cdot A\mathbf{v}_j + \mathbf{v}_j \cdot A\mathbf{v}_i) \quad (1.114)$$

En utilisant l'équation (1.109), l'évolution de la norme $|V_k|$ s'écrit :

$$\frac{d}{dt}|V_k|^2 = -2|V_k|^2 \sum_{i=1}^k \mathbf{v}_i \cdot A\mathbf{v}_i \quad (1.115)$$

et donc

$$|V_k(t)| = e^{-2 \int_0^t dt \{ \sum_{i=1}^k \mathbf{v}_i \cdot A\mathbf{v}_i \}} |V_k(0)| \quad (1.116)$$

On est ainsi amené à définir le k -ème exposant de Lyapunov au temps t par

$$\lambda_k(t) = -\frac{1}{t} \int_0^t dt \{ \mathbf{v}_k \cdot A\mathbf{v}_k \} \quad (1.117)$$

À nouveau, ce formalisme peut sembler compliqué, mais les équations (1.114) ont une interprétation très simple : supposons que l'on fasse évoluer k vecteurs \mathbf{v}_i initialement orthonormaux avec la dynamique tangente

$$\dot{\mathbf{v}}_i = -A\mathbf{v}_i \quad (1.118)$$

³⁸Le résultat s'obtient immédiatement en développant par rapport à la première ligne, puis à la deuxième, etc.

et qu'à chaque pas de temps dt , on les réorthogonalise, puis renormalise, en nommant $N_j(t)$ le facteur de renormalisation du vecteur \mathbf{v}_j après orthogonalisation. Alors, lorsque dt tend vers 0, la dynamique des vecteurs \mathbf{v}_i tends vers la dynamique (1.114) et

$$\prod_t \prod_j N_j(t) \simeq \exp\left(-\int_0^t dt \sum_{j=1}^k \mathbf{v}_j \cdot A\mathbf{v}_j\right) = \exp\left(-t \sum_{j=1}^k \lambda_j(t)\right) \quad (1.119)$$

(1.114) correspond donc à la version continue en temps du procédé de Gram-Schmidt [195]. C'est la base du calcul des k exposants de Lyapunov et de leur fonction de grandes déviations.

1.6.3 Grandes déviations du k^{e} exposant de Lyapunov

Pour calculer la fonction de grandes déviations du k^{e} exposant de Lyapunov, on doit donc évaluer

$$Z(\alpha_k, t) = \left\langle e^{-\alpha_k \int_0^t \mathbf{v}_k \cdot A\mathbf{v}_k} \right\rangle_{\text{traj.}} = \langle -|e^{-t(H - \alpha_k N(\mathbf{v}_k))} | P_0(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, \mathbf{v}_0) \rangle \sim e^{t\mu_k(\alpha_k)} \quad (1.120)$$

$\mu_k(\alpha_k)$ est donc l'opposé de la plus basse valeur propre de l'opérateur d'évolution $H - \alpha_k N(\mathbf{v}_k)$, où

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ -\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial p_i^2} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right\} + \sum_{i=1}^{2N} \left\{ -\frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_i} \left(A\mathbf{v}_i - (\mathbf{v}_i \cdot A\mathbf{v}_i)\mathbf{v}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \mathbf{v}_j (\mathbf{v}_i \cdot A\mathbf{v}_j + \mathbf{v}_j \cdot A\mathbf{v}_i) \right) \right\} \quad (1.121)$$

et
$$N(\mathbf{v}_k) = -\mathbf{v}_k \cdot A\mathbf{v}_k \quad (1.122)$$

Concrètement, pour calculer cette fonction de grandes déviations, on procède de la manière suivante : on considère une population de \mathcal{N} marcheurs, qui évoluent dans l'espace des phases avec la dynamique hamiltonienne bruitée (1.29). À chaque marcheur sont attachés k vecteurs unitaires \mathbf{v}_i qui évoluent suivant la dynamique tangente

$$\dot{\mathbf{v}}_i = -A\mathbf{v}_i \quad (1.123)$$

À chaque pas de temps n , on effectue alors une procédure de Gram-Schmidt :

- 1 on renormalise \mathbf{v}_1 et l'on note $N_1(n)$ le facteur de renormalisation,
- 2 on retire $\mathbf{v}_1(\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_1)$ à \mathbf{v}_2 , ce qui le rend orthogonal à \mathbf{v}_1 , puis on le renormalise. On note $N_2(n)$ le facteur de renormalisation,
- \vdots
- k on retire $\mathbf{v}_k(\mathbf{v}_j \cdot \mathbf{v}_k)$ au vecteur \mathbf{v}_j pour $1 \leq k < j$, ce qui rend \mathbf{v}_j orthogonal aux $j-1$ premiers. On le renormalise alors et note $N_j(n)$ le facteur de renormalisation.

On clone alors chaque particule avec un taux égal à $N_k(n)^{\alpha_k}$. Pour cela, on tire au hasard un nombre ε entre 0 et 1 et l'on calcule $\tau = \lfloor \varepsilon + N_k(n)^{\alpha_k} \rfloor$:

- si $\tau = 0$, on supprime le clone,
- si $\tau > 1$, on en crée $\tau - 1$ copies identiques.

On renormalise ensuite la population complète pour la garder constante et l'on note $R_k(n)$ le facteur de renormalisation. La fonction de grandes déviations est alors donnée par

$$\mu_k(\alpha_k) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \sum_n \log R_k(n) \quad (1.124)$$

Toute la partie réplication de cet algorithme est évidemment identique à celle utilisée pour le calcul de $Z(\lambda_1, t)$, où l'on a remplacé le taux d'expansion de v_1 par celui de v_k .

1.6.4 Grandes déviations de l'entropie de Kolmogorov-Sinai

L'entropie de Kolmogorov-Sinai est égale d'après le théorème de Pesin [154] à la somme des exposants de Lyapunov positifs. Dans le cas d'un système hamiltonien sans friction, les exposants se regroupent par paire $\lambda, -\lambda$ et

$$h_{KS} = \sum_{i=1}^N \lambda_i \quad (1.125)$$

Pour calculer la fonction de grandes déviations de h_{KS} , il faut donc calculer

$$\mu_{h_{KS}}(\alpha) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \log \left\langle e^{-\alpha \int_0^t dt \{ \sum_{i=1}^N v_i \cdot A v_i \}} \right\rangle \quad (1.126)$$

On obtient cela en remplaçant dans la section précédente le taux de clonage $N_k(n)^{\alpha_k}$ par $\prod_{i=1}^N N_i(n)^{\alpha}$. Notons que h_{KS} est généralement extensive en N et c'est donc $\frac{1}{N} \mu_{h_{KS}}(\alpha)$ qui est intensive et non pas $\mu_{h_{KS}}$.

1.6.5 Probabilité jointe

On peut également s'interroger sur les distributions de probabilités jointes des exposants de Lyapunov. Si $P(\lambda_1, \dots, \lambda_{2N}, t)$ représente la distribution de probabilité que le système au temps t ait des exposants de Lyapunov $\lambda_1, \dots, \lambda_{2N}$, on peut construire une fonction de grandes déviations en prenant $2N$ transformées de Laplace :

$$\mu(\alpha_1, \dots, \alpha_{2N}) = \lim_{t \rightarrow \infty} \log \left\langle e^{-t(\alpha_1 \lambda_1 + \dots + \alpha_{2N} \lambda_{2N})} \right\rangle = \lim_{t \rightarrow \infty} \log \left\langle e^{-\int_0^t dt \{ \sum_{i=1}^{2N} \alpha_i v_i \cdot A v_i \}} \right\rangle \quad (1.127)$$

Pour calculer μ , il suffit alors de remplacer le taux de réplication par $\prod_{i=1}^{2N} N_i^{\alpha_i}$. Cela est particulièrement intéressant en raison de relations de fluctuations récemment proposées pour ce type de quantité [43, 44].

1.7 Conclusion

Dans cette partie, nous avons montré comment le formalisme des grandes déviations peut être appliqué aux systèmes dynamiques pour étudier des trajectoires rares. Pour cela, nous avons construit un thermostat numérique pour la chaotité. Bien que l’analogie avec la physique statistique soit purement formelle, nous disposons là d’un outil pratique permettant, en faisant varier la « température », de sélectionner des trajectoires de chaotité désirée. Au delà de la beauté du formalisme sous-jacent, le principal attrait de cette méthode est son applicabilité en haute dimension. Nous avons ainsi pu sélectionner des trajectoires très atypiques dans un système de plus de mille degrés de liberté. L’exportation du langage des transitions de phase à un contexte dynamique est également un ingrédient séduisant de ce mariage entre physique statistique et systèmes dynamiques. Toutefois, l’impossibilité d’exercer un contrôle expérimental de la température α^{-1} limite la portée de ce formalisme. Une grande partie des résultats présentés dans ce chapitre correspond aux publications **P2** et **P6**, réalisées en collaboration avec Jorge Kurchan.

Concluons en mentionnant que le type d’algorithme introduit à la section **1.3** ne se limite ni aux exposants de Lyapunov, ni aux systèmes dynamiques étudiés dans ce chapitre. Au chapitre suivant, nous allons en présenter une généralisation à d’autres types d’observables, dans le cadre des chaînes de Markov en temps continu.

Chapitre 2

Grandes déviations et temps continu

2.1 Introduction

La dynamique présentée dans la partie précédente peut-être généralisée à des classes d'observables plus larges que les seuls exposants de Lyapunov. Une telle méthode fut présentée indépendamment par Giardinà, Kurchan et Peliti [80] dans le cadre des chaînes de Markov en temps discret. Si un grand nombre de systèmes tombent dans cette classe, la plupart des systèmes physiques sont toutefois naturellement définis en temps continu et leur évolution doit donc être discrétisée pour que l'on puisse appliquer l'algorithme proposé dans [80]. Cette stratégie fut suivie avec succès par Giardinà et al. pour le gaz de Lorentz [80], mais elle pose des problèmes importants. Tout d'abord, une telle discrétisation repose sur le choix d'un pas de temps dt arbitraire. Ce dernier doit être suffisamment faible pour minimiser les erreurs dues à la discrétisation, mais l'efficacité de l'algorithme est dramatiquement altérée par un dt trop faible. En effet, des valeurs trop petites ne font qu'allonger inutilement la durée de simulation, la plupart des pas de temps étant perdus à rejeter des événements. On pourrait penser qu'il suffit de déterminer l'échelle de temps microscopique « typique » du système puis de la diviser par un facteur d'ordre 10 pour obtenir une valeur de dt raisonnable. Cependant, même si la dynamique d'un système est caractérisée par une échelle de temps *typique* τ , rien n'assure que ses grandes déviations ne dépendent pas fortement d'échelles de temps très différentes. Par exemple, si l'on choisit de simuler un trafic autoroutier, les grandes déviations du courant sont dominées par des embouteillages (courant faible) ou des trajectoires quasi balistiques (trafic parfaitement fluide), le « taux » de transition du système variant de $\mathcal{O}(1)$ à $\mathcal{O}(N)$. De manière plus générale, lors qu'une transition de phase dynamique [119, 120] a lieu, les grandes déviations peuvent impliquer des trajectoires présentant des temps caractéristiques qui suivent des lois d'échelles différentes avec la taille du système. On est alors obligé de recourir à une simulation en temps continu.

2.2 Grandes déviations

Par souci de cohérence, nous présentons dans cette section le formalisme des grandes déviations appliqué précédemment aux exposants de Lyapunov (section 1.2.4.2) dans un cadre plus général. Considérons un système dont on souhaite étudier les grandes déviations d'observables que l'on suppose de la forme suivante :

$$O(t) = \int_0^t \pi(t') dt' \quad (2.1)$$

et dont on note
$$o(t) = \frac{1}{t} \int_0^t \pi(t') dt' \quad (2.2)$$

la version intensive en temps. Si cette classe contient entre autres les moyennes d'observables statiques, (2.2) décrit toutefois un ensemble beaucoup plus large. Par exemple, si $\pi(t')$ correspond au taux d'expansion d'un k -volume de l'espace des phases, $o(t)$ est la somme des k premiers exposants de Lyapunov au temps t . De même, si l'on considère un gaz sur réseau unidimensionnel et que l'on associe respectivement $\pi = 1$ et $\pi = -1$ à chaque saut d'une particule vers la droite ou vers la gauche, alors $o(t)$ représente le courant moyen entre les temps 0 et t et $O(t)$ le courant total.

Pour quantifier les fluctuations de l'observable $O(t)$, on cherche à calculer la fonction de grandes déviations de sa distribution de probabilité. Si l'on note $P(o, t)$ la probabilité que $o(t) = o$, celle-ci est définie par

$$P(o, t) = e^{ts(o,t)} \quad s(o, t) = \frac{1}{t} \log[P(o, t)] \xrightarrow{t \rightarrow \infty} s(o) \quad (2.3)$$

Notons que si cette loi d'échelle est fréquente en physique statistique d'équilibre (cf section 1.2.4.2), elle n'est toutefois pas garantie. Par exemple, dans le cas où la queue de $P(o, t)$ serait une loi de puissance, $s(o)$ serait nulle.

Rappelons à nouveau l'analogie entre $s(o)$ et une entropie en physique statistique d'équilibre. Lorsque l'on construit l'ensemble microcanonique, on définit¹ la densité d'entropie s comme

$$s(E) = \frac{1}{V} \log \Omega(E) \quad (2.4)$$

où V est le volume du système étudié et $\Omega(E)$ le nombre d'états d'énergie E . L'analogie entre ces deux formulations n'est pas anodine, puisque l'on peut reformuler la physique statistique d'équilibre en terme de fonctions de grandes déviations [68]. Nous poursuivrons à nouveau cette analogie tout au long de cette étude. Comme dans la section 1.2.4.2, on préfère travailler dans l'ensemble canonique plutôt que microcanonique et l'on introduit pour cela la fonction génératrice des moments de o :

$$Z_o(\alpha, t) = \langle e^{\alpha O} \rangle = \int do e^{\alpha O} P(o, t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} e^{t\mu_o(\alpha)} \quad (2.5)$$

¹La constante de Boltzmann étant prise égale à 1.

μ_o étant la fonction génératrice des cumulants de o . Comme expliqué à la section 1.2.4.2, la détermination numérique de ces fonctions est difficile, car une simulation standard échantillonne les trajectoires telles que

$$s'(o) = 0 \tag{2.6}$$

alors que Z est dominée par les trajectoires qui satisfont

$$s'(o) = -\alpha \tag{2.7}$$

La probabilité d'observer ces dernières est exponentiellement petite en t et nécessite donc un nombre exponentiellement grand de simulations.

Dans la suite de ce chapitre, nous rappelons d'abord dans la section 2.3.1 le formalisme des chaînes de Markov en temps continu et définissons les fonctions de grandes déviations. Nous présentons ensuite l'algorithme dans la section 2.3.3 avant de l'appliquer à trois exemples dans la section 2.4 : le processus d'exclusion symétrique, son pendant asymétrique, qui présente l'intérêt d'être spontanément hors équilibre, et le processus de contact en champ, où une transition de phase dynamique a lieu.

2.3 Formalisme et algorithme

2.3.1 Chaînes de Markov en temps continu

Considérons un système décrit par un nombre fini de configurations $\{\mathcal{C}\}$, dont l'évolution est déterminée par des taux de transition $W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')$ entre différentes configurations. La probabilité $P(\mathcal{C}, t)$ de trouver le système en \mathcal{C} au temps t évolue suivant l'équation maîtresse

$$\partial_t P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', t) - r(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}, t) \tag{2.8}$$

où le taux d'échappement $r(\mathcal{C})$ est donné par

$$r(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \tag{2.9}$$

Lors d'une trajectoire typique, ce système part d'une configuration initiale \mathcal{C}_0 et visite un ensemble de configurations $\{\mathcal{C}_k\}_{0 \leq k \leq K}$, sautant de \mathcal{C}_k à \mathcal{C}_{k+1} au temps t_{k+1} , avec une probabilité $\frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)}$ (voir figure 2.1). Notons que contrairement aux cas en temps discret, \mathcal{C}_k et \mathcal{C}_{k+1} sont, par construction, distinctes. Le nombre total de sauts K fluctue, puisque le temps passé dans chaque configuration est une variable aléatoire. Si le système arrive au temps t_0 dans la configuration \mathcal{C}_0 , l'évolution suivante a lieu à un temps t_1 , distribué suivant une loi de Poisson :

$$\rho(t_1 | \mathcal{C}_0, t_0) = r(\mathcal{C}_0) e^{-(t_1 - t_0)r(\mathcal{C}_0)} \tag{2.10}$$

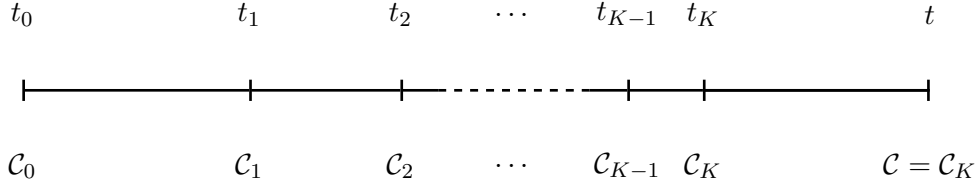


Fig. 2.1 : Une histoire typique du système. Les intervalles entre les changements de configuration sont des variables aléatoires distribuées selon des lois de Poisson dépendant de la configuration de départ. Le nombre total de changements de configuration entre 0 et t , noté K , fluctue entre les histoires.

2.3.2 Fonction de grandes déviations

Considérons une observable A extensive en temps, pouvant être décomposée comme une somme de contributions élémentaires $\pi_{\mathcal{C}_k \mathcal{C}_{k+1}}$ le long d'une histoire $\{\mathcal{C}_k\}_{0 \leq k \leq K}$:

$$A = \sum_{0 \leq k \leq K-1} \pi_{\mathcal{C}_k \mathcal{C}_{k+1}} \quad (2.11)$$

Cette forme est peu restrictive et la plupart des observables généralement étudiées tombent dans cette classe. Par exemple, si A est le courant total d'un modèle de gaz sur réseau unidimensionnel, $\pi_{\mathcal{C} \mathcal{C}'}$ est la contribution d'un saut élémentaire (voir section 2.4.1). La fonction de partition dynamique (2.5) s'écrit alors :

$$Z(\alpha, t) = \langle e^{\alpha A t} \rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} e^{t \mu_a(\alpha)} \quad (2.12)$$

où la moyenne $\langle \dots \rangle$ est prise sur toutes les histoires entre 0 et t , et $a = A(t)/t$ est intensive en temps. La fonction de grandes déviations $\mu_a(\alpha)$ est la transformée de Legendre de $s(a)$:

$$\mu_a(\alpha) = \max_a [s(a) + \alpha a] \quad (2.13)$$

Sous des conditions relativement générales [68], cette formule peut être inversée et on récupère $s(a)$ à partir de la connaissance de $\mu_a(\alpha)$:

$$s(a) = \max_{\alpha} [\mu_a(\alpha) - \alpha a] \quad (2.14)$$

Pour calculer $Z(\alpha, t)$, commençons par introduire l'équation maîtresse satisfaite par la probabilité jointe $P(\mathcal{C}, A, t)$ d'être dans la configuration \mathcal{C} au temps t avec $A(t) = A$:

$$\partial_t P(\mathcal{C}, A, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', A - \pi_{\mathcal{C}' \mathcal{C}}, t) - r(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}, A, t) \quad (2.15)$$

La transformée de Laplace $\hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t) = \sum_A e^{\alpha A} P(\mathcal{C}, A, t)$ évolue alors suivant

$$\partial_t \hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W_{\alpha}(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \hat{P}(\mathcal{C}', \alpha, t) - r(\mathcal{C}) \hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t) \quad (2.16)$$

où les taux modifiés W_α sont donnés par

$$W_\alpha(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) = e^{\alpha \pi_{\mathcal{C}'\mathcal{C}}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) \quad (2.17)$$

De l'équation (2.16), on déduit que $Z(\alpha, t) = \sum_{\mathcal{C}} \hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t)$ se comporte aux temps longs comme $e^{t\mu_\alpha(\alpha)}$ où $\mu_\alpha(\alpha)$ est la plus grande valeur propre d'un opérateur d'évolution (qui ne conserve pas la probabilité). Cela justifie a posteriori la loi d'échelle décrite dans (2.12). La détermination de la fonction de grandes déviations $\mu_\alpha(\alpha)$ revient alors au calcul de cette valeur propre, que nous effectuons dans la section suivante.

2.3.3 Dynamique de population

Considérons la chaîne de Markov modifiée, définie par les taux W_α , dont l'opérateur d'évolution s'écrit :

$$(\mathbb{W}_\alpha)_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} = W_\alpha(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) - r_\alpha(\mathcal{C})\delta_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} \quad (2.18)$$

où

$$r_\alpha(\mathcal{C}) = \sum_{\mathcal{C}'} W_\alpha(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (2.19)$$

L'évolution de $\hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t)$ s'écrit :

$$\partial_t \hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t) = \sum_{\mathcal{C}'} (\mathbb{W}_\alpha)_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} \hat{P}(\mathcal{C}', \alpha, t) + [r_\alpha(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})] \hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t) \quad (2.20)$$

La dynamique correspondante alterne entre des changements de configuration déterminés par les taux W_α et des évolutions exponentielles de taux $r_\alpha(\mathcal{C}) - r(\mathcal{C})$ de $\hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t)$. Ces deux régimes correspondent respectivement aux premier et second termes du membre de droite de l'équation (2.20). En particulier, on montre dans l'annexe D que le calcul de $Z(\alpha, t)$ se résume à

$$Z(\alpha, t) = \left\langle e^{\int_0^t r_\alpha[\mathcal{C}(t')] - r[\mathcal{C}(t')] dt'} \right\rangle_\alpha \quad (2.21)$$

où la moyenne $\langle \dots \rangle_\alpha$ est prise sur toutes les trajectoires allant du temps 0 au temps t de la dynamique modifiée par α (2.17). Le changement de taux $W \rightarrow W_\alpha$ peut être vu comme une version de la procédure nommée *importance sampling*, qui favorise des histoires pertinentes pour le calcul de $Z(\alpha, t)$. Pour calculer la moyenne de l'exponentielle du membre de droite de (2.21), on va, comme dans le chapitre précédent (section 1.3), avoir recours à une méthode d'enrichissement de l'échantillonnage pour favoriser les trajectoires pertinentes.

Considérons \mathcal{N}_0 clones du système, évoluant en parallèle avec la dynamique déterminée par les taux W_α . Soit c_β , le premier clone qui change de configuration, et t_β le temps auquel cette évolution a lieu :

- 0 le temps est augmenté jusqu'à t_β ,
- 1 c_β saute de sa configuration \mathcal{C} vers une autre configuration \mathcal{C}' avec probabilité $W_\alpha(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}')/r_\alpha(\mathcal{C})$,

- 2] l'intervalle de temps Δt jusqu'au prochain saut de c_β est déterminé à partir d'une loi de Poisson (2.10) de paramètre $r_\alpha(\mathcal{C}')$,
- 3] le clone c_β est alors répliqué ou tué avec un taux $\mathcal{Y}(\mathcal{C}') = e^{\Delta t[r_\alpha(\mathcal{C}') - r(\mathcal{C}')]}$:
- on calcule alors $y = \lfloor \mathcal{Y}(\mathcal{C}') + \varepsilon \rfloor$ où ε est uniformément distribué sur $[0, 1]$,
 - si $y = 0$, la copie c_β est tuée,
 - si $y > 1$, on réalise $y - 1$ nouvelles copies de c_β .

On recommence alors la procédure pour le clone dont l'évolution est la plus proche dans le futur. Une telle procédure de réplication modifie le nombre total de clones par un facteur $R(t_\beta) = \frac{\mathcal{N} + y - 1}{\mathcal{N}}$, qui représente l'évolution exponentielle de $\hat{P}(\mathcal{C}', \alpha, t)$. Finalement, $Z(\alpha, t)$ est simplement obtenue par la variation de population

$$Z(\alpha, t) = \frac{\mathcal{N}(t)}{\mathcal{N}_0} \quad (2.22)$$

Toutefois, un tel algorithme entraîne une croissance ou une déplétion exponentielle de la population de clones et nous ajoutons donc un quatrième pas pour maintenir celle-ci constante :

- 4] si $y = 0$, un clone $c_\beta \neq c_\alpha$ est choisi aléatoirement pour être répliqué, tandis que si $y > 1$, $y - 1$ clones sont choisis uniformément parmi les $\mathcal{N} + y - 1$ clones et sont tués.

La fonction de grandes déviations $\mu_a(\alpha)$ est alors obtenue à partir du comportement aux temps longs du produit des facteurs de réplication :

$$\frac{1}{t} \ln R(t_1) \dots R(t_\tau) = \frac{1}{t} \ln \langle e^{\alpha t a} \rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \mu_a(\alpha) \quad (2.23)$$

où τ est le nombre total de changement de configuration parmi toutes les histoires entre 0 et t .

Notons finalement que l'on peut définir une nouvelle mesure sur l'espace des trajectoires telle que la moyenne d'une observable \mathcal{B} se lise :

$$\langle \mathcal{B} \rangle_\alpha = \frac{\langle \mathcal{B} e^{\alpha t a} \rangle}{\langle e^{\alpha t a} \rangle} \quad (2.24)$$

C'est la mesure observée numériquement lors des simulations de l'algorithme présenté ci-dessus.

2.3.4 Intégration thermodynamique

Comme à la section 1.5, le calcul direct de $\mu_a(\alpha)$, qui est en général relativement bruité, peut être remplacé avantageusement par l'utilisation de l'intégration thermodynamique. Si l'on dérive la définition de μ_a par rapport à α

$$\mu_a(\alpha) = \frac{1}{t} \ln \langle e^{\alpha t a} \rangle \quad (2.25)$$

on obtient :

$$\mu'_a(\alpha) = \frac{\langle a e^{\alpha a} \rangle}{\langle e^{\alpha a} \rangle} = \langle a \rangle_\alpha \quad (2.26)$$

qui est simplement la valeur moyenne de a sur la population des clones. Finalement

$$\mu_a(\alpha) = \int_0^\alpha \langle a \rangle_r dr \quad (2.27)$$

Grâce à l'intégration, le bruit est lissé.

2.4 Trois exemples

2.4.1 Le processus symétrique d'exclusion simple (SSEP)

Nous appliquons à présent l'algorithme au calcul des grandes déviations du courant Q dans le cas du processus symétrique d'exclusion simple [176] avec conditions aux limites périodiques. Le système est composé de N particules diffusant sur un réseau unidimensionnel de taille L . Chaque particule peut sauter avec un taux 1 vers un site voisin, pourvu que celui-ci soit inoccupé. Le courant total Q augmente ou diminue de 1 à chaque saut, en fonction de la direction de celui-ci. En utilisant la notation (2.11), $\pi_{CC'} = 1$ ou -1 quand une particule se déplace vers la droite ou la gauche, respectivement.

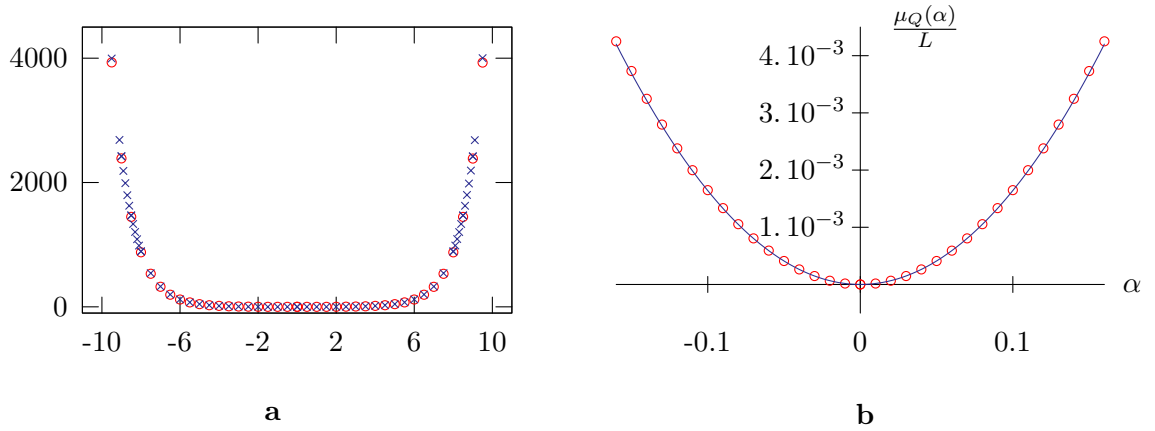


Fig. 2.2 : Évaluation numérique de $\frac{1}{L}\mu_Q(\alpha)$ pour le SSEP ($N = 200$, $L = 400$). a : Comparaison entre l'évaluation directe de $\mu_Q(\alpha)$ (croix bleues) et le résultat de l'intégration thermodynamique (ronds rouges). b : Comparaison entre le résultat numérique (ronds rouges) et le développement (2.28), valide pour faible α (ligne continue).

Comme dans de nombreux exemples de processus d'exclusion [56, 118], la fonction de grandes déviations $\mu_Q(\alpha)$ est extensive en L et dans la limite thermodynamique (N et L grand, N/L fini), nous étudions plutôt la fonction intensive $\frac{1}{L}\mu_Q(\alpha)$. Bien que le courant soit nul en moyenne (les sauts sont symétriques), sa variance est finie et $\mu_Q(\alpha)$ vaut pour de petites valeurs de α [26, 176] :

$$\frac{1}{L}\mu_Q(\alpha) = \rho(1 - \rho)\alpha^2 + \mathcal{O}(L\alpha^4) \quad (2.28)$$

Dans ce régime, les fluctuations sont gaussiennes et les simulations sont en accord parfait avec le développement (2.28) (cf. figure 2.2.b). Pour de plus grandes valeurs de α , les fluctuations sont non gaussiennes et correspondent à de très grandes fluctuations du courant (Figure 2.2.a).

Le calcul direct de $\mu_Q(\alpha)$ est également comparé avec le résultat obtenu par intégration thermodynamique (Figure 2.2.a). À ce niveau de précision numérique, les deux évaluations coïncident. Notons que le temps de convergence avec l'intégration thermodynamique est plus de 10 fois plus court que lors de l'évaluation directe.

2.4.2 Le processus asymétrique d'exclusion simple (ASEP)

Nous considérons à présent les grandes déviations du courant total Q pour un modèle hors équilibre : le processus d'exclusion simple asymétrique [176] avec conditions aux limites périodiques. Le système est composé de N particules diffusant sur un réseau unidimensionnel de taille L . Chaque particule saute vers la gauche avec un taux q et vers la droite avec un taux p tant que le site d'arrivée est libre. Le courant total est défini comme dans la section précédente. Pour $p \neq q$, un courant stationnaire Q^{st} non nul circule à travers le système ; dans la limite thermodynamique, $Q^{st} = L\rho(1 - \rho)(p - q)$.

La fonction de grandes déviations $\mu_Q(\alpha)$ est symétrique autour de $\frac{E}{2}$ (avec $E = \ln \frac{q}{p}$) : d'après le théorème de fluctuation $\mu_Q(E - \alpha) = \mu_Q(\alpha)$. Pour $q > p$, le courant stationnaire Q^{st} est négatif. La branche $\alpha > E/2$ correspond à des déviations où le courant moyen est supérieur à Q^{st} , tandis qu'il est inférieur pour $\alpha < E/2$ (rappelons que $\mu'_Q(\alpha) \simeq \langle \frac{Q}{t} \rangle_\alpha$). La fonction de grandes déviations $\mu_Q(\alpha)$ est représentée sur la figure 2.3.a, pour $q = 1, 2$, $p = 0, 8$.

La procédure numérique proposée dans ce chapitre permet également de visualiser les configurations typiques pour $\alpha \neq 0$, i.e. celles qui sont responsables d'un courant différent de Q^{st} .

- Pour les grands courants (c'est-à-dire $|\alpha| \gg E$ et Q d'ordre N), le courant est rendu maximal par les configurations les plus homogènes possibles (figure 2.3.b) : le profil moyen est plat, avec une densité moyenne N/L .
- Pour les faibles courants (c'est-à-dire $\alpha \approx \frac{E}{2}$ et Q d'ordre 1), le profil typique prend la forme d'un choc suivi d'un anti-choc (figures 2.4.a-c). L'asymétrie du profil favorise un léger courant moyen du côté dont la pente est la moins forte.

2.4.3 Le processus de contact

Nous étudions à présent le processus de contact unidimensionnel [88]. Le modèle est défini sur un réseau de L sites, avec conditions aux bords périodiques. Chaque site i est soit vide ($n_i = 0$) soit occupé par une particule ($n_i = 1$). Les particules s'évaporent avec un taux 1 et s'adsorbent sur des sites vides avec un taux

$$W(n_i = 0 \rightarrow n_i = 1) = \lambda(n_{i-1} + n_{i+1}) + h \quad (2.29)$$

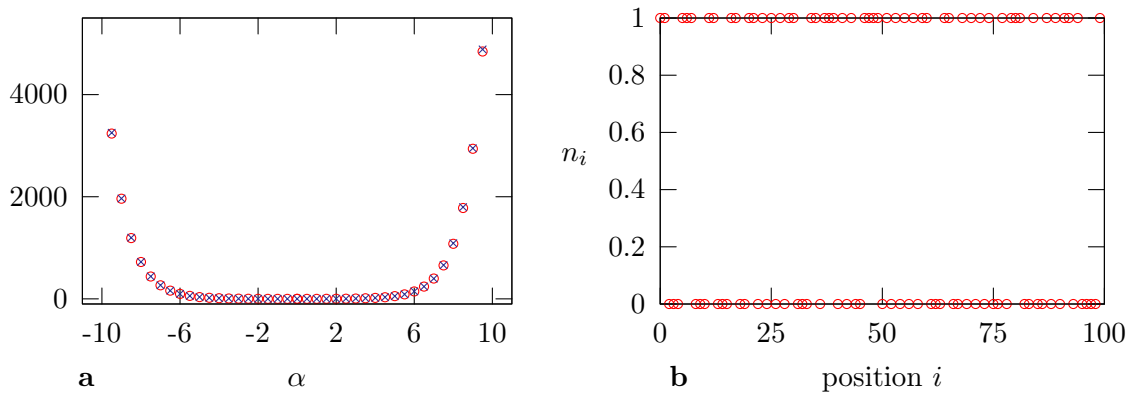


Fig. 2.3 : **a** : Fonction de grandes déviations $\frac{1}{L}\mu_Q(\alpha)$ pour l'ASEP ($L = 400$ sites, $N = 200$ particules). Les taux de transition sont $p = 0,8$ et $q = 1,2$, d'où $E/2 \simeq 0,2$. Les croix bleues et les cercles rouges correspondent respectivement à l'évaluation directe de $\frac{1}{L}\mu_Q(\alpha)$ et au résultat de l'intégration thermodynamique. **b** : Une configuration typique ($n_i = 0$ ou 1 est le nombre d'occupation au site i) pour une très grande déviation de courant ($|\alpha| \gg E$), le profil est uniforme. Ici, $L = 100$, $N = 50$.

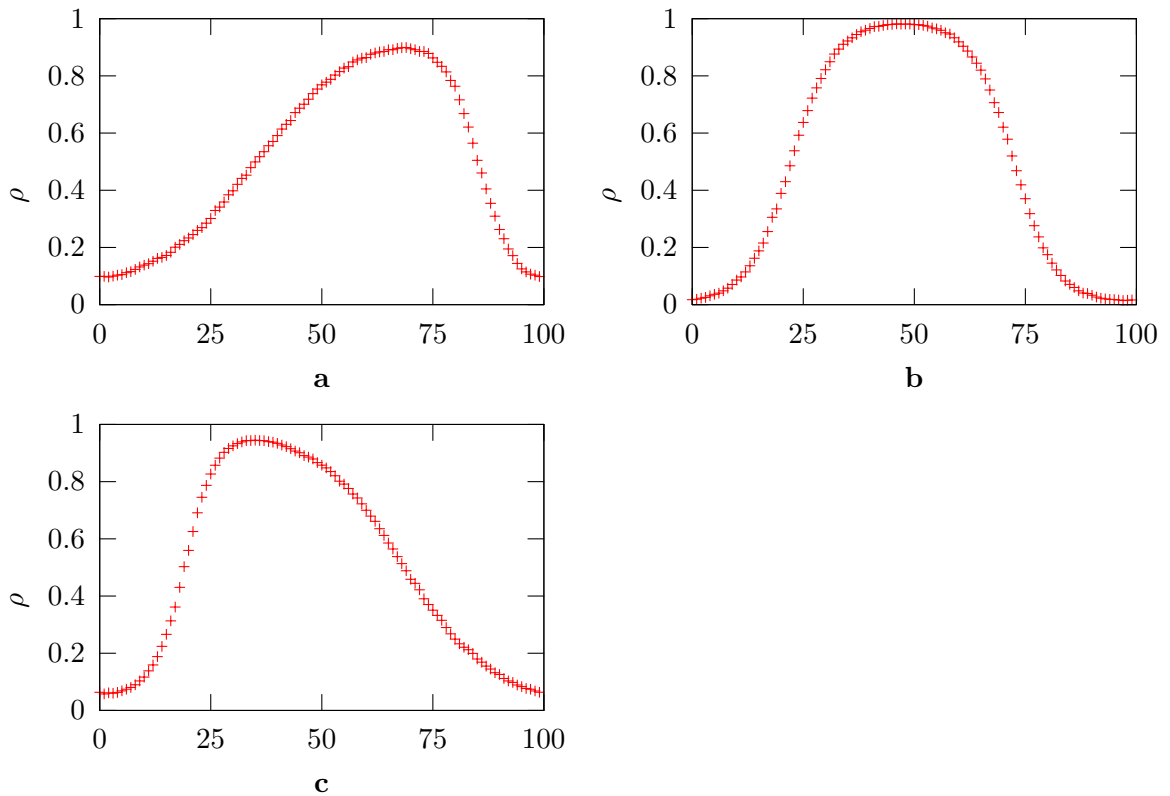


Fig. 2.4 : Profil moyen de l'ASEP pour différentes valeurs de α autour de $E/2$ ($L = 100$, $N = 50$, $p = 0,8$, $q = 1,2$, $E/2 \simeq 0,2$). **a** : Pour $\alpha = 0$, $1 < E/2$, le courant moyen est négatif (les particules vont majoritairement vers la gauche). **b** : Pour $\alpha \simeq 0,2 = E/2$, le courant moyen est nul. **c** : Pour $\alpha = 0,30 > E/2$, le courant moyen est positif.

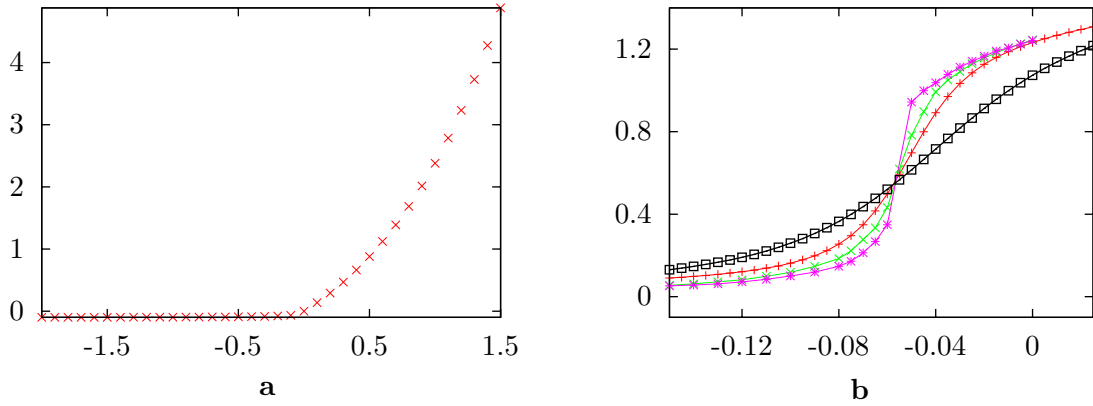


Fig. 2.5 : **a :** Représentation de la fonction de grandes déviations $\frac{1}{L}\mu_K(\alpha)$ associée au nombre d'évènements K dans le processus de contact avec champ ($L = 120$ sites) **b :** La transition de phase dynamique a lieu pour $\alpha_c \sim -0.057$. Elle est mise en évidence grâce à la représentation de $\mu'_K(\alpha) = \frac{1}{t}\langle K \rangle_\alpha$ pour différentes tailles du système ($L = 4$ en noir, 8 en rouge, 15 en bleu et 50 en magenta).

où λ et h sont des constantes positives. En particulier, il y a un taux spontané d'adsorption h . Lorsque $h = 0$, le système atteint toujours un état absorbant vide tant que sa taille est finie [54, 60], tandis que l'état stationnaire est actif pour $\lambda > 1$ dans la limite thermodynamique.

Dans la version champ moyen, la dynamique d'équilibre est influencée par la présence d'un état inactif, absorbant. Cela peut se voir via l'étude de la fonction de grandes déviations du nombre d'évènements K , une quantité qui est simplement donnée par le nombre total de changements de configuration durant une histoire du système. $\frac{1}{L}\mu_K(\alpha)$ est non analytique [120] pour une valeur critique α_c , qui tend vers 0 avec h . Comme nous l'avons expliqué précédemment, les fonctions de grandes déviations comme $\mu_K(\alpha)$ jouent un rôle analogue à celui d'une énergie libre dynamique, dont les ruptures d'analyticité sont synonymes de transition de phase dynamique. Dans des termes plus physiques, cela signifie qu'il existe deux classes d'histoires : un état « très actif » domine l'état stationnaire tandis que les grandes déviations correspondant à $\alpha < \alpha_c$ sont dominées par des trajectoires « peu actives ». Pour $\alpha = \alpha_c$, les deux phases coexistent à la manière d'une transition de phase du premier ordre. La question de la survie de cette transition en dimension finie est toujours ouverte.

Au vu des résultats numériques obtenus en utilisant notre algorithme, ce scénario semble être également valide en dimension 1. Sur la figure 2.5.a, nous représentons la fonction $\mu_K(\alpha)$ pour un système de grande taille et pour des paramètres $\lambda = 3.5$, $h = 0.1$. Les deux branches de la fonction correspondent à deux phases distinctes. Comme dans la version champ moyen, la non analyticité apparaît comme un saut dans la dérivée première de $\frac{1}{L}\mu_K(\alpha)$ dans la limite thermodynamique. En utilisant la relation $\mu'_K(\alpha) = \frac{1}{t}\langle K \rangle_\alpha$, nous pouvons étudier la loi d'échelle de $\frac{1}{L}\mu'_K(\alpha)$ avec la taille du système (figure 2.5.b). Les résultats supportent l'idée d'une transition de phase pour $\alpha_c \sim -0.057$. Aux environs de α_c , la dynamique présente une

superposition d’histoires « plus actives » et « moins actives », pour lesquelles l’utilisation d’un algorithme en temps continu est particulièrement utile.

2.5 Conclusion

Nous avons présenté un algorithme simple pour évaluer les fonctions de grandes déviations des chaînes de Markov en temps continu, sans avoir à recourir à une discrétisation du temps. Nous avons montré à l’aide d’exemples spécifiques que cette méthode peut être utilisée avec succès dans des systèmes où la présence de différentes échelles de temps rend l’approche en temps discret difficile. L’ensemble de ces résultats correspond à la publication **P3**, réalisée en collaboration avec Vivien Lecomte.

Dans le contexte des simulations quantiques, une approche du temps continue des dynamiques de type *Diffusion Monte Carlo* fut proposée par Syljuåsen [179], reposant sur un formalisme continu mais une implémentation discrète. Il serait intéressant de porter la méthode présentée ici au cadre de la simulation des systèmes quantiques.

Deuxième partie

Grandes déviations et instantons

Chapitre 3

Modèle dual et grandes déviations

3.1 Introduction

La manière la plus simple d'amener un système hors équilibre est de le mettre au contact de deux réservoirs¹ aux effets antagonistes : deux thermostats de températures différentes, deux réservoirs de particules n'ayant pas le même potentiel chimique, etc... Un courant traverse alors le système, plongeant celui-ci hors de l'équilibre.

En terme de complexité, la compréhension des systèmes unidimensionnels menés hors équilibre par des contraintes à leurs bords constitue ainsi le premier pas dans le monde de la physique hors équilibre. Malgré la simplicité de leur définition, ces modèles ne sont en général pas résolubles, ce qui explique l'enthousiasme suscité par les résultats exacts obtenus au cours des vingt dernières années (voir [55] pour une revue). Récemment, Derrida, Lebowitz et Speer [58] (DLS) ont obtenu une expression exacte pour la fonction de grandes déviations du profil de densité du processus symétrique d'exclusion simple (SSEP) – un modèle de transport de particules unidimensionnel – via une méthode de matrice développée précédemment [25, 57, 69, 157, 165].

Les solutions exactes de modèles microscopiques sont autant de jalons qui éclairent le chemin du physicien dans sa quête d'une physique hors équilibre. Toutefois, elles reposent en général sur la nature intime des modèles étudiés et la généralité des conclusions qui en découlent n'est donc pas établie. Il est par conséquent important de pouvoir utiliser des approches plus générales, purement macroscopiques, qui ne reposent pas sur les nombreuses symétries des modèles microscopiques intégrables. Un tel cap fut franchi dans le cadre de la théorie des fluctuations macroscopiques par Bertini et al. [18–20]. Celle-ci est en un mot l'application d'un développement WKB [36, 107, 193] à l'opérateur d'évolution, valide dans la limite des grandes échelles. À la manière habituelle de la théorie semiclassique [48, chap. 27] et de l'optique géométrique, le logarithme des fonctions d'onde évolue avec une équation

¹On entend ici réservoir au sens large, il peut s'agir d'un réservoir de particules, d'énergie (un thermostat) etc. En un mot, il s'agit d'un système macroscopique qui impose une valeur précise d'un paramètre intensif (température, potentiel chimique ...) conjugué à une grandeur extensive (nombre de particules, énergie ...).

de Hamilton-Jacobi, dont les courbes caractéristiques satisfont les équations de Hamilton correspondantes.

Pour la limite hydrodynamique du SSEP, Bertini et al.[18] furent capables de résoudre explicitement l'équation de Hamilton-Jacobi et obtinrent ce faisant la fonction de grandes déviations du profil de densité. Ils montrèrent ainsi que le calcul de la fonction de grandes déviations est indépendant, sur le plan logique, de la solution exacte du modèle microscopique, bien que celle-ci puisse servir de guide pour la résolution de l'équation de Hamilton-Jacobi. Cette dernière revient à effectuer une série de changements de variable aux conséquences surprenantes, dont le degré de généralité reste à déterminer.

Dans ce chapitre, nous montrons que le problème des grandes déviations du profil de densité de ce modèle hors équilibre se ramène à celui d'un modèle isolé, à l'équilibre microcanonique, dont les grandes déviations s'obtiennent simplement à l'aide du bilan détaillé. Une telle correspondance pourrait surprendre tant la physique diffère lorsque l'on quitte l'équilibre. Par exemple, la symétrie d'Onsager-Machlup [148, 149] entre l'émergence et la relaxation de profils atypiques, valide à l'équilibre, est brisée pour le SSEP en conditions ouvertes. De même, l'apparition de corrélations à longue portée est une signature des modèles hors équilibre. Il n'y a toutefois pas de contradiction ici parce que le changement de variable du modèle dual vers le modèle original est non local et introduit tous les ingrédients de la physique hors équilibre.

Dans la section 3.2, nous présentons tout d'abord le modèle étudié et sa limite hydrodynamique. Nous reformulons ensuite dans la section 3.3 la question des grandes déviations dans le langage de la théorie des champs que nous aurons introduite. Nous montrons alors section 3.4 comment le bilan détaillé permet de répondre à cette question pour un système à l'équilibre et pourquoi cette stratégie échoue dans le cas qui nous intéresse. Dans la section 3.5, nous présentons, via le formalisme hamiltonien, une solution équivalente à celle de Bertini et al. [18] pour le SSEP. Finalement, nous montrons section 3.6.1 comment ce résultat peut être interprété à la lumière du changement de variable non local qui ramène le problème à l'étude des grandes déviations d'un système à l'équilibre.

Ce chapitre est assez technique et nous avons choisi de donner ici une version relativement exhaustive des calculs, à l'exception notable de la construction de la limite hydrodynamique, via l'utilisation d'états cohérents, qui sera présentée dans une publication ultérieure. Une version plus synthétique, qui reprend l'essentiel des idées physiques dans une forme condensée, est disponible dans la publication P4, réalisée en collaboration avec Jorge Kurchan et Vivien Lecomte.

3.2 Présentation du modèle et limite hydrodynamique

3.2.1 Présentation

Les processus d'exclusion simple sont des gaz sur réseau dont les particules interagissent via une répulsion de coeur dur. En une dimension, chaque site du système peut être occupé par

une particule $n_i = 1$ ou vide $n_i = 0$. On note p et q les taux de transition des particules vers la droite et la gauche, celles-ci étant permises tant que le site d'arrivée est libre. Le système est mis en contact à ses extrémités avec des réservoirs et l'on note suivant la convention habituelle $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ les taux d'injection et de sortie des particules au niveau des sites 1 et L (figure 3.1).

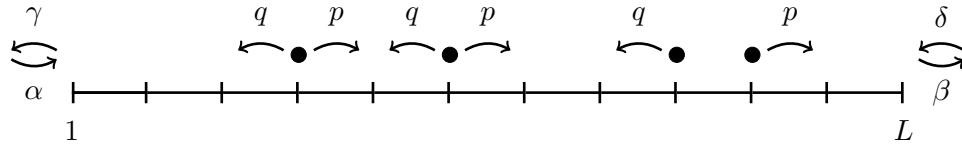


Fig. 3.1 : Représentation schématique d'un processus d'exclusion simple unidimensionnel de taille L .

Lorsque $p = q$, la diffusion est symétrique et la dynamique satisfait le bilan détaillé à l'intérieur du système. Au contraire, lorsque $p \neq q$, le processus est asymétrique et le système intrinsèquement hors équilibre². Nous nous intéresserons par la suite uniquement au SSEP ($p = q$) dont l'aspect hors équilibre est uniquement dû au couplage à des réservoirs de potentiels chimiques distincts ($\frac{\alpha}{\gamma} \neq \frac{\delta}{\beta}$).

3.2.2 Limite hydrodynamique

Ce modèle microscopique est stochastique et la description de sa dynamique ou la caractérisation de sa mesure stationnaire nécessite l'étude de l'opérateur d'évolution associé à son équation maîtresse. Le spectre de celui-ci renferme en effet les différentes informations nécessaires à la compréhension de la physique du système. C'est une tâche ardue que l'on est en général incapable de mener à bien. Dans le cadre de la physique statistique, on s'intéresse à la limite thermodynamique du système, ce qui simplifie grandement le problème. La description microscopique intime du modèle n'est alors plus nécessaire et l'on peut se contenter de décrire la physique à l'échelle d'observation du système. L'idée sous-jacente est que les différentes échelles sont relativement « découplées » et que l'on peut décrire la physique au niveau macroscopique à l'aide de champs continus, dont l'évolution ne fait pas intervenir de quantité microscopique³. Par exemple, dans le cas du SSEP, on ne s'intéresse plus au taux d'occupation de chaque site, mais à un champ de densité $\rho(x)$, où $x \in [0, 1]$ décrit la position le long du système⁴. L'effet des réservoirs se traduit alors simplement à travers des conditions

²Par exemple, le courant moyen est non nul dans l'état stationnaire lorsque les conditions aux limites sont périodiques.

³Plus précisément, la forme des équations dépend de la nature microscopique du système mais ne fait pas intervenir d'observables microscopiques.

⁴On considère sans perte de généralité que le système est de taille 1 à l'échelle d'observation.

aux limites spatiales sur la densité⁵ :

$$\forall t, \quad \rho(0, t) = \frac{\alpha}{\alpha + \gamma} \equiv \rho_0 \quad \rho(1, t) = \frac{\delta}{\delta + \beta} \equiv \rho_1 \quad (3.1)$$

En première approximation, l'évolution de la densité est déterministe et les profils relaxent diffusivement suivant la loi de Fick [71] :

$$\dot{\rho} = \nabla[D(\rho)\nabla\rho] \quad D(\rho) = \frac{1}{2} \quad (3.2)$$

Aux temps longs, la densité relaxe vers un profil stationnaire $\bar{\rho}(x)$ interpolant linéairement entre ρ_0 et ρ_1 :

$$\bar{\rho}(x) = \rho_0 + x(\rho_1 - \rho_0) \quad (3.3)$$

Bien sûr, le système n'est pas parfaitement déterministe et l'on permet par conséquent à la dynamique de fluctuer autour de son comportement hydrodynamique (3.2). On considère pour cela l'équation stochastique suivante [176] :

$$\dot{\rho}(x, t) = -\nabla J(x, t) \quad J(x, t) = -\frac{1}{2}\nabla\rho(x, t) - \eta(x, t) \quad (3.4)$$

où $\eta(x, t)$ est un bruit blanc gaussien de moyenne nulle, dont la variance est donnée par

$$\langle \eta(x, t)\eta(x', t') \rangle = \frac{1}{L} \sigma[\rho(x, t)] \delta(x, x') \delta(t - t') \quad \sigma[\rho(x, t)] = \rho(x, t)[1 - \rho(x, t)] \quad (3.5)$$

La dynamique est toujours conservative puisque (3.4) est bien une équation de conservation, mais le courant peut fluctuer autour de sa valeur typique. Notons que ces fluctuations sont de variance $\frac{1}{L}$ et traduisent bien un effet sous-dominant dans la limite hydrodynamique.

En nous plaçant à un niveau macroscopique, nous avons pu échanger l'analyse d'un modèle microscopique compliqué contre celle d'une équation différentielle stochastique. Pour mener celle-ci à terme, nous pouvons à présent avoir recours à la machinerie de la théorie des champs. Une étude plus systématique d'équations stochastiques similaires sera présentée aux sections 5.1.1 et 5.2.1 ; par conséquent, nous présentons simplement ci-dessous une construction succincte du propagateur. L'équation (3.4) peut se récrire :

$$g(\rho, \eta) = 0 \quad g(\rho, \eta) = \dot{\rho} - \frac{1}{2}\Delta\rho - \nabla\eta \quad (3.6)$$

La probabilité P que le système passe d'une configuration ρ_1 au temps t_1 à une configuration ρ_2 au temps t_2 s'écrit [199, chap. 16] :

$$P \sim \int \mathcal{D}[g, \eta] \delta(g) P[\eta(x, t)] \quad (3.7)$$

$$\text{où} \quad P[\eta(x, t)] = e^{-L \int dt dx \frac{\eta^2}{2\sigma(\rho)}} \quad (3.8)$$

⁵Sur le plan microscopique, on peut considérer que l'on a « ajouté » des sites 0 et $L + 1$ avec des densités fixes ρ_0 et ρ_1 .

est la probabilité de la réalisation du bruit $\eta(t)$ et la fonction $\delta(g)$ impose simplement la réalisation des équations du mouvement. En inversant la relation entre g et ρ , on peut alors effectuer le changement de variable $g \rightarrow \rho$ dans l'intégrale précédente pour obtenir :

$$P \sim \int_{\substack{\rho(t_0)=\rho_0 \\ \rho(t_1)=\rho_1}} \mathcal{D}[\rho, \eta] \delta \left(\dot{\rho} - \frac{1}{2} \Delta \rho - \nabla \eta \right) F(\rho, \eta) e^{-L \int dt dx \frac{\eta^2}{2\sigma(\rho)}} \quad (3.9)$$

On ne tiendra pas compte dans la suite du Jacobien $F(\rho, \eta)$ car celui-ci est d'ordre sous-dominant en L ⁶. On peut alors utiliser la représentation de Fourier de la fonction δ en introduisant⁷ un champ imaginaire $\hat{\rho}$:

$$P \sim \int_{\substack{\rho(t_0)=\rho_0 \\ \rho(t_1)=\rho_1}} \mathcal{D}[\rho, \hat{\rho}, \eta] e^{-L \int dt dx \{ \hat{\rho} [\dot{\rho} - \frac{1}{2} \Delta \rho - \nabla \eta] \}} e^{-L \int dt dx \frac{\eta^2}{2\sigma(\rho)}} \quad (3.10)$$

Le bruit η est nul sur les sites au contact avec les réservoirs, on peut par conséquent intégrer par partie le terme en $\hat{\rho} \nabla \eta$ pour obtenir :

$$P \sim \int_{\substack{\rho(t_0)=\rho_0 \\ \rho(t_1)=\rho_1}} \mathcal{D}[\rho, \hat{\rho}, \eta] e^{-L \int dt dx \left\{ \hat{\rho} \left[\dot{\rho} - \frac{1}{2} \Delta \rho \right] + \frac{\eta^2(t)}{2\sigma(\rho)} + \eta \nabla \hat{\rho} \right\}} \quad (3.11)$$

L'intégration sur le bruit η est alors gaussienne et résulte en

$$P \sim \int_{\substack{\rho(t_0)=\rho_0 \\ \rho(t_1)=\rho_1}} \mathcal{D}[\rho, \hat{\rho}] e^{-L \int dt dx \left\{ \hat{\rho} \left[\dot{\rho} - \frac{1}{2} \Delta \rho - \frac{1}{2} \sigma(\rho) (\nabla \hat{\rho})^2 \right] \right\}} \quad (3.12)$$

Finalement, la probabilité d'une trajectoire prend la forme générale :

$$P \sim \int_{\substack{\rho(t_0)=\rho_0 \\ \rho(t_1)=\rho_1}} \mathcal{D}[\hat{\rho}, \rho] e^{-L S[\hat{\rho}, \rho]} = \int \mathcal{D}[\hat{\rho}, \rho] e^{-L \int dt dx \{ \hat{\rho} \dot{\rho} - \mathcal{H}[\rho, \hat{\rho}] \}} \quad (3.13)$$

où nous avons introduit la densité hamiltonienne

$$\mathcal{H}[\rho, \hat{\rho}] \equiv \frac{1}{2} \left[\sigma(\rho) \nabla \hat{\rho}^2 + \hat{\rho} \Delta \rho \right] \quad (3.14)$$

⁶ Le choix de l'ordre des opérateurs se traduit par une contribution d'ordre 1 et non d'ordre L . Pour plus de précisions à ce sujet, se référer aux sections 5.1.1 et 5.2.1.

⁷ Notons que nous avons moralement affaire à un produit sur l'ensemble des sites i du type $\prod_{i=1}^L \delta[\hat{\rho}_i + h(\rho_i)]$. On introduit alors L champs $\hat{\rho}_i(t)$ pour obtenir $\int \prod_i \mathcal{D}[\hat{\rho}_i] \left\{ \exp \left[\sum_{i=1}^L \int dt \hat{\rho}_i (\dot{\rho}_i + h(\rho_i)) \right] \right\}$. Par ailleurs, puisque la somme de Riemann $L^{-1} \sum_{i=1}^L r(\rho_i)$ converge vers $\int_0^1 r(\rho(x)) dx$, on remplace la somme dans l'exponentielle par L fois l'intégrale sur x , pour obtenir in fine $\int \mathcal{D}[\hat{\rho}] \exp \left[L \int dx dt \hat{\rho} (\dot{\rho} + h(\rho)) \right]$. Ceci explique la présence du préfacteur L dans (3.10).

Lorsque L est grand, cette probabilité est dominée par la trajectoire qui extrémalise l'action et satisfait donc les équations de Hamilton :

$$\begin{cases} \dot{\rho}(x) = \frac{\delta}{\delta \hat{\rho}(x)} \int dy \mathcal{H}[\rho(y), \hat{\rho}(y)] = \frac{1}{2} \Delta \rho(x) - \nabla(\sigma[\rho(x)] \nabla \hat{\rho}(x)) \\ \dot{\hat{\rho}}(x) = -\frac{\delta}{\delta \rho(x)} \int dy \mathcal{H}[\rho(y), \hat{\rho}(y)] = -\frac{1}{2} \Delta \hat{\rho}(x) + [2\rho(x) - 1] \frac{(\nabla \hat{\rho}(x))^2}{2} \end{cases} \quad (3.15)$$

soumises aux conditions aux limites spatio-temporelles :

$$\begin{aligned} \rho(x, t_1) &= \rho_1(x); & \rho(x, t_2) &= \rho_2(x) \\ \rho(0, t) &= \rho_0; & \rho(1, t) &= \rho_1; & \hat{\rho}(0, t) &= \hat{\rho}(1, t) = 0 \end{aligned} \quad (3.16)$$

La nullité de $\hat{\rho}$ aux bords traduit simplement le fait que les thermostats imposent *exactement* les densités aux bords dans la limite hydrodynamique. Finalement, notons que l'action est extrémale pour un champ $\hat{\rho}$ réel et non imaginaire. C'est un phénomène classique en théorie statistique des champs : on introduit des champs imaginaires pour représenter des fonctions δ de Dirac, mais le point de col qui domine l'intégrale correspondante est sur l'axe réel, hors du domaine d'intégration⁸.

Notons que la diffusion (3.2) est une solution particulière des équations du mouvement. Elle correspond à

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2} \Delta \rho \quad \hat{\rho} = 0 \quad (3.17)$$

dont l'action S est nulle et qui converge vers $\bar{\rho}$ aux temps longs. Ce type de trajectoire correspond à la limite de bruit nul de l'équation stochastique (3.4) et nous ferons parfois référence par la suite à ce type de solution sous le nom d'anti-instanton.

Finalement, les conditions aux bords sur $\hat{\rho}$ permettent d'intégrer par partie le dernier terme de l'action sans produire de termes de bords spatiaux supplémentaires et celle-ci peut donc prendre une forme équivalente :

$$S[\rho, \hat{\rho}] = \int dt dx \left\{ \hat{\rho} \dot{\rho} - \frac{1}{2} \sigma(\rho) (\nabla \hat{\rho})^2 + \frac{1}{2} \nabla \hat{\rho} \nabla \rho \right\} \quad (3.18)$$

3.3 Grandes déviations et instantons

Dans la limite hydrodynamique, la probabilité d'observer un profil $\rho^*(x)$ dans l'état stationnaire est de la forme :

$$P(\rho^*) \sim e^{-N\mathcal{F}[\rho^*(x)]} \quad (3.19)$$

et nous souhaitons calculer la fonction de grandes déviations \mathcal{F} . Celle-ci est donnée par l'action de l'instanton [199, chap. 39-41] : la trajectoire la plus probable parmi toutes celles qui démarrent au voisinage de l'état stationnaire et arrive à un grand temps⁹ T dans la

⁸On doit donc supposer que l'on peut déformer le contour d'intégration.

⁹et satisfait donc $\int \mathcal{H} dx = 0$ à tout temps.

configuration ρ^* . Le problème revient alors à trouver la solution des équations du mouvement (3.15) remplissant les conditions aux limites spatio-temporelles

$$\begin{aligned} \text{temporelles :} \quad & \rho(x, 0) = \bar{\rho}(x) \quad \rho(x, T) = \rho^*(x) \\ \text{spatiales :} \quad & \rho(0, t) = \rho_0 \quad \rho(1, t) = \rho_1 \quad \hat{\rho}(0, t) = \hat{\rho}(1, t) = 0 \end{aligned} \quad (3.20)$$

De manière alternative, on peut calculer l'action de l'instanton via le formalisme de Hamilton-Jacobi [82] comme le firent Bertini et al. [18].

3.4 Une stratégie pour calculer les grandes déviations

3.4.1 À l'équilibre

Remarquons tout d'abord que l'anti-instanton n'est pas la trajectoire que nous cherchons puisqu'elle relaxe vers $\bar{\rho}$ et ne satisfait donc pas les conditions aux limites *temporelles* (3.20). Une stratégie pour trouver une solution aux équations de Hamilton (3.15) est de faire un changement de variables qui transforme le problème original en un *autre* problème stochastique (i.e. dérivant d'une hydrodynamique fluctuante telle que (3.4)), tel que les solutions de bruit nul de ce nouveau problème remplissent les conditions aux limites spatio-temporelles. C'est une stratégie générale en ce sens qu'une telle transformation existe toujours. En effet, si l'on connaît la fonction de grandes déviations $\mathcal{F}(\rho)$, alors la transformation $\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho} + \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \rho}$ remplit les conditions ci-dessus¹⁰. Toutefois, on ne connaît en général pas la fonction de grandes déviations, puisque c'est l'objet que l'on souhaite calculer, et trouver le « bon » changement de variable n'a rien d'évident.

Pour une chaîne à l'équilibre, il existe une procédure simple qui utilise avantageusement la relation de bilan détaillé du Hamiltonien (3.14). Prenons par exemple le cas $\rho_0 = \rho_1$; la chaîne est alors en équilibre avec les réservoirs et l'instanton doit satisfaire les conditions aux limites

$$\begin{aligned} \text{temporelles :} \quad & \rho(x, 0) = \bar{\rho}(x); \quad \rho(x, T) = \rho^*(x) \\ \text{spatiales :} \quad & \rho(0, t) = \rho(1, t) = \rho_0; \quad \hat{\rho}(0, t) = \hat{\rho}(1, t) = 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Pour mettre la relation de bilan détaillé en évidence, on récrit \mathcal{H} sous la forme :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \nabla \hat{\rho} \sigma_\rho \nabla \left[\hat{\rho} - \log \frac{\rho}{1 - \rho} \right] = \frac{1}{2} \nabla \hat{\rho} \sigma_\rho \nabla \left[\hat{\rho} - \frac{\delta V_\rho}{\delta \rho} \right] \quad (3.22)$$

où
$$V_\rho = \int dx [\rho \log \rho + (1 - \rho) \log(1 - \rho)] \quad (3.23)$$

est l'entropie d'équilibre du système. La relation de bilan détaillé se traduit au niveau de

¹⁰L'action que l'on obtient via une telle transformation est celle de la *dynamique adjointe* [18] renversée dans le temps.

l'action¹¹ par l'invariance de cette dernière sous l'opération de renversement du temps [94] :

$$\hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho} + \log \frac{\rho}{1-\rho} = \hat{\rho} + \frac{\delta V_\rho}{\delta \rho}; \quad (\hat{\rho}, t) \rightarrow (-\hat{\rho}, T-t) \quad (3.24)$$

Puisque c'est la première fois que nous mentionnons cette symétrie, nous allons montrer explicitement comment l'utiliser. Cherchons une solution instantonique sous la forme :

$$\rho = \overleftarrow{\rho}(T-t) \quad \hat{\rho} = -\overleftarrow{\hat{\rho}}(T-t) + \log \frac{\overleftarrow{\rho}(T-t)}{1-\overleftarrow{\rho}(T-t)} \quad (3.25)$$

L'ansatz (3.25) transforme l'action (3.18) en

$$\begin{aligned} S[\rho, \hat{\rho}] &= - \int dx [\overleftarrow{\rho} \log \overleftarrow{\rho} + (1-\overleftarrow{\rho}) \log(1-\overleftarrow{\rho})]_0^T + \int dt dx \left\{ \overleftarrow{\dot{\rho}} \overleftarrow{\rho} - \frac{1}{2} \sigma(\overleftarrow{\rho}) (\nabla \overleftarrow{\rho})^2 + \frac{1}{2} \nabla \overleftarrow{\rho} \nabla \overleftarrow{\hat{\rho}} \right\} \\ &= \int dx [\rho \log \rho + (1-\rho) \log(1-\rho)]_0^T + S[\overleftarrow{\rho}, \overleftarrow{\hat{\rho}}] \end{aligned} \quad (3.26)$$

où nous avons utilisé $\rho(0) = \overleftarrow{\rho}(T)$ et $\rho(T) = \overleftarrow{\rho}(0)$. Les champs $\overleftarrow{\rho}$ et $\overleftarrow{\hat{\rho}}$ extrémisent donc la même action S que ρ et $\hat{\rho}$. Ainsi, on est amené à chercher une solution des équations du mouvement du modèle initial (3.15) qui satisfasse des conditions aux limites différentes :

$$\begin{aligned} \text{temporelles :} \quad & \overleftarrow{\rho}(x, 0) = \rho(x, T) = \rho^*(x) \quad \overleftarrow{\rho}(x, T) = \rho(x, 0) = \bar{\rho}(x) \\ \text{spatiales :} \quad & \overleftarrow{\rho}(0, t) = \overleftarrow{\rho}(1, t) = \rho_0 \quad \overleftarrow{\hat{\rho}}(0, t) = \overleftarrow{\hat{\rho}}(1, t) = \log \frac{\rho_0}{1-\rho_0} \end{aligned} \quad (3.27)$$

Or une telle solution est trivialement fournie par la limite de bruit nul :

$$\begin{aligned} \overleftarrow{\hat{\rho}}(x, t) &= \log \frac{\rho_0}{1-\rho_0} \implies \nabla \overleftarrow{\hat{\rho}} = 0 \\ \overleftarrow{\dot{\rho}} &= \frac{1}{2} \Delta \overleftarrow{\rho} \end{aligned} \quad (3.28)$$

$\overleftarrow{\rho}$ correspond donc à une relaxation diffusive de ρ^* vers $\bar{\rho}$ et $\rho(x, t)$ est l'image par renversement du temps de la diffusion de ρ^* vers $\bar{\rho}$. On vient en passant de redémontrer la symétrie d'Onsager-Machlup [148, 149] : dans un processus à l'équilibre, l'émergence d'une fluctuation est l'image par renversement du temps de sa relaxation.

La machinerie présentée ci-dessus est très générale et nous y aurons recours à plusieurs reprises par la suite. L'équation de l'instanton dans les variables originales peut être obtenue via (3.28) et (3.25) :

$$\dot{\rho} = -\frac{1}{2} \Delta \rho \quad (3.29)$$

Nous aurions pu l'obtenir directement, sans avoir recours à l'ansatz (3.25). En effet, si on effectue seulement la première partie de la transformation (3.24), la densité hamiltonienne devient :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &\rightarrow \tilde{\mathcal{H}} = \frac{1}{2} \nabla \hat{\rho} \sigma_\rho \nabla \left[\hat{\rho} + \frac{\delta V_\rho}{\delta \rho} \right] \\ S[\hat{\rho}, \rho] &\rightarrow [V_\rho]_0^T + \int dt dx \left\{ \hat{\rho} \dot{\rho} - \tilde{\mathcal{H}} \right\} \end{aligned} \quad (3.30)$$

¹¹Dans cette étude, nous utiliserons le bilan détaillé uniquement dans la limite « classique » de grand L . L'invariance de l'action sous (3.24) est la conséquence au niveau point de col du bilan détaillé au niveau opératoire : $H^\dagger = P_{eq}^{-1} H P_{eq}$, où H dénote l'opérateur d'évolution microscopique et P_{eq} la distribution d'équilibre.

Le nouvel Hamiltonien $\tilde{\mathcal{H}}$ correspond à un problème stochastique et les équations du mouvement associées à (3.30) admettent une solution de bruit nul, obtenue en annulant le premier terme de \mathcal{H} :

$$\nabla \hat{\rho} = 0 \implies \hat{\rho} = C^{st} \quad (3.31)$$

Dans les variables initiales, ceci se lit :

$$\dot{\rho} = -\frac{1}{2}\Delta\rho \quad \hat{\rho} = \log \frac{\rho}{1-\rho} + C^{st} \quad (3.32)$$

En prenant alors $C^{st} = -\log \frac{\rho_0}{1-\rho_0}$, on retrouve la solution instantonique. La deuxième partie de la transformation (3.24) montre que cette solution est la symétrique temporelle d'une trajectoire diffusive. Finalement, toute l'information était déjà présente dans la forme initiale de la densité hamiltonienne \mathcal{H} :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \nabla \hat{\rho} \sigma_\rho \nabla \left[\hat{\rho} - \frac{\delta V_\rho}{\delta \rho} \right] \quad (3.33)$$

La solution de bruit nul et l'instanton sont obtenus en annulant respectivement $\nabla \hat{\rho}$ et $\nabla \left[\hat{\rho} - \frac{\delta V_\rho}{\delta \rho} \right]$. Plutôt qu'avoir systématiquement recours à des ansatz du type (3.25), nous nous contenterons par la suite de reconnaître les équations dans la forme de \mathcal{H} . Il faut toutefois garder en tête que la construction explicite des instantons passe par l'ansatz complet.

3.4.2 Hors équilibre

Nous allons voir ci-dessous que la solution présentée pour la chaîne à l'équilibre ne s'étend pas au cas où les deux réservoirs n'imposent pas la même densité. En effet, la solution anti-diffusive ne vérifie pas les conditions aux limites dans le cas hors équilibre, ce qui rend la détermination de l'instanton non triviale.

Pour une chaîne en contact avec deux thermostats imposant des densités différentes en 0 et en 1, les conditions aux bords pour le champ $\overleftarrow{\hat{\rho}}$ sont données par (3.20) et (3.25) :

$$\overleftarrow{\hat{\rho}}(0) = \log \frac{\rho_0}{1-\rho_0} \quad \overleftarrow{\hat{\rho}}(1) = \log \frac{\rho_1}{1-\rho_1} \quad (3.34)$$

Or la trajectoire de bruit nul correspond à

$$\nabla \overleftarrow{\hat{\rho}} = 0 \quad \text{et donc à} \quad \overleftarrow{\hat{\rho}} = C^{st} \quad (3.35)$$

Les équations (3.34) et (3.35) étant clairement incompatibles, l'instanton n'est pas l'image par renversement du temps d'une relaxation diffusive. L'échec de cette stratégie traduit le fait que le système n'est pas à l'équilibre et ne satisfait donc pas le bilan détaillé. La nature de cet échec reflète par ailleurs la manière dont le système est mis hors d'équilibre : l'action (3.13) est bien invariante sous l'inversion temporelle (3.24), ce qui traduit le fait que la dynamique interne du SSEP est réversible, mais la solution anti-diffusive $\nabla \overleftarrow{\hat{\rho}} = 0$ ne remplit pas les conditions aux bords - ces dernières sont bien les responsables de la violation du bilan détaillé.

3.5 Une solution spécifique au SSEP

Nous allons à présent montrer comment construire une solution instantonique dans le cas du SSEP en contact avec deux réservoirs de potentiels chimiques distincts. La construction présentée dans la section 3.5.2 est équivalente à celle de Bertini et al. [18]. Elle n'est pas restreinte au seul cas du SSEP et peut aisément être généralisée à tous les modèles ayant un $\sigma(\rho)$ quadratique en ρ [19]. C'est, par exemple, le cas du modèle de transport d'énergie KMP [100].

3.5.1 Une profusion suspecte de bilans détaillés

Avant de présenter la solution du problème, remarquons dans un premier temps une propriété surprenante du modèle hydrodynamique (3.4). On peut récrire la densité hamiltonienne sous la forme :

$$\mathcal{H} = -\rho \frac{(\nabla \hat{\rho})^2}{2} \left[\rho - 1 - \frac{\Delta \hat{\rho}}{(\nabla \hat{\rho})^2} \right] = -\rho \frac{(\nabla \hat{\rho})^2}{2} \left[\rho - 1 - \frac{\delta V_{\hat{\rho}}}{\delta \hat{\rho}} \right] \quad (3.36)$$

où
$$V_{\hat{\rho}} = \int dx [\log \nabla \hat{\rho}] \quad (3.37)$$

et \mathcal{H} peut donc *formellement* être vu comme dérivant d'un autre problème stochastique :

$$\dot{\hat{\rho}} = -\frac{1}{2} \Delta \hat{\rho} - \frac{1}{2} (\nabla \hat{\rho})^2 + \eta \nabla \hat{\rho} \quad (3.38)$$

avec une nouvelle relation de bilan détaillé fournie par les deux transformations

$$\rho \rightarrow \rho + \frac{\delta V_{\hat{\rho}}}{\delta \hat{\rho}} \quad (\rho, t) \rightarrow (1 - \rho, T - t) \quad (3.39)$$

Comme nous l'avons expliqué à la section 3.4.1, deux classes de solutions peuvent être lues directement dans (3.36) :

$$\begin{aligned} \rho = 0 \quad \dot{\hat{\rho}} &= -\frac{1}{2} \Delta \hat{\rho} - \frac{1}{2} \nabla \hat{\rho}^2 \\ \rho - 1 &= \frac{\delta V_{\hat{\rho}}}{\delta \hat{\rho}} \quad \dot{\hat{\rho}} = \frac{1}{2} \Delta \hat{\rho} + \frac{1}{2} \nabla \hat{\rho}^2 \end{aligned} \quad (3.40)$$

Toutefois, aucune de ces solutions ne satisfait les conditions aux bords (3.20). L'existence de cette symétrie additionnelle, non locale puisque $V_{\hat{\rho}}$ implique le gradient de $\hat{\rho}$, est la signature de l'existence d'un modèle dual, comme nous le montrerons dans la section 3.6.5.

3.5.2 Une étonnante succession de changements de variables

Venons-en à présent à la solution proprement dite. Pour obtenir une notation aussi proche que possible de la solution exacte [58], récrivons la variable intermédiaire $\hat{\rho}$ apparaissant dans l'équation (3.30) en terme de la variable F définie par

$$F = (1 + e^{\hat{\rho}})^{-1} \quad (3.41)$$

Pour maintenir la structure hamiltonienne de l'action, on complète alors le changement de notation en introduisant \hat{F} , la variable conjuguée de F :

$$\hat{F} = \frac{\rho}{F(1-F)} \quad (3.42)$$

ce qui met l'action sous la forme :

$$\begin{aligned} S = \int dx \left[\rho \log \rho + (1-\rho) \log(1-\rho) + \rho \log \frac{1-F}{F} \right]_0^T \\ + \int dx dt \left\{ \hat{F} \dot{F} + \frac{1}{2} \hat{F} \nabla F^2 \left[\hat{F} - \frac{2}{1-F} \right] + \frac{1}{2} \nabla \hat{F} \nabla F \right\} \end{aligned} \quad (3.43)$$

Cette expression peut à nouveau être simplifiée en effectuant la translation

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F} + \frac{1}{1-F} \quad (3.44)$$

et l'on obtient alors :

$$\begin{aligned} S = \int dx \left[\rho \log \frac{\rho}{F} + (1-\rho) \log \frac{1-\rho}{1-F} \right]_0^T \\ + \int dx dt \left\{ \hat{F} \dot{F} + \frac{1}{2} \hat{F}^2 (\nabla F)^2 + \frac{1}{2} \nabla \hat{F} \nabla F \right\} \end{aligned} \quad (3.45)$$

La transformation des variables initiales $(\rho, \hat{\rho})$ vers le couple (F, \hat{F}) s'écrit

$$F = \frac{\rho}{\rho + (1-\rho)e^{\hat{\rho}}} \quad \hat{F} = (1-\rho)(e^{\hat{\rho}} - 1) - \rho(e^{-\hat{\rho}} - 1) \quad (3.46)$$

Les conditions aux limites spatiales (3.20) sont alors données par

$$F(0, t) = \rho_0 \quad F(1, t) = \rho_1 \quad \hat{F}(0, t) = \hat{F}(1, t) = 0 \quad (3.47)$$

tandis que les équations du mouvement sont :

$$\begin{aligned} \dot{F} &= \frac{1}{2} \Delta F - \hat{F} (\nabla F)^2 \\ \dot{\hat{F}} &= -\frac{1}{2} \Delta \hat{F} - \nabla \left[\hat{F}^2 \nabla F \right] \end{aligned} \quad (3.48)$$

Nous allons montrer que ces changements de variables nous ont à nouveau amenés vers la représentation d'une dynamique stochastique, dont nous allons étudier les trajectoires de bruit nul et les instantons, grâce à une relation de bilan détaillé. Modulo une intégration par partie, la dernière intégrale de l'action (3.45) est de la forme

$$\int dx dt \left\{ \hat{F} \dot{F} - \mathcal{H}_F \right\} \quad (3.49)$$

où la densité hamiltonienne \mathcal{H}_F s'écrit :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_F &= -\frac{1}{2} \hat{F} (\nabla F)^2 \left[\hat{F} - \frac{\Delta F}{(\nabla F)^2} \right] \\ &= -\frac{1}{2} \hat{F} (\nabla F)^2 \left[\hat{F} - \frac{\delta V_F}{\delta F(x)} \right] \end{aligned} \quad (3.50)$$

Ceci est très similaire à (3.36), mais avec

$$V_F \equiv \int dx \ln(\nabla F) \quad (3.51)$$

De manière surprenante, cette action dérive à nouveau d'une dynamique stochastique. Pour le voir, on peut introduire un champ η_F via une transformation de Hubbard-Stratonovich :

$$P \sim \int \mathcal{D}[F, \hat{F}, \eta_F] e^{-L \int dx dt \left\{ \hat{F}(\dot{F} - \frac{1}{2}\Delta F + \eta_F) - \frac{1}{2} \frac{\eta_F^2}{(\nabla F)^2} \right\}} \quad (3.52)$$

Cette action correspond bien à celle d'une dynamique stochastique, donnée par

$$\dot{F} = \frac{1}{2}\Delta F - \eta_F \quad (3.53)$$

où η_F représente un bruit blanc gaussien de variance

$$\langle \eta_F(x, t) \eta_F(x', t') \rangle = \delta(x - x') \delta(t - t') (\nabla F)^2 \quad (3.54)$$

De plus, la densité hamiltonienne \mathcal{H}_F définie dans (3.50) satisfait à nouveau une relation de bilan détaillé induite par la transformation *non locale* :

$$\hat{F} \rightarrow \hat{F} + \frac{\Delta F}{(\nabla F)^2} \quad (\hat{F}, t) \rightarrow (-\hat{F}, T - t) \quad (3.55)$$

Comme dans tous les exemples précédents, deux classes de solutions sont disponibles. Tout d'abord, les trajectoires de bruit nul correspondent à

$$\hat{F} = 0 \quad \dot{F} = \frac{1}{2}\Delta F \quad (3.56)$$

qui sont des trajectoires diffusives du système initial équivalentes à

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2}\Delta \rho \quad (3.57)$$

et ne satisfont pas les conditions aux limites temporelles (3.20). Ensuite, en imposant

$$\hat{F} = \frac{\delta V_F}{\delta F(x)} \quad (3.58)$$

on obtient les trajectoires de bruit nul de la dynamique renversée dans le temps. En injectant (3.58) dans les équations du mouvement (3.48), on trouve alors :

$$\dot{F} = -\frac{1}{2}\Delta F \quad \rho = F + F(1 - F) \frac{\Delta F}{\nabla F^2} \quad (3.59)$$

Cette équation admet une solution qui satisfait, de manière totalement inattendue, les conditions aux limites spatio-temporelles. Finalement, en injectant (3.59) dans l'action, on obtient alors la fonction de grandes déviations

$$\mathcal{F} = \int dx \left[\rho \log \frac{\rho}{F} + (1 - \rho) \log \frac{1 - \rho}{1 - F} + \log \nabla F \right]_0^T \quad (3.60)$$

À $t = 0$, $\rho = \bar{\rho}$ et l'on déduit donc de (3.59) la condition initiale $F(x, 0) = \bar{\rho}(x)$. La fonction de grandes déviations vaut ainsi

$$\mathcal{F}[\rho^*] = \int dx \left[\rho \log \frac{\rho}{F} + (1 - \rho) \log \frac{1 - \rho}{1 - F} + \log \frac{\nabla F}{\rho_1 - \rho_0} \right] \quad (3.61)$$

où F est la solution de
$$\rho^* = F + F(1 - F) \frac{\Delta F}{\nabla F^2} \quad (3.62)$$

3.6 Le modèle dual

La construction de l'instanton que nous avons présentée dans la section précédente apparaît comme une succession de changements de variables miraculeux, dont le dernier fournit la solution désirée. Dans cette partie, nous allons montrer que la multitude de relations de bilan détaillé violées par les conditions aux bords et l'existence d'une fonction de grandes déviations non locale ont une origine unique : l'action de la chaîne au contact avec deux réservoirs peut être transformée, au niveau des grandes déviations, dans celle d'une chaîne isolée.

3.6.1 Un changement de variables non local

Partant de l'action (3.45), on effectue le changement de variables *non local* :

$$\hat{F}' = \nabla F \quad \hat{F} = \nabla \left[F' - \frac{1}{\hat{F}'} \right] = \nabla F' + \frac{\nabla \hat{F}'}{\hat{F}'^2} \quad (3.63)$$

qui s'écrit également :

$$\begin{aligned} \int_0^x \hat{F}'(x') dx' &= F(x) - F(0) \\ \int_0^x \hat{F}(x') dx' &= F'(x) - F'(0) - \frac{1}{\hat{F}'(x)} + \frac{1}{\hat{F}'(0)} \end{aligned} \quad (3.64)$$

Celui-ci transforme l'action en

$$\begin{aligned} S &= \int dx \left[\rho \log \frac{\rho}{F} + (1 - \rho) \log \frac{1 - \rho}{1 - F} + \log \hat{F}' - F' \hat{F}' \right]_0^T \\ &+ \int dx dt \left\{ \hat{F}' \dot{F}' + \frac{1}{2} \hat{F}'^2 (\nabla F')^2 + \frac{1}{2} \nabla F' \nabla \hat{F}' \right\} \end{aligned} \quad (3.65)$$

À des termes de bord près, cette action est similaire pour les variables primées à (3.45) pour F et \hat{F} . Ceci suggère que nous complétons la transformation

$$(\rho, \hat{\rho}) \longrightarrow (F, \hat{F}) \xrightarrow{\text{non local}} (F', \hat{F}') \longrightarrow (\rho', \hat{\rho}') \quad (3.66)$$

où les relations entre $(\rho', \hat{\rho}')$ et (F', \hat{F}') sont de la même forme que (3.46). Explicitement :

$$\rho' = F' + \hat{F}' F' (1 - F') \quad \hat{\rho}' = \log \left(1 + \frac{\hat{F}'}{1 + F' \hat{F}'} \right) \quad (3.67)$$

L'effet de la transformation complète des variables initiales $(\rho, \hat{\rho})$ aux variables primées $(\rho', \hat{\rho}')$ sur l'action est alors :

$$S[\rho, \hat{\rho}] = \int dx \left[\rho \log \frac{\rho}{F} + (1 - \rho) \log \frac{1 - \rho}{1 - F} + \log \nabla F - \frac{\rho' - F'}{1 - F'} - \rho' \log \frac{\rho'}{F'} - (1 - \rho') \log \frac{1 - \rho'}{1 - F'} \right]_0^T + S[\rho', \hat{\rho}'] \quad (3.68)$$

où
$$S[\rho', \hat{\rho}'] = \int dt dx \{ \hat{\rho}' \rho' - \mathcal{H}[\rho', \hat{\rho}'] \} \quad \mathcal{H}[\rho', \hat{\rho}'] = \frac{1}{2} [\sigma_{\rho'} \nabla \hat{\rho}'^2 + \hat{\rho}' \Delta \rho'] \quad (3.69)$$

est formellement identique à l'action (3.13) pour les variables primées.

Le changement complet de variable (3.66), qui s'écrit :

$$\begin{aligned} \nabla \left[\frac{1}{1 - e^{\hat{\rho}'}} \right] &= e^{\hat{\rho}'} - 1 - \rho'(e^{\hat{\rho}'} + e^{-\hat{\rho}'} - 2) \\ \nabla \left[\frac{\rho}{\rho + (1 - \rho)e^{\hat{\rho}}} \right] &= e^{\hat{\rho}'} - 1 - \rho'(e^{\hat{\rho}'} + e^{-\hat{\rho}'} - 2) \end{aligned} \quad (3.70)$$

transforme ainsi l'action de la limite hydrodynamique du SSEP dans une action similaire. Nous allons à présent montrer que les conditions aux limites spatiales se transforment de telle manière que la chaîne duale soit isolée.

3.6.2 Les variables de spin

Avant de continuer, il est instructif d'introduire les variables de spin \mathbf{S}' :

$$S'_z = 2\rho' - 1 \quad S'_+ = 2(1 - \rho')e^{\hat{\rho}'} \quad S'_- = 2\rho'e^{-\hat{\rho}'} \quad (3.71)$$

Il s'agit de la connexion usuelle entre les chaînes de spin et les modèles de particules [73, 166] dans la limite hydrodynamique¹². La densité hamiltonienne correspond alors à

$$\mathcal{H}' = -\frac{1}{8} \nabla \mathbf{S}' \cdot \nabla \mathbf{S}' \quad (3.72)$$

Elle est invariante sous une rotation simultanée de tous les spins, ce qui signifie que les trois quantités

$$Q_1 = 2\rho' - 1 = S'_z \quad Q_2 = \hat{F}' = S'_z + iS'_y \quad Q_3 = \hat{F}'(1 - 2F') = S'_x - 1 \quad (3.73)$$

sont conservées par la dynamique au coeur du système. On peut donc définir trois courants correspondants

$$\begin{aligned} J_{\rho'} &= -\frac{1}{2} \nabla \rho' + \sigma_{\rho'} \nabla \hat{\rho}' & J_{\hat{F}'} &= \frac{1}{2} \nabla \hat{F}' + \hat{F}'^2 \nabla F' \\ J_{\hat{F}'(1-2F')} &= (1 - 2F') \frac{\nabla \hat{F}'}{2} + [\hat{F}' + \hat{F}'^2(1 - 2F')] \nabla F' \end{aligned} \quad (3.74)$$

tels que les équations d'évolutions des « charges » (3.73) prennent la forme d'équations de conservation :

$$\dot{Q}_i = -\nabla J_{Q_i} \quad (3.75)$$

¹²Pour une présentation dans un contexte similaire, se reporter à l'annexe E.

3.6.3 Conditions aux limites spatiales

Les conditions aux bords (3.20) se lisent pour les variables primées :

$$\nabla \left[F' - \frac{1}{\hat{F}'} \right]_{x=0,L} = 0 \quad \int_0^L \hat{F}' = \rho_l - \rho_0 \quad (3.76)$$

Notons que toutes les trajectoires qui satisfont à la fois les équations du mouvement (3.48) et les conditions aux bords, satisfont également

$$\Delta F(0) = \Delta F(1) = 0 \quad \text{et donc} \quad \nabla \hat{F}'(0) = \nabla \hat{F}'(1) = 0 \quad (3.77)$$

Finalement, (3.76) et (3.77) implique que $\nabla \hat{F}'$ et ∇F s'annulent sur les bords du système. Ainsi, les trois courants (3.74) sont également nuls et les charges totales

$$\int_0^1 Q_i(x) dx \quad (3.78)$$

sont conservées : *le modèle dual dans les variables primées est une chaîne isolée*. Notons que ceci a été rendu possible par la définition

$$\hat{F}' = \nabla F \quad (3.79)$$

En effet, on est alors passé de conditions « locales » $F(0) = \rho_0$ et $F(1) = \rho_1$ qui mettaient le système hors équilibre à une condition globale $\int \hat{F}' dx = \rho_1 - \rho_0$ qui impose la quantité totale de la charge Q_2 dans le système. Finalement, la nullité des courants et la valeur de la charge totale $\int \hat{F}'$ englobent toutes les conditions initiales du système original.

3.6.4 Transformation des trajectoires

Le système dual est donc une chaîne isolée, à l'équilibre microcanonique. Pour revenir aux problèmes des grandes déviations, il nous faut à présent comprendre comment se transforment les trajectoires du modèle initial.

Profil stationnaire : un point fixe de la trajectoire étant nécessairement envoyé sur un autre point fixe, le profil stationnaire $\bar{\rho}$ se transforme en un profil plat $\bar{\rho}'$. Notons toutefois que la valeur précise de $\bar{\rho}'$ n'est pas imposée lors du changement de variable : seule la charge totale $\int \hat{F}'$ l'est. Ainsi, on peut choisir arbitrairement une valeur du nombre total de particules et ajuster $\bar{\rho}'$ dans l'état stationnaire pour satisfaire la condition sur \hat{F}' .

Relaxations : les trajectoires diffusives du modèle initial correspondent à

$$\dot{\rho} = \frac{1}{2} \Delta \rho \quad \hat{\rho} = 0 \quad (3.80)$$

D'après le changement de variables (3.70), $\hat{\rho} = 0$ implique $\nabla \hat{\rho}' = 0$. Puisque les variables primées satisfont également les équations du mouvement (3.15), les trajectoires résultantes satisfont :

$$\dot{\rho}' = \frac{1}{2} \Delta \rho' \quad (3.81)$$

Les relaxations diffusives vers le profil stationnaire $\bar{\rho}$ correspondent ainsi à des relaxations diffusives du modèle dual vers le profil plat $\bar{\rho}'$.

Excursions : l'équation de l'instanton (3.59) se traduit par $\nabla F' = 0$ (cf. (3.63) et (3.67)). En utilisant la relation (3.46) pour les variables primées, ceci implique

$$\nabla \hat{\rho}' - \frac{\nabla \rho'}{\sigma_{\rho'}} = 0 \quad (3.82)$$

En utilisant de plus les équations du mouvement (3.15), cela montre que les densités évoluent avec

$$\dot{\rho}' = -\frac{1}{2}\Delta\rho' \quad (3.83)$$

Les excursions sont les images par renversement du temps de relaxations dans les variables primées. Ce n'est pas une surprise puisque la stratégie présentée à la section 3.4.1 pour les chaînes à l'équilibre peut s'appliquer au modèle dual. L'action $S[\hat{\rho}', \rho']$ d'une telle trajectoire ascendante est :

$$S[\hat{\rho}', \rho'] = \int_0^L dx [\rho' \log \rho' + (1 - \rho') \log(1 - \rho')]_0^T \quad (3.84)$$

et l'action totale résultante :

$$\begin{aligned} S[\rho, \hat{\rho}] = \int dx \left[\rho \log \frac{\rho}{F} + (1 - \rho) \log \frac{1 - \rho}{1 - F} + \log \nabla F \right. \\ \left. - \frac{\rho' - F'}{1 - F'} + \rho' \log F' + (1 - \rho') \log(1 - F') \right]_0^T \end{aligned} \quad (3.85)$$

De plus, l'équation de l'instanton étant donnée par $\nabla F' = 0$, F' est une constante qui peut être sortie de l'intégrale. En outre, la densité ρ' est l'une des trois charges conservées et $\int_0^L \rho'$ est une constante du mouvement. Ainsi, les termes du type

$$\int dx [\rho']_0^T \quad (3.86)$$

sont nécessairement nuls. Au final, les seuls termes qui survivent dans (3.85) sont ceux de la première ligne et l'on retrouve le résultat (3.60) :

$$S[\rho, \hat{\rho}] = \int dx \left[\rho \log \frac{\rho}{F} + (1 - \rho) \log \frac{1 - \rho}{1 - F} + \log \nabla F \right]_0^T \quad (3.87)$$

L'équation $\nabla F' = 0$ redonnant la définition de l'instanton

$$\rho = F + F(1 - F) \frac{\Delta F}{\nabla F^2} \quad (3.88)$$

on peut alors construire F connaissant le profil dont on cherche à calculer la probabilité.

3.6.5 L'origine des symétries

Montrons à présent que les nombreuses relations de bilan détaillé non locales dans le modèle initial sont dues à l'existence du modèle dual. L'action de la chaîne isolée est invariante

sous l'application simultanée à tous les spins d'une composition arbitraire d'une réflexion suivie d'un renversement du temps et d'une rotation. Ceci génère un groupe de symétries *locales* du modèle dual. Écrit en terme des variables originales, on obtient alors un groupe de transformations non locales de la chaîne hors équilibre.

Les conditions aux limites imposées par les réservoirs se traduisent pour la chaîne duale par une contrainte sur la charge totale :

$$\rho_1 - \rho_0 = \int_0^1 dx \hat{F}' = \int_0^1 dx \{S'_z + iS'_y\} \quad (3.89)$$

Les transformations du modèle dual qui ne conservent pas (3.89) correspondent par conséquent à des symétries du modèle initial brisées par les conditions aux limites spatiales. C'est par exemple le cas de (3.39). Si nous imposons de plus une conservation de (3.89), il ne reste alors qu'une seule transformation qui se lit dans les variables de spins du modèle dual :

$$(S'_x, S'_y, S'_z, t) \rightarrow (-S'_x, S'_y, S'_z, T - t) \quad (3.90)$$

En terme des variables non locales, elle correspond à la transformation (3.55) entre les solutions diffusives du modèle initial et les instantons.

3.7 Conclusion

Dans cette partie, nous avons reformulé la théorie des fluctuations macroscopiques en terme de calculs d'instanton. Nous avons montré comment la construction de Bertini et al. pouvait alors être suivie dans le cas du SSEP mis hors équilibre par les bords, en utilisant un formalisme hamiltonien. Nous avons ensuite englobé tous les « miracles » rencontrés lors de cette construction dans un unique changement de variables non local qui met en relation les grandes déviations du SSEP hors équilibre avec celles d'une chaîne à l'équilibre.

Bien que l'existence de cette correspondance puisse paraître paradoxale, tant les propriétés des systèmes hors équilibre diffèrent de celles des systèmes à l'équilibre (corrélation longue portée, asymétrie entre émergence et relaxation de fluctuations, etc.), la non localité du changement de variables explique ici l'asymétrie entre le modèle initial et le modèle dual. Notons qu'il serait intéressant de voir si l'on peut construire à partir des variables primées des quantités expérimentalement mesurables qui soient symétriques lors de l'émergence et de la relaxation de fluctuations rares.

La question de la généralité du traitement présenté ici reste entière. Celui-ci est applicable à tous les cas traités par Bertini et al. pour lesquels la fonction de grandes déviations n'est pas locale ($\sigma(\rho)$ quadratique). De plus, le « seul » ingrédient nécessaire est la possibilité de transformer le gradient d'une variable contrainte localement aux bords du système en une charge d'un modèle dual. Si de nombreux systèmes ne satisferont pas cette contrainte, je m'attends toutefois à ce que ce traitement ne se limite pas aux cas mentionnés dans ce travail. Les résultats de ce chapitre correspondent à la publication **P4**.

Troisième partie

**Chemins de réaction, topologie et
supersymétrie**

Chapitre 4

Introduction

La compréhension des processus menant à une transition entre deux états métastables est une question fondamentale dans de nombreux domaines impliquant des systèmes complexes. En biologie par exemple, les protéines sont des macromolécules, composées de chaînes d'acides aminés, dont la fonction biologique est fortement influencée par la conformation tridimensionnelle. Déterminer et comprendre cette dernière est donc un enjeu primordial de la biologie moléculaire. En particulier, les modifications de structure de certaines protéines peuvent avoir des conséquences drastiques sur la viabilité d'un organisme. Ainsi, aux mauvais repliements des protéines prions et amyloïdes sont associées respectivement les maladies de Creutzfeldt-Jakob [159] et d'Alzheimer [114, 168]. Pour comprendre ces évolutions conformationnelles, il est nécessaire de déterminer quels sont les chemins de transition entre les différentes configurations possibles. Cela est toutefois extrêmement difficile en raison de la diversité des échelles de temps impliquées. En effet, le repliement d'une protéine s'effectue sur des temps caractéristiques allant de quelques microsecondes à la milliseconde, tandis que les mouvements élémentaires des atomes qui la composent ont lieu sur des temps de l'ordre de la femtoseconde. Pour observer numériquement un tel repliement, il faudrait donc être capable de simuler 10 ordres de grandeurs temporels, ce qui est bien au-delà des capacités des ordinateurs actuels. Ce problème de séparation d'échelles de temps n'est pas l'apanage de la biologie et fait également obstacle à l'étude des mécanismes de transition en chimie ou dans la physique des phénomènes critiques. Tant en raison de la nécessité de comprendre ces mécanismes à un niveau fondamental que des nombreuses applications potentielles (médicales dans les exemples ci-dessus, mais également industrielles avec la compréhension plus fine des phénomènes catalytiques), la recherche de méthodes efficaces pour localiser les transitions et les analyser est un pan de la recherche extrêmement actif aujourd'hui, où se côtoient physiciens, chimistes, biologistes et informaticiens.

4.1 Méthodes numériques

Pour contourner le problème de l'apparente inaccessibilité numérique des chemins de transition, de nombreuses méthodes ont été proposées. Elles se répartissent essentiellement en deux grandes classes : les méthodes reposant sur des biais et celles basées sur un échantillonnage astucieux des trajectoires.

Dans la première catégorie se trouvent tout d'abord les dynamiques « accélérées ». On peut par exemple utiliser un potentiel artéfactuel, dont le seul but est de pousser le système hors des régions métastables [191], ou encore diminuer artificiellement la probabilité de revenir vers des régions déjà explorées [110]. Un autre type de stratégie consiste à localiser les points cols d'ordre 1 (en utilisant par exemple *eigenvector following*) et à utiliser une dynamique effective pour passer d'états en états [61, 133, 192] en construisant des chemins correspondant à des alternances entre cols et minima. On doit reconstruire ensuite les taux de transition à partir de la seule connaissance des points cols, via des approches de type Kramers¹ [108]. Ces méthodes ont le défaut d'être très éloignées de la dynamique du système étudié et de n'être vraiment précises que dans la limite de température nulle.

La deuxième classe de méthodes utilisées correspond aux échantillonnages de trajectoires : partant d'une trajectoire putative reliant deux états métastables, on l'ajuste pour la faire correspondre à une trajectoire « typique ». Une première difficulté rencontrée par ces méthodes est que la simulation d'une trajectoire nécessite au préalable sa discrétisation. Non seulement celle-ci est arbitraire, mais il faut de plus qu'elle résiste aux évolutions ultérieures de la trajectoire fictive. Par exemple, deux configurations successives ne doivent pas s'éloigner trop fortement. En outre, si la trajectoire devient très chaotique et varie sur des distances petites devant la taille typique de discrétisation, ces méthodes sont vouées à l'échec. Elles connaissent toutefois aujourd'hui un succès mérité, car elles ont permis de réels progrès par rapport aux méthodes décrites précédemment.

Un premier exemple de ce type de méthodes consiste à relier les « éléments » successifs de la trajectoire par des ressorts (*Nudged Elastic Band* [97]) qui en assurent ainsi la cohésion. Si cette méthode est efficace à très basse température, elle est peu précise à température finie et dépend fortement de la manière dont la force de rappel est choisie. Une autre alternative, qui semble très fructueuse, est de garder une distance fixe entre différents maillons [62]. Notons que des alternatives ont été proposées pour travailler à température finie [63], en utilisant plusieurs répliques de la trajectoire. Finalement, notons que même si l'on arrive à trouver une trajectoire de passage typique, celle-ci ressemblera à la trajectoire présentée sur la figure 4.1 : le passage est très mal échantillonné parce que la majeure partie de la trajectoire correspond à des oscillations dans les états métastables. Une alternative à ce problème fut proposée par le groupe de David Chandler [28, 51] : on échantillonne des trajectoires courtes dont les

¹La formule de Kramers donne une correction à la loi d'Arrhenius fondée sur la seule connaissance de la courbure du potentiel au niveau du minimum et du point col. Bien que vieille de plus de 60 ans, elle reste d'une étonnante précision. Voir [93] pour une revue des développements les plus récents dans ce domaine.

extrémités sont contraintes à être dans deux états métastables distincts. Cette contrainte induit un biais sur l'échantillonnage que l'on compense via des méthodes statistiques (*Umbrella sampling*, intégration thermodynamique, etc...).

Au cours de ce travail, nous nous sommes intéressés à une méthode alternative qui consiste à définir de nouveaux objets physiques, qui contiennent naturellement l'information pertinente, puis à proposer une manière de les évaluer. Cette stratégie repose sur une approche opératoire des dynamiques stochastiques, que nous introduisons ci-dessous.

4.2 Hamiltonien de Fokker-Planck

Un exemple topique de séparation d'échelles de temps est fourni par un système hamiltonien en contact avec un bain thermique de température T :

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{p} \quad \dot{\mathbf{p}} = -\nabla V(\mathbf{q}) - \gamma \mathbf{p} + \sqrt{2\gamma T} \boldsymbol{\eta} \quad (4.1)$$

où \mathbf{q} et \mathbf{p} représentent les vecteurs position et impulsion du système, V son énergie potentielle, γ est un coefficient de friction qui assure le couplage au bain et $\boldsymbol{\eta}$ un bruit blanc gaussien. Si l'énergie thermique kT est très faible devant la hauteur typique ΔV des barrières de potentiel, le système oscille la plupart du temps près des minima de V et subit des transitions induites par le bruit sur des échelles de temps de l'ordre de $\exp\left(\frac{\Delta E}{kT}\right)$ (Loi d'Arrhenius). Notons que ce temps caractérise l'intervalle entre deux transitions et non leur durée. Celles-ci ont en effet lieu sur des temps d'ordre 1 et c'est leur rareté qui rend le passage difficile (figure 4.1).

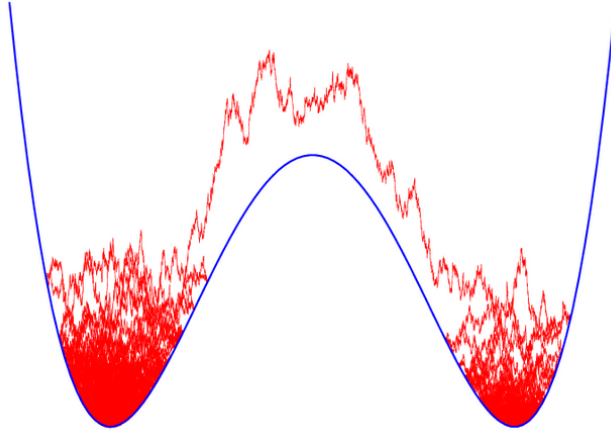


Fig. 4.1 : Exemple d'une trajectoire de passage dans un système de type (4.1) où $kT \sim 10\% \Delta E$. Le système reste sur un temps très long près des minima et le passage est réalisé par une trajectoire brève, mais rare.

La séparation des échelles de temps est dans ce cas liée à la faible température du bain. Toutefois, en haute dimension ou pour des géométries particulières de l'espace des configurations, son origine est souvent entropique. C'est, par exemple, le cas lorsque le passage requiert un phénomène de nucléation [113].

Pour simplifier le problème, tout en conservant son essence, considérons dans un premier temps la limite de grande friction² de la dynamique (4.1) :

$$\dot{\mathbf{q}} = -\nabla V(\mathbf{q}) + \sqrt{2T}\tilde{\eta} \quad (4.2)$$

Lorsque kT est petit devant les barrières typiques ΔV , on retrouve les propriétés de séparation d'échelles de temps décrites précédemment. L'évolution d'une densité de probabilité $P(\mathbf{q}, t)$ sur l'espace des configurations est donnée par l'équation de Fokker-Planck [75, 158] :

$$\frac{\partial P(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = -H_{FP}P(\mathbf{q}, t) \quad H_{FP} = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial q_i} \left(T \frac{\partial}{\partial q_i} + \frac{\partial V}{\partial q_i} \right) \quad (4.3)$$

L'organisation en états métastables peut être lue directement dans le spectre de H_{FP} . En effet, considérons l'ensemble des vecteurs propres $\psi_i(q)$ de H_{FP} , dont on note λ_i les valeurs propres. Toute distribution de probabilité P se décompose sur la base des ψ_i :

$$P(\mathbf{q}, 0) = \sum_i \alpha_i \psi_i(\mathbf{q}) \quad P(\mathbf{q}, t) = \sum_i \alpha_i e^{-\lambda_i t} \psi_i(\mathbf{q}) \quad (4.4)$$

L'évolution temporelle de P est donc encodée dans les valeurs propres λ_i . Entre autres, la séparation d'échelles de temps se lit comme un trou spectral dans leur distribution³ :

- les relaxations dans les états métastables sur des temps courts t_s correspondent à des valeurs propres d'ordre 1 en T , ne s'annulant donc pas dans la limite de faible température,
- les transitions entre états métastables ont lieu sur des temps longs t_l , et les états correspondants ont des valeurs propres d'ordre $t_l^{-1} \sim e^{-\frac{1}{T}}$, qui sont nulles au premier ordre en T .

La partie basse du spectre de H_{FP} contenant l'information pertinente aux temps longs, il est naturel d'y chercher une définition rigoureuse des états métastables. Les états propres de faible valeur propre⁴ ρ_i n'ont a priori aucune raison d'être positifs et ne peuvent donc jouer le rôle de densité de probabilité. Toutefois, on peut associer à chaque état métastable une combinaison linéaire des ρ_i , positive et centrée sur cet état [1, 32–34, 78]. Notons que la dégénérescence des ρ_i à l'ordre dominant en T est levée par les probabilités de transition entre ceux-ci (c'est l'analogie de l'effet tunnel en mécanique quantique). Pour déterminer les taux de réaction, il « suffit » donc de connaître les plus faibles valeurs propres de H_{FP} . Toutefois, évaluer ces dernières repose sur des calculs compliqués d'instanton, qu'en général on ne sait pas faire. De plus, la diagonalisation numérique de H_{FP} , même partielle, est aussi difficile que la simulation directe des chemins de réaction, puisque toute l'information pertinente

²On l'obtient en effectuant un changement d'échelle sur le temps $t \rightarrow \gamma t$, et en redéfinissant le bruit $\sqrt{\gamma}\eta \rightarrow \tilde{\eta}$, on peut alors lire la limite $\gamma \rightarrow \infty$ sur l'équation (4.1).

³Si l'on peut montrer que le Hamiltonien (4.3) a des valeurs propres réelles, ce n'est en général pas le cas. C'est alors un trou spectral dans les parties réelles des λ_i qui traduit la séparation d'échelles de temps.

⁴Dans la suite on parlera indifféremment d'états « en dessous du trou spectral », de « faible valeur propre » ou de « valeur propre nulle au premier ordre en T », même quand il s'agira de gap dans les parties réelles.

pour les transitions est contenue dans des régions où les ρ_i sont exponentiellement petits. Finalement, puisque ces états sont de basse valeur propre, on pourrait penser qu'il suffit de simuler les équations stochastiques pendant un temps suffisamment long pour en obtenir des combinaisons linéaires. Toutefois, parmi ces états figure la distribution de Gibbs $\exp[-\beta V(x)]$, qui est de valeur propre nulle et ne contient par définition aucune information dynamique. Celle-ci « écrante » les états intéressants, rendant hasardeuse leur détermination directe.

Pour calculer les taux de réaction, il serait donc utile de pouvoir projeter le spectre sur le sous-espace orthogonal au fondamental. C'est un des intérêts du formalisme supersymétrique présenté dans cette thèse. Un premier pas dans ce sens fut réalisé par Bernstein et Brown [17] qui montrèrent que l'on peut construire un opérateur H_{FP}^1 , dont le spectre est le même que celui de H_{FP} , sans le fondamental. Ce travail est issu d'une série d'articles, qui firent, au début des années 80, le lien entre la mécanique quantique supersymétrique et l'opérateur de Fokker-Planck [40, 140–142, 152]. L'idée générale est que l'on peut généraliser le Hamiltonien H_{FP} , via l'introduction de variables fermioniques, en un Hamiltonien supersymétrique H . Parallèlement, Witten [196] démontra que le spectre du Hamiltonien supersymétrique a une forte connexion topologique. Finalement, en effectuant un changement de base astucieux par rapport à l'approche de Witten, Tănase-Nicola et Kurchan [186] montrèrent que l'extension supersymétrique H encode dans ses états propres toutes les structures géométriques pertinentes pour l'étude des chemins de transition du cas purement dissipatif (4.2). Ils en déduisirent entre autres une procédure numérique permettant de localiser ces derniers.

4.3 Approche supersymétrique de l'équation de Kramers

Le pendant opératoire de la dynamique de Kramers (4.1) s'écrit :

$$\frac{\partial P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} = \left[\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\gamma^T \frac{\partial}{\partial p_i} + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) - \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right] P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = -H_K P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad (4.5)$$

Comme dans le cas purement dissipatif, le Hamiltonien H_K peut être généralisé en un opérateur supersymétrique H , vivant dans un espace de Hilbert plus large. Cette construction est l'objet de la section 5. On montre entre autres que la restriction de H à des fonctions d'onde sans fermion redonne l'équation de Kramers (4.1). Il est ensuite naturel de s'interroger sur le sens des autres secteurs fermioniques. Une manière constructive et non rigoureuse de décrire les fonctions d'onde à $k > 0$ fermions est de trouver une dynamique stochastique correspondant à l'évolution induite par H dans le secteur à k fermions, et d'identifier ses structures stables. Nous suivons une telle démarche dans la section 6 et montrons que les fonctions à k fermions se localisent aux temps longs sur les variétés instables des points cols à k directions instables.

Comme nous l'avons souligné précédemment, une grande part de la motivation de ce travail vient de son application potentielle à la physico-chimie. Dans la section 6.2, nous montrons la relation entre les fonctions d'onde à 1 fermion et les courants de réaction. De manière

surprenante, le formalisme nous suggère d'étudier un courant « réduit », qui ne contient que la partie du courant de probabilité responsable de la transition, débarrassée des circulations d'équilibre à l'intérieur des états métastables.

La section 7 traite ensuite des relations entre la supersymétrie de l'équation de Kramers et la topologie de l'espace des phases. Finalement, nous montrons dans la section 7.4 que le formalisme s'étend naturellement au cas d'un Hamiltonien dépendant périodiquement du temps.

Chapitre 5

Supersymétrie et équation de Kramers

Cette section se veut une introduction aussi simple que possible à la supersymétrie. Introduite dans les années 70 [194] dans le contexte des théories relativistes des champs comme une symétrie couplant des degrés de libertés fermioniques et bosoniques, la supersymétrie a des applications qui vont bien au-delà du cadre de cette thèse. Nous nous contentons ici de faire une présentation minimale mais aussi complète que possible des éléments nécessaires à la compréhension du travail présenté ici.

Dans un premier temps, nous commençons par étudier le cas d'un système purement dissipatif en contact avec un bain thermique. Cela nous permet d'introduire le formalisme supersymétrique dans un cadre relativement simple, avant de le généraliser au système de Kramers.

5.1 Dynamique de Langevin et intégrales de chemin

Considérons un système purement dissipatif possédant N degrés de liberté x_i soumis à un potentiel $V(\mathbf{x})$:

$$\dot{x}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i} + \eta_i \quad (5.1)$$

Les η_i sont des bruits blancs gaussiens de variance $2T$:

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = 2T \delta_{ij} \delta(t - t') \quad (5.2)$$

qui résultent du couplage avec un bain thermique à la température T . Si les équations du mouvement (5.1) donnent une image claire de la dynamique du système étudié, il est nécessaire de changer l'angle d'approche dès lors que l'on souhaite caractériser ses propriétés physiques – c'est-à-dire à calculer des moyennes d'observables. Une alternative est fournie par l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial P(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -H_{FP}P(\mathbf{x}, t) \quad H_{FP} = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \left(T \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) \quad (5.3)$$

qui donne l'évolution de la densité de probabilité dans l'espace des configurations. Ce type d'équation est très proche de l'équation de Schrödinger¹ et il est donc naturel d'utiliser l'arsenal usuel de la mécanique quantique. Dès lors que la résolution explicite de l'équation (5.3) n'est pas possible, on dispose grâce aux intégrales de chemin [70] d'un formalisme puissant à l'origine de nombreux outils de la physique théorique moderne (développements perturbatifs, renormalisation, instantons...). Si une large partie des résultats présentés dans ce travail repose sur une étude des opérateurs de type (5.3), nous nous servons néanmoins fréquemment du formalisme d'intégrales de chemin. Il fournit en particulier une manière naturelle d'introduire la supersymétrie que nous allons présenter dans ce chapitre.

5.1.1 Propagateur

Construisons tout d'abord une représentation fonctionnelle du propagateur. La probabilité que le système parte d'un point x_0 au temps 0 et arrive en un point x_T au temps T est, par définition, la somme des probabilités de toutes les trajectoires, solutions de l'équation (5.1), qui satisfont ces conditions aux limites. Par ailleurs, une telle trajectoire est entièrement définie par son point initial x_0 et la réalisation du bruit $\eta(t)$ pour $t \in [0, T]$. C'est donc la probabilité de η qui détermine celle de la trajectoire. En terme d'intégrales de chemin, ceci s'écrit :

$$P(\mathbf{x}_T, T | \mathbf{x}_0, 0) \sim \int_{\substack{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}_T}} \mathcal{D}[\boldsymbol{\eta}(t)] \mathcal{P}[\boldsymbol{\eta}(t)] \quad (5.4)$$

où
$$\mathcal{P}[\boldsymbol{\eta}(t)] = e^{-\frac{1}{2} \sum_i \int_0^T dt \frac{\eta_i(t)^2}{2T}} \quad (5.5)$$

est la probabilité de la réalisation $\boldsymbol{\eta}(t)$. En utilisant l'équation du mouvement (5.1), on peut effectuer un changement de variable des η_i vers les x_i . En notant $J(\mathbf{x})$ le Jacobien correspondant, sur lequel on reviendra à la fin de cette section, le propagateur s'écrit :

$$P(\mathbf{x}_T, T | \mathbf{x}_0, 0) \sim \int_{\substack{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}_T}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] J(\mathbf{x}) e^{-\frac{1}{4T} \int_0^T dt \sum_i \left(\dot{x}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right)^2} \quad (5.6)$$

En effectuant une transformation de Hubbard-Stratonovich, on introduit un champ conjugué imaginaire² $\hat{\mathbf{x}}$ tel que

$$P(\mathbf{x}_T, T | \mathbf{x}_0, 0) \sim \int_{\substack{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}_T}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t), \hat{\mathbf{x}}(t)] J(\mathbf{x}) e^{\int_0^T dt \left\{ \sum_i \hat{x}_i \left(\dot{x}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) + T \hat{x}_i^2 \right\}} \quad (5.7)$$

¹en temps imaginaire et à un changement de base près.

²Si les champs \hat{x} sont imaginaires, les points de col de l'action correspondent en général à des \hat{x} réels, et on « oublie » donc le préfacteur i .

L'intégrale dans l'exposant est de la forme :

$$S[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}] = \int_0^T dt \{ \hat{\mathbf{x}} \cdot \dot{\mathbf{x}} - \mathcal{H}[\hat{\mathbf{x}}, \mathbf{x}] \} \quad \mathcal{H}[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}] = - \sum_{i=1}^N \hat{x}_i \left(T \dot{x}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) \quad (5.8)$$

Notons qu'en substituant \hat{x}_i par $\frac{\partial}{\partial x_i}$, on « reconnaît » l'Hamiltonien de Fokker-Planck ³ (5.3) correspondant à la dynamique (5.1).

Pour déterminer le Jacobien $J(\mathbf{x})$, on doit lever une ambiguïté liée à la définition des équations du mouvement (5.1). En effet, la construction de l'intégrale de chemin repose sur leur discrétisation temporelle qui est a priori mal définie. Si l'on considère un intervalle de temps infinitésimal δt , l'équation (5.1) intégrée entre $t = n\delta t$ et $t + \delta t = (n+1)\delta t$ s'écrit au premier ordre⁴ :

$$x_i(n+1) = x_i(n) - \delta t \left. \frac{\partial V}{\partial x_i} \right|_{\mathbf{x}=\mathbf{x}^*} + \tilde{\eta}_i(n+1) \quad (5.9)$$

où $\tilde{\eta}$ est un bruit blanc gaussien de variance $2T \delta t$. Pour effectuer le changement de variables dans l'intégrale de chemin, on doit calculer le Jacobien $J_{n+1} = \det \left(\frac{\partial \tilde{\eta}_i(n+1)}{\partial x_j(n+1)} \right)$. Or celui-ci dépend d'où est évalué \mathbf{x}^* entre $\mathbf{x}(n)$ et $\mathbf{x}(n+1)$. Une première convention, dite de Itô, est de prendre $\mathbf{x}^* = \mathbf{x}(n)$. Le Jacobien est dans ce cas simplement égal à 1. Nous adopterons ici la convention de Stratonovich, qui consiste à prendre $\mathbf{x}^* = \frac{1}{2}[\mathbf{x}(n) + \mathbf{x}(n+1)]$ ⁵. Le Jacobien est alors donné par $\det \left(\delta_{ij} + \frac{1}{2} \delta t \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)$. En utilisant la relation $\log \det = \text{Tr} \log$, on obtient :

$$J_{n+1} = \det \left(\delta_{ij} + \frac{1}{2} \delta t \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right) = \exp \left(\frac{1}{2} \sum_i \delta t \frac{\partial^2 V}{\partial x_i^2} \right) \quad (5.10)$$

Le Jacobien total $J = \prod_n J_n$ s'écrit finalement :

$$J = \exp \left(\frac{1}{2} \sum_i \int dt \frac{\partial^2 V}{\partial x_i^2} \right) \quad (5.11)$$

et le propagateur (5.7) :

$$P(\mathbf{x}_T, T | \mathbf{x}_0, 0) \sim \int_{\substack{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}_T}} \mathcal{D}[\mathbf{x}(t)] e^{S_{FP}[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}]} \quad (5.12)$$

où l'on a défini l'action :

$$S_{FP}[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}] = \int_0^T dt \sum_{i=1}^N \left\{ \hat{x}_i \dot{x}_i + \hat{x}_i \left(T \dot{x}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_i^2} \right\} \quad (5.13)$$

³En toute rigueur, pour reconstruire H_{FP} à partir de l'action, il faut évidemment tenir compte du Jacobien $J(\mathbf{x})$.

⁴Voir [175] pour une présentation pédagogique et détaillée.

⁵La terminologie Itô/Stratonovich est généralement utilisée, lorsque l'on parle de bruit multiplicatif, pour savoir où est évalué le préfacteur du bruit. Par distinction, la convention $\mathbf{x}^* = \frac{1}{2}[\mathbf{x}(n) + \mathbf{x}(n+1)]$ est parfois nommée « règle de quantification de Wigner » [199]

5.1.2 Représentation supersymétrique

5.1.2.1 Déterminant et variables de Grassman

Il existe une manière alternative de représenter le déterminant $J(x)$, qui conduit naturellement à la supersymétrie. Plutôt qu'utiliser à nouveau une discrétisation de la dynamique, nous suivons ici une approche différente pour calculer l'action (5.12), en restant au niveau de la théorie des champs [199]. Les équations du mouvement (5.1) peuvent se mettre sous la forme :

$$\mathbf{g}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = 0 \quad \text{où} \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}) = \dot{\mathbf{x}} + \nabla V(\mathbf{x}) - \boldsymbol{\eta} \quad (5.14)$$

La probabilité des trajectoires s'écrit alors :

$$P(\mathbf{x}_T, T | \mathbf{x}_0, 0) \sim \int_{\substack{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}_T}} \mathcal{D}[\mathbf{g}, \boldsymbol{\eta}] \delta(\mathbf{g}) e^{-\frac{1}{4T} \int_0^T dt \sum_{i=1}^N \eta_i^2} \quad (5.15)$$

La fonction $\delta(\mathbf{g})$ impose la stricte réalisation des équations du mouvement tandis que le poids exponentiel donne la probabilité de la trajectoire correspondante. En inversant la relation $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = 0$, on obtient ainsi une expression $\mathbf{x}(\mathbf{g})$. On peut ensuite effectuer le changement de variable pour obtenir :

$$P(\mathbf{x}_T, T | \mathbf{x}_0, 0) \sim \int_{\substack{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}_T}} \mathcal{D}[\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta}] \delta[\mathbf{g}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta})] \tilde{J}(\mathbf{x}) e^{-\frac{1}{4T} \int_0^T dt \sum_{i=1}^N \eta_i^2} \quad (5.16)$$

où $\tilde{J}(\mathbf{x})$ est le Jacobien fonctionnel $\det \left(\frac{\delta \mathbf{g}}{\delta \mathbf{x}} \right) = \left(\frac{d}{dt} + \nabla^2 V \right)^6$.

Notons ici que le déterminant d'une matrice M de taille N peut se calculer via l'égalité

$$\det M = \int \prod_i d\theta_i d\bar{\theta}_i e^{-\sum_{i,j} \bar{\theta}_i M_{ij} \theta_j} \quad (5.17)$$

où les $\theta_1, \dots, \theta_N$ et $\bar{\theta}_1, \dots, \bar{\theta}_N$ sont des variables de Grassman⁷. Cette formule se généralise directement à des champs $\theta_i(t)$, $\bar{\theta}_j(t)$. Ainsi, en introduisant $\theta_1(t) \dots \theta_N(t)$, $\bar{\theta}_1(t) \dots \bar{\theta}_N(t)$, le Jacobien $\tilde{J}(\mathbf{x})$ se met sous la forme :

$$\tilde{J}(\mathbf{x}) = \int \mathcal{D}[\boldsymbol{\theta}, \bar{\boldsymbol{\theta}}] e^{-\int_0^T dt \left\{ \sum_{i,j} \bar{\theta}_i(t) \left(\delta_{i,j} \frac{d}{dt} + \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right) \theta_j \right\}} \quad (5.18)$$

Par ailleurs, en utilisant sa représentation de Fourier, la fonction $\delta[\mathbf{g}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta})]$ peut se réécrire grâce à un champ conjugué $\hat{\mathbf{x}}(t)$:

$$\delta[\mathbf{g}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\eta})] = \int \mathcal{D}[\hat{\mathbf{x}}] e^{\sum_i \hat{x}_i \left(\dot{x}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} - \eta_i \right)} \quad (5.19)$$

⁶Cette formule est équivalente à une prescription de type Stratonovich.

⁷Les variables θ_i et 1 forment une algèbre dont le produit est antisymétrique : $\theta_i \theta_j + \theta_j \theta_i = 0$. Les variables conjuguées $\bar{\theta}_i$ correspondent aux dérivations $\bar{\theta}_i \equiv \frac{\partial}{\partial \theta_i}$ et l'on a donc les deux autres relations $\bar{\theta}_i \bar{\theta}_j + \bar{\theta}_j \bar{\theta}_i = 0$ et $\theta_i \bar{\theta}_j + \bar{\theta}_j \theta_i = \delta_{i,j}$. C'est tout ce qu'il est nécessaire de connaître sur les variables de Grassman pour mener à bien les calculs présentés ici.

En mettant ensemble (5.16), (5.18) et (5.19), puis en effectuant l'intégrale gaussienne sur les η_i , on trouve :

$$P(\mathbf{x}_T, T | \mathbf{x}_0, 0) \sim \int_{\substack{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0 \\ \mathbf{x}(T)=\mathbf{x}_T}} \mathcal{D}[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\theta}, \hat{\boldsymbol{\theta}}] e^{S[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\theta}, \hat{\boldsymbol{\theta}}]} \quad (5.20)$$

où l'on a défini l'action :

$$S[\mathbf{x}, \hat{\mathbf{x}}, \boldsymbol{\theta}, \hat{\boldsymbol{\theta}}] = \int_0^T dt \sum_{i=1}^N \left\{ \hat{x}_i \dot{x}_i + \hat{x}_i \left(T \dot{x}_i + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) - \bar{\theta}_i \dot{\theta}_i - \bar{\theta}_i \sum_{j=1}^N \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \theta_j \right\} \quad (5.21)$$

Cette action possède des symétries qui mélangent les degrés de libertés fermioniques (i.e. correspondant aux variables de Grassman) et bosoniques. Elles furent découvertes pour la première fois par Becchi, Rouet et Stora (BRS) [8, 9] et la supersymétrie que nous présentons ci-dessous est une conséquence de leur existence.

5.1.2.2 Opérateur généralisé

Notons que pour retrouver l'action (5.12) à partir de (5.21), on doit intégrer sur les degrés de liberté fermioniques. Toutefois, il est naturel de s'interroger de manière plus générale sur ce que représente l'action (5.21) *avant* intégration sur les $\boldsymbol{\theta}, \bar{\boldsymbol{\theta}}$. De la même manière qu'au Hamiltonien de Fokker-Planck (5.3) correspond l'action (5.12), il existe en effet un pendant opératoriel de l'action (5.21).

Pour construire celui-ci, commençons par définir un espace de Hilbert \mathbb{H} dans lequel vivent les fonctions d'onde correspondantes. La représentation opératorielle des variables de Grassman se fait via l'introduction de $2N$ opérateurs de création et annihilation fermioniques a_i^\dagger, a_j satisfaisant les règles d'anticommutation suivantes :

$$\forall (i, j) \in \{1 \dots N\}^2 \quad a_i a_j + a_j a_i = 0 \quad a_i^\dagger a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i^\dagger = 0 \quad a_i^\dagger a_j + a_j a_i^\dagger = \delta_{i,j} \quad (5.22)$$

Suivant la notation usuelle de la mécanique quantique [112], les opérateurs a_i^\dagger créent un fermion dans l'état i , et les opérateurs a_i en détruisent un. En partant d'un état de référence $|-\rangle$ ne contenant aucun fermion

$$\forall i \in \{1, \dots, N\} \quad a_i |-\rangle = 0 \quad \langle - | a_i^\dagger = 0 \quad (5.23)$$

on peut construire un espace de Fock fermionique \mathbb{F} , dont les fonctions d'onde sont de la forme :

$$|a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_k}^\dagger\rangle = a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_k}^\dagger |-\rangle \quad (5.24)$$

On munit cet espace d'une structure d'espace de Hilbert via le produit scalaire

$$\langle a_i | a_j^\dagger \rangle = \delta_{ij} \quad (5.25)$$

Par ailleurs, l'espace de Hilbert associé au Hamiltonien de Fokker-Planck (5.3) correspond à l'espace L^2 des fonctions de carré intégrable, définies sur l'espace des configurations. On note

$|\psi\rangle$ les fonctions d'onde qui le composent, que nous identifions par la suite à leur représentation $\langle \mathbf{x}|\psi\rangle = \psi(\mathbf{x})$. Le produit scalaire sur L^2 est défini de la manière usuelle :

$$\langle \psi|\chi\rangle = \int d\mathbf{x} \bar{\psi}(\mathbf{x}) \chi(\mathbf{x}) \quad (5.26)$$

où $\bar{\psi}(\mathbf{x})$ est le complexe conjugué de $\psi(\mathbf{x})$. L'espace \mathbb{H} est alors simplement le produit tensoriel $L^2 \otimes \mathbb{F}$. Les fonctions d'onde qui le composent sont de la forme :

$$|\psi\rangle = \sum_k \sum_{i_1 \dots i_k} \psi_{i_1 \dots i_k}(x) a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_k}^\dagger |-\rangle \quad (5.27)$$

où les $\psi_{i_1 \dots i_k}$ sont complètement antisymétriques. Le produit scalaire, hérité de (5.25) et (5.26), s'écrit :

$$\langle \psi|\chi\rangle = \sum_k \sum_{i_1 \dots i_k} \int d\mathbf{x} \bar{\psi}_{i_1 \dots i_k}(\mathbf{x}) \chi_{i_1 \dots i_k}(\mathbf{x}) \quad (5.28)$$

Si l'on quantifie l'action (5.21), on obtient finalement l'opérateur généralisé :

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial x_i} \left(T \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) + \sum_{i,j} a_i^\dagger \frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} a_j \quad (5.29)$$

qui s'applique à des fonctions d'onde du type (5.27).

5.1.2.3 Supersymétrie

L'opérateur H possède deux symétries (ou « charges ») nilpotentes :

$$Q = -i \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} a_i \quad \bar{Q} = -i \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial V}{\partial x_i} \right) a_i^\dagger \quad Q^2 = \bar{Q}^2 = 0 \quad (5.30)$$

qui satisfont de plus
$$H = T(Q + \bar{Q})^2 = T(Q\bar{Q} + \bar{Q}Q). \quad (5.31)$$

Notons que la conjugaison

$$H_{FP}^h = e^{\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} H_{FP} e^{-\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} \quad (5.32)$$

met H_{FP} sous une forme hermitienne : $H_{FP}^h = H_{FP}^{h\dagger}$. La partie fermionique de H ne contenant pas d'opérateur de dérivation, elle est invariante sous cette transformation.

Ainsi
$$H^h = e^{\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} H e^{-\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} = H^{h\dagger} \quad (5.33)$$

Dans cette nouvelle base, les opérateurs Q et \bar{Q} sont conjugués l'un de l'autre, et l'étude du spectre de H et de son organisation devient relativement simple [186].

C'est par référence à la structure (5.31) que l'on parle d'Hamiltonien supersymétrique. Avant de montrer quelles informations on peut extraire de ce formalisme, nous allons répéter l'exercice avec une dynamique légèrement plus complexe : une équation de Langevin avec inertie.

5.2 Équation de Kramers

Tournons-nous à présent vers le cas inertiel, où l'amortissement est fini. Considérons un système hamiltonien possédant N degrés de liberté, couplé⁸ à un bain thermique de température T :

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \eta_i \end{cases} \quad (5.34)$$

$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ est le Hamiltonien du système, η_i un bruit blanc gaussien de variance $2\gamma T$ et γ l'intensité du couplage au bain (physiquement, un coefficient de friction). La dynamique (5.34) peut se traduire simplement en termes d'équation d'évolution pour la densité de probabilité sous la forme [158] :

$$\frac{\partial P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} = \left[\sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\gamma T \frac{\partial}{\partial p_i} + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) - \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right] P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = -H_K P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad (5.35)$$

5.2.1 Formalisme supersymétrique

Comme précédemment, nous pouvons construire une représentation en intégrale de chemin du propagateur :

$$P(\mathbf{q}_T, \mathbf{p}_T, T | \mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, 0) = \int_{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0}^{\mathbf{q}_T, \mathbf{p}_T} \mathcal{D}[\mathbf{q}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\theta}, \bar{\boldsymbol{\theta}}] \delta \left(\dot{p}_i + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \eta_i(t) \right) \delta \left(\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) \times e^{\int_0^T dt \left\{ -\frac{\eta_i^2}{4\gamma T} - \left(\bar{\theta}_{q_i} (\dot{\theta}_{q_i} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \theta_{q_j} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \theta_{p_j}) + \bar{\theta}_{p_i} (\dot{\theta}_{p_i} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} \theta_{p_j} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \theta_{p_j} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} \theta_{q_j} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \theta_{q_j}) \right\}} \right) \quad (5.36)$$

où les $4N$ variables de Grassman θ_{q_i} , $\bar{\theta}_{q_i}$, θ_{p_i} , $\bar{\theta}_{p_i}$ ont été introduites pour calculer le Jacobien permettant de passer des équations du mouvement aux variables p_i et q_i . De nouveau, on peut utiliser la représentation de Fourier de la fonction δ [199], en introduisant $2N$ champs imaginaires \hat{q}_i , \hat{p}_i , pour obtenir :

$$P(\mathbf{q}_T, \mathbf{p}_T, T | \mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, 0) = \int_{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0}^{\mathbf{q}_T, \mathbf{p}_T} \mathcal{D}[\mathbf{q}, \hat{\mathbf{q}}, \mathbf{p}, \hat{\mathbf{p}}, \boldsymbol{\theta}, \bar{\boldsymbol{\theta}}, \boldsymbol{\eta}] e^{\int_0^t dt' \left\{ \hat{p}_i \left(\dot{p}_i + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \eta_i(t) \right) - \frac{1}{4\gamma T} \eta_i^2(t') + \hat{q}_i \left(\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) \right\}} - \int_0^T dt \left\{ \bar{\theta}_{q_i} (\dot{\theta}_{q_i} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \theta_{q_j} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \theta_{p_j}) + \bar{\theta}_{p_i} (\dot{\theta}_{p_i} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} \theta_{p_j} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \theta_{p_j} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} \theta_{q_j} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \theta_{q_j}) \right\}} \quad (5.37)$$

Finalement, l'intégration sur les variables de bruit η_i donne :

$$P(\mathbf{q}_T, \mathbf{p}_T, T | \mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0, 0) = \int_{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0}^{\mathbf{q}_T, \mathbf{p}_T} \mathcal{D}[\mathbf{q}, \hat{\mathbf{q}}, \mathbf{p}, \hat{\mathbf{p}}, \boldsymbol{\theta}, \bar{\boldsymbol{\theta}}] e^{\int_0^t dt' \left\{ \hat{p}_i \dot{p}_i + \hat{q}_i \dot{q}_i + \gamma T \hat{p}_i^2 + \hat{p}_i \left(\gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) - \hat{q}_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right\}} - \int_0^T dt \left\{ \bar{\theta}_{q_i} (\dot{\theta}_{q_i} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \theta_{q_j} - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \theta_{p_j}) + \bar{\theta}_{p_i} (\dot{\theta}_{p_i} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} \theta_{p_j} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \theta_{p_j} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} \theta_{q_j} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \theta_{q_j}) \right\}} \quad (5.38)$$

⁸Pour les différentes manières de coupler un système hamiltonien à un bain thermique, voir [41].

De nouveau, cette action possède des symétries BRS qui permettent de construire une version supersymétrique de H_K . Pour la quantifier, on introduit cette fois $4N$ opérateurs fermioniques $a_i, b_i, a_i^\dagger, b_i^\dagger$. On choisit ici d'associer respectivement les opérateurs \mathbf{a} et \mathbf{b} aux variables $\boldsymbol{\theta}_q$ et $\boldsymbol{\theta}_p$. On obtient ainsi l'Hamiltonien de Kramers généralisé :

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=1}^N -\gamma T \frac{\partial^2}{\partial p_i^2} - \frac{\partial}{\partial p_i} \left(\gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\
 & + \sum_{i,j=1}^N \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} b_i^\dagger a_j + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} b_j^\dagger b_i - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} a_i^\dagger b_j + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} (\gamma b_j^\dagger a_i + b_i^\dagger b_j - a_j^\dagger a_i) \right)
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

qui est à nouveau de la forme
$$H = H_K + H_K^F \tag{5.40}$$

où H_K est l'opérateur de Fokker-Planck (5.35) et H_K^F une partie fermionique. L'espace de Hilbert \mathbb{H} correspondant s'obtient, comme à la section précédente, en prenant le produit tensoriel d'un espace de Fock fermionique et de l'espace L^2 des fonctions de carré intégrable définies sur l'espace des phases. Pour obtenir la structure supersymétrique de cet Hamiltonien, on doit donc chercher deux charges Q et \bar{Q} nilpotentes telles que $H = T(Q\bar{Q} + \bar{Q}Q)$.

Comme nous le verrons dans la section 7.2.1, $Q = -i \sum_i \left(\frac{\partial}{\partial q_i} a_i + \frac{\partial}{\partial p_i} b_i \right)$ a une signification purement géométrique⁹ et l'on vérifie qu'il s'agit à nouveau d'une symétrie de H : $[H, Q] = 0$. Par analogie avec le cas purement dissipatif, il est naturel de chercher un opérateur différentiel du premier ordre \bar{Q} tel que

$$\bar{Q}^2 = 0 \quad T(Q\bar{Q} + \bar{Q}Q) = T(Q + \bar{Q})^2 = H \tag{5.41}$$

C'est effectivement le cas en prenant

$$\bar{Q} = -i \sum_{i=1}^N \left[b_i^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial q_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) - a_i^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) + \gamma b_i^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) \right] \tag{5.42}$$

Nous avons donc trouvé une extension supersymétrique de H_K et les charges correspondantes¹⁰. Notons que H possède une symétrie additionnelle F définie par

$$F = \sum_{i=1}^{2N} a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i \quad \text{qui satisfait} \quad [H, F] = 0. \tag{5.43}$$

F associe à un vecteur $|\psi\rangle = \psi(\mathbf{x}) a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_k}^\dagger b_{j_1}^\dagger \dots b_{j_l}^\dagger |-\rangle$ son nombre $l + k$ de fermions.

Dans la suite, il sera plus agréable de disposer d'une notation compacte des opérateurs précédents. Ceci peut être fait en écrivant le système (5.34) en termes des variables $(x_1, \dots, x_{2N}) =$

⁹C'est une représentation de la différentielle extérieure.

¹⁰Ces symétries ont été trouvées par Kleinert et collaborateurs [102], pour une action correspondant à une évolution de la forme (5.34) dans le formalisme lagrangien d'intégrales de chemin.

(\mathbf{q}, \mathbf{p}) :

$$\dot{x}_i = -\Omega_{ij} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} - D_{ij} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} - \frac{1}{\gamma} \eta_j \right) \quad \text{avec} \quad \Omega_{ij} = \begin{pmatrix} 0_N & -1_N \\ 1_N & 0_N \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad D_{ij} = \gamma \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1_N \end{pmatrix} \quad (5.44)$$

Lorsque $D_{ij} = 0$, (5.44) est la forme symplectique des équations de Hamilton, le second terme du membre de droite représente l'interaction avec le bain. Avec cette notation, l'opérateur de Fokker-Planck généralisé (5.39) s'écrit :

$$\begin{aligned} H &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \left(T \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right) + \Omega_{ij} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right) + (D_{ij} + \Omega_{ij}) \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x_k \partial x_j} c_i^\dagger c_k \\ &= H_K + A_{ik} c_i^\dagger c_k \end{aligned} \quad (5.45)$$

où $(c_1, \dots, c_{2N}) = (a_1, \dots, a_N, b_1, \dots, b_N)$, et nous avons défini :

$$A_{ik} = (D_{ij} + \Omega_{ij}) \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x_k \partial x_j} \quad (5.46)$$

Les charges sont alors données sous la forme :

$$\begin{cases} Q = -i \sum_{i=1}^{2N} \frac{\partial}{\partial x_i} c_i \\ \bar{Q} = -\frac{i}{T} \sum_{i,j=1}^{2N} c_i^\dagger (\Omega_{ij} + D_{ij}) \left(T \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right) = e^{-\beta \mathcal{H}} (-i) \sum_{i,j=1}^{2N} c_i^\dagger (\Omega_{ij} + D_{ij}) \frac{\partial}{\partial x_j} e^{\beta \mathcal{H}} \end{cases} \quad (5.47)$$

La notation introduite dans cette section décrit plus particulièrement les cas dans lesquels les vitesses dans l'espace des phases dérivent d'une fonction globale \mathcal{H} . Notons toutefois que lorsque ce n'est pas le cas et que la dynamique est donnée par

$$\dot{x}_i = -\Omega_{ij} \mathcal{H}_j - D_{ij} \left(\mathcal{H}_j - \frac{1}{\gamma} \eta_j \right) \quad (5.48)$$

avec $\frac{\partial \mathcal{H}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial x_i}$ mais telle que $\mathcal{H}_j(\mathbf{x})$ ne soit pas *globalement* un gradient, il y a toujours une structure supersymétrique :

$$\begin{aligned} Q &= -i \sum_{i=1}^{2N} \frac{\partial}{\partial x_i} c_i & \bar{Q} &= -\frac{i}{T} \sum_{i=1}^{2N} c_i^\dagger (\Omega_{ij} + D_{ij}) \left(T \frac{\partial}{\partial x_j} + \mathcal{H}_j \right) \\ H &= -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \left(T \frac{\partial}{\partial x_j} + \mathcal{H}_j \right) + \Omega_{ij} \mathcal{H}_j \right) + A_{ij} c_i^\dagger c_k \end{aligned} \quad (5.49)$$

avec

$$A_{ik} = (D_{ij} + \Omega_{ij}) \frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial x_k} \quad (5.50)$$

5.2.2 Spectre du Hamiltonien supersymétrique

L'intérêt d'avoir introduit une structure supersymétrique apparaîtra clairement dans les chapitres 6 et 7 où nous verrons que les vecteurs propres de H contiennent beaucoup plus d'informations que ceux du Hamiltonien initial H_K . Toutefois, avant d'aborder ce contenu physique qui constitue le cœur de cette dernière partie, il est nécessaire d'étudier les conséquences de la supersymétrie sur l'organisation du spectre de H .

Dans un premier temps, nous considérons uniquement les Hamiltoniens ne dépendant pas explicitement du temps ainsi que le cas où les forces dérivent localement mais pas globalement d'un potentiel. La section 7.4 sera consacrée plus spécifiquement au cas dépendant du temps tandis que les sections 7.2 et 7.3 seront dédiées au cas dérivant globalement d'une fonction hamiltonienne \mathcal{H} .

Notons tout d'abord que H n'est pas hermitien et ne peut être mis sous une forme hermitienne via une transformation de similarité. Il s'agit d'une différence importante avec le cas purement dissipatif qui rend plus difficile l'étude de la structure supersymétrique. Entre autres, les valeurs propres n'ont aucune raison d'être réelles et l'on doit donc distinguer λ de son complexe conjugué $\bar{\lambda}$. Les fonctions d'onde de l'espace de Hilbert \mathbb{H} sont de la forme

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{m \in \{0 \dots N\} \\ n \in \{0 \dots N\}}} \sum_{\substack{i_1 \dots i_m \\ j_1 \dots j_n}} \psi_{i_1, \dots, i_m, j_1, \dots, j_n}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) b_{i_1}^\dagger \dots b_{i_m}^\dagger a_{j_1}^\dagger \dots a_{j_n}^\dagger |-\rangle \quad (5.51)$$

où $|-\rangle$ représente le vide fermionique et les $\psi_{i_1, \dots, i_m, j_1, \dots, j_n}$ sont complètement antisymétriques. Puisque le Hamiltonien n'est pas hermitien, nous devons distinguer les vecteurs propres à droite et à gauche. Ils sont définis par

$$H|\psi_i^R\rangle = \lambda_i|\psi_i^R\rangle \quad \text{et} \quad H^\dagger|\psi_i^L\rangle = \bar{\lambda}_i|\psi_i^L\rangle \quad (5.52)$$

Dans tout ce qui suit, nous supposons H diagonalisable¹¹, c'est-à-dire tel qu'il existe une base bi-orthonormale de vecteurs propres :

$$\langle \psi_j^L | \psi_i^R \rangle = \delta_{i,j} \quad (5.53)$$

L'objet des deux sections qui suivent est de montrer que le spectre de H est organisé comme le montre la figure 5.1.

5.2.2.1 Vecteurs propres de valeur propre non nulle

Dans cette section, nous allons nous concentrer sur les vecteurs propres de H de valeur propre non nulle. En particulier, nous allons montrer que l'espace qu'ils génèrent est organisé en paires d'états dégénérés, connectées par Q et \bar{Q} .

¹¹C'est une hypothèse restrictive, car la diagonalisabilité de H n'est pas évidente. Voir en particulier [91] pour une discussion détaillée.

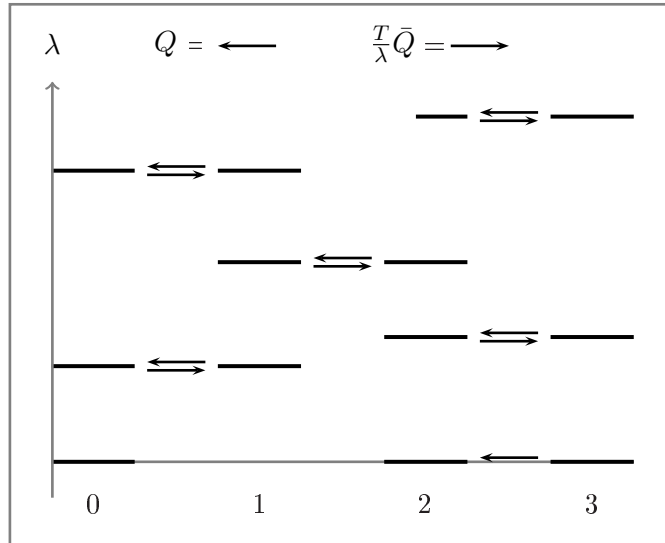


Fig. 5.1 : Représentation générique du spectre de H . Les états propres sont divisés en deux types : des paires de vecteurs propres reliés par Q et des états isolés, qui n'appartiennent à aucune paire. Ces derniers ont nécessairement une valeur propre nulle. L'axe vertical symbolise les différentes valeurs propres, bien que celles-ci puissent être complexes.

Ceci peut se comprendre intuitivement de la manière suivante : étant donné que $H = T(Q\bar{Q} + \bar{Q}Q)$, les états propres associés à des valeurs propres non nulles ne peuvent être annihilés simultanément par Q et \bar{Q} . De plus, comme Q et \bar{Q} commutent avec H , ils transforment des vecteurs propres en d'autres vecteurs propres de même valeur propre. Puisque de plus $Q^2 = \bar{Q}^2 = 0$, l'application répétée de Q ou \bar{Q} sur un vecteur propre ne produit pas de triplet de vecteurs propres. In fine, on peut construire une base $(|\phi_i^R\rangle, |\chi_i^R\rangle)$ (cf figure 5.2) d'un tel sous-espace telle que

$$Q|\phi_i^R\rangle = |\chi_i^R\rangle \quad \text{et} \quad \bar{Q}|\chi_i^R\rangle = \frac{\lambda_i}{T}|\phi_i^R\rangle \quad (5.54)$$

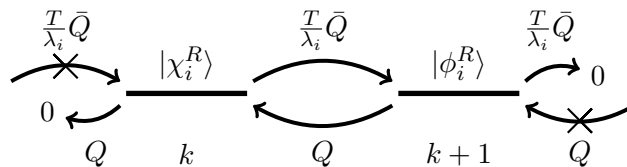


Fig. 5.2 : On peut construire une base de l'ensemble des états propres de valeur propre non nulle composée de paires de vecteurs à k et $k + 1$ fermions vérifiant (5.54).

Démonstration : Remarquons tout d'abord qu'un vecteur propre quelconque $|\psi^R\rangle$ de valeur propre $\lambda \neq 0$ est une combinaison linéaire de deux vecteurs propres $|\phi^R\rangle$ et $|\chi^R\rangle$ annihilés respectivement par $Q\bar{Q}$ et $\bar{Q}Q$. En effet, en notant $|\chi^R\rangle \equiv Q\bar{Q}|\psi^R\rangle$ et $|\phi^R\rangle \equiv \bar{Q}Q|\psi^R\rangle$, on voit que :

$$|\psi^R\rangle = \frac{1}{\lambda}H|\psi^R\rangle = \frac{T}{\lambda}(|\chi^R\rangle + |\phi^R\rangle). \quad (5.55)$$

Puisque $Q\bar{Q}$ et $\bar{Q}Q$ commutent tous deux avec H , $|\chi^R\rangle$ et $|\phi^R\rangle$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre λ . Comme Q et \bar{Q} sont nilpotentes, ces deux vecteurs propres sont tués respectivement par $\bar{Q}Q$ et $Q\bar{Q}$. On peut ainsi construire une base du sous-espace $\lambda \neq 0$ en prenant l'union des bases des noyaux de $\bar{Q}Q$ d'une part et $Q\bar{Q}$ d'autre part. Pour le voir, notons $|\chi_i^R\rangle$ une base de vecteurs propres annihilés par $\bar{Q}Q$, et $|\phi_i^R\rangle \equiv \frac{T}{\lambda_i}\bar{Q}|\chi_i^R\rangle$. Puisque $Q|\phi_i^R\rangle = \frac{1}{\lambda_i}H|\chi_i^R\rangle = |\chi_i^R\rangle$, la famille $|\phi_i^R\rangle$ est indépendante, car son image par Q est une famille indépendante.

De plus, la famille $|\phi_i^R\rangle$ génère tous les vecteurs propres avec $\lambda \neq 0$ annihilés par $Q\bar{Q}$. En effet, soit $|\psi^R\rangle$ un tel vecteur. Il est clair que $|\psi^R\rangle = \frac{T}{\lambda}\bar{Q}Q|\psi^R\rangle$. Puisque $Q|\psi^R\rangle$ est tué par $\bar{Q}Q$, il peut être développé sous la forme $Q|\psi^R\rangle = \sum_i \alpha_i |\chi_i^R\rangle$ et par conséquent $|\psi^R\rangle = \frac{T}{\lambda} \sum_i \alpha_i \bar{Q}|\chi_i^R\rangle = \frac{1}{\lambda} \sum_i \alpha_i \lambda_i |\phi_i^R\rangle$.

La famille $(|\phi_i^R\rangle, |\chi_i^R\rangle)$ est ainsi une base du sous-espace $\lambda_i \neq 0$, qui satisfait la propriété d'appariement (5.54).

On peut évidemment procéder de même pour les vecteurs propres de gauche. En construisant une base satisfaisant

$$\begin{aligned} \langle \phi_i^L | \phi_j^R \rangle &= \delta_{ij} & \langle \chi_i^L | \chi_j^R \rangle &= \delta_{ij} \\ \langle \phi_i^L | \chi_j^R \rangle &= 0 & \langle \chi_i^L | \phi_j^R \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (5.56)$$

ceux-ci sont alors appariés via

$$Q^\dagger |\chi_i^L\rangle = |\phi_i^L\rangle \quad \bar{Q}^\dagger |\phi_i^L\rangle = \frac{\lambda_i^*}{T} |\chi_i^L\rangle \quad (5.57)$$

5.2.2.2 Valeur propre nulle et topologie

Le scénario dans l'espace propre $\lambda = 0$ est légèrement plus complexe. Montrons que l'on peut construire une base des états propres à droite (par souci de clarté, on omet dans cette section l'exposant R) composée de (cf. figure 5.3)

$$\begin{aligned} i) \text{ paires } (|\phi_i^{k+1}\rangle, |\chi_i^k\rangle) & \quad \text{telles que } |\chi_i^k\rangle = Q|\phi_i^{k+1}\rangle \neq 0 \\ ii) \text{ vecteurs isolés } |\rho_i^k\rangle & \quad \text{tels que } Q|\rho_i^k\rangle = 0 \text{ et } \forall |\psi\rangle \quad |\rho_i^k\rangle \neq Q|\psi\rangle \end{aligned} \quad (5.58)$$

où k dénote le nombre de fermions. À une telle famille correspond évidemment une base similaire pour les états propres à gauche.

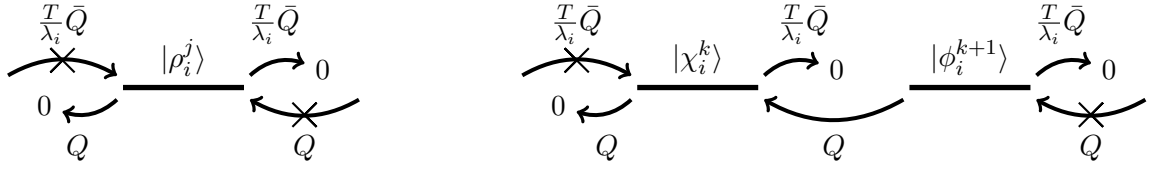


Fig. 5.3 : Illustration de la structure de la base (5.58).

Démonstration : Construisons à présent une base satisfaisant (5.58). Regardons tout d'abord le secteur à 0 fermion. Tous les vecteurs propres sont annihilés par les opérateurs de destruction fermionique a_i , donc par Q . Certains vecteurs ne sont pas l'image par Q de vecteurs à 1 fermion, d'autres si. Notons $|\chi_i^0\rangle$ une base de ces derniers et $|\phi_i^1\rangle$ les vecteurs à 1 fermion qui les génèrent : $|\chi_i^0\rangle = Q|\phi_i^1\rangle$. La famille $|\chi_i^0\rangle$ peut ne pas être une base de tout l'espace à 0 fermion et nous la complétons donc par des vecteurs propres $|\rho_i^0\rangle$. Par définition, les $|\rho_i^0\rangle$ sont annihilés par Q sans être dans son image. À ce point, $\{|\chi_i^0\rangle, |\rho_i^0\rangle\}$ constitue une base du secteur à 0 fermion satisfaisant (5.58). On peut alors se tourner vers le secteur à 1 fermion. La partie de ce secteur qui est annihilée par Q peut être organisée de la même manière que le secteur à 0 fermion, c'est-à-dire qu'il existe une base $\{|\chi_i^1\rangle, |\rho_i^1\rangle\}$ qui la génère et des vecteurs propres à 2 fermions $|\phi_i^2\rangle$ tels que $|\chi_i^1\rangle = Q|\phi_i^2\rangle$. La famille $|\phi_i^1\rangle$ introduite précédemment complète $\{|\chi_i^1\rangle, |\rho_i^1\rangle\}$ en une base du secteur à 1 fermion. Cette construction peut être suivie récursivement pour tous les secteurs fermioniques. Finalement, on obtient une base $\{|\chi_i^k\rangle, |\phi_i^k\rangle, |\rho_i^k\rangle\}$ qui satisfait effectivement les relations (5.58).

Dans la mécanique quantique supersymétrique associée au cas purement dissipatif, l'espace propre associé à $\lambda = 0$ est constitué uniquement de vecteurs propres isolés. Nous montrerons dans la section 7.3 que c'est également le cas pour le problème de Kramers lorsque les forces dérivent d'un potentiel global \mathcal{H} . Notons toutefois que des états appariés par \bar{Q} et de valeur propre $\lambda = 0$ existent dans certains cas. Par exemple, un système vivant sur un anneau et soumis à un champ magnétique perpendiculaire au plan de l'anneau ne possède pas de potentiel global et il y a effectivement une paire reliée par \bar{Q} dans le secteur propre de valeur propre nulle.

Les états propres $|\rho_i^k\rangle$ jouent un grand rôle en topologie. En effet, les fermions sont des représentations des formes différentielles (annexe F) définies sur la variété de l'espace des phases. Q est alors simplement la différentielle extérieure. Les états propres $|\rho_i^k\rangle$ génèrent ainsi un sous-espace dont la dimension est le k^e nombre de Betti B_k , qui est isomorphe au k^e groupe de cohomologie de Rham [137] associé à l'espace des phases. Tout cela sera détaillé dans la section 7, lorsque nous traiterons de la Théorie de Morse.

Les bases des espaces propres avec $\lambda = 0$ et $\lambda \neq 0$ forment une base globale : $\{|\psi_i\rangle\} \equiv \{|\chi_i^R\rangle, |\phi_i^R\rangle, |\rho_i^R\rangle\}$. Au vu de sa structure (figure 5.1), il est tentant d'appeler respectivement « appariés » et « isolés » les états générés par $\{|\rho_i^R\rangle\}$ et $\{|\phi_i^R\rangle, |\chi_i^R\rangle\}$, même si l'on peut

construire des états qui ne sont pas appariés par Q sans être générés par les vecteurs $|\rho_i^R\rangle$, en faisant par exemple la somme $|\phi_i^R\rangle + |\chi_i^R\rangle$. Dans la suite de notre travail, nous confondrons donc la structure de la base avec les états qu'elle génère.

Chapitre 6

De la supersymétrie aux chemins de transition

La principale motivation de ce travail est son application dans le cadre de la physico-chimie. Nous avons introduit au chapitre précédent un formalisme mathématique dont nous allons voir à présent comment extraire de l'information physique pour déterminer des chemins de transition. Concrètement, nous présentons dans un premier temps une dynamique de type Langevin qui correspond à l'évolution induite par l'Hamiltonien supersymétrique H dans le secteur à k fermions. Nous en déduisons ensuite la nature des états propres de basse valeur propre à k fermions et montrons comment le secteur à 1 fermion peut être utilisé pour déterminer numériquement les chemins de transition.

6.1 Dynamique stochastique dans le secteur à k fermions

Dans cette section nous présentons une dynamique stochastique qui correspond à l'évolution des fonctions d'ondes à k fermions induite par l'opérateur de Kramers généralisé H (5.45). Nous nous limitons au cas où le Hamiltonien \mathcal{H} ne dépend pas explicitement du temps, bien que la généralisation ne présente aucune difficulté. Le but de cet exercice est double : d'une part, comme nous le verrons ci-dessous, cette dynamique sert de base à une méthode numérique pour déterminer les chemins de réaction ; d'autre part, nous utiliserons les équations d'évolution pour construire explicitement les vecteurs propres de basse valeur propre du sous-espace à k fermions, ce qui nous sera utile dans le chapitre 7 sur la théorie de Morse.

Nous souhaitons donc trouver le pendant stochastique de l'équation d'évolution :

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi_k(\mathbf{x}, t)\rangle = -H |\psi_k(\mathbf{x}, t)\rangle \quad (6.1)$$

où $|\psi_k(\mathbf{x}, t)\rangle$ est une fonction à k fermions. On rappelle l'expression (5.45) :

$$H = -\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \left(T \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right) + \Omega_{ij} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j} \right) + c_i^\dagger A_{ij} c_j = H_K + H_F \quad (6.2)$$

Remarquons tout d'abord que les évolutions des différents secteurs fermioniques sont découplées, puisque l'opérateur nombre de fermions F (5.43) est une symétrie de H . Aux grands temps, $|\psi_k(\mathbf{x}, t)\rangle$ est donc une combinaison d'états propres à k fermions dont les valeurs propres seront de faibles parties réelles. Notons que si H était un opérateur quelconque, rien ne garantirait que nous puissions trouver une dynamique de Langevin lui correspondant. C'est en fait la supersymétrie qui assure l'existence d'une telle correspondance. Les dynamiques stochastiques correspondant aux différents nombres de fermions, également nommées *Nicolai map*, furent à l'origine déterminées uniquement pour les secteurs à 0 et N fermions dans le cas de l'équation de Langevin [140–142] et ont ensuite été généralisées aux autres secteurs fermioniques [84]. Nous utilisons ici une modification de la dynamique proposée par Graham et Roekaerts [84], déjà utilisée avec succès pour le cas purement dissipatif [185, 186].

6.1.1 Fonctions d'onde à 0 fermion

Pour la dynamique du secteur à 0 fermion, la partie fermionique H_F annihile $|\psi_0(\mathbf{x}, t)\rangle$ et (6.1) correspond donc simplement à l'évolution induite par H_K , c'est-à-dire Hamilton + bruit + friction (5.34). Ainsi, toute l'information contenue dans l'Hamiltonien de Kramers H_K est également contenue dans le spectre de H .

6.1.2 Fonctions d'onde à 1 fermion

Traisons en détail le cas du secteur à 1 fermion. Une fonction d'onde à 1 fermion s'écrit sous la forme $\sum_i \psi_i(\mathbf{x}) c_i^\dagger |-\rangle$. L'équation (6.1) se traduit alors composante par composante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\mathbf{x}, t) = -H_K \psi_i(\mathbf{x}, t) - A_{ij} \psi_j(\mathbf{x}, t) \quad (6.3)$$

Pour représenter cette évolution, on considère une particule dans l'espace des phases, repérée par sa position \mathbf{x} , que l'on couple à un vecteur unitaire \mathbf{u} possédant $2N$ composantes. Cette particule évolue avec la dynamique de Kramers standard (5.34), tandis que le vecteur \mathbf{u} évolue suivant

$$\dot{u}_i = -A_{ij} u_j + N(\mathbf{u}) u_i \quad (6.4)$$

où $N(\mathbf{u}) = \sum_{kl} u_k A_{kl} u_l$. Le dernier terme de (6.4) contraint \mathbf{u} à rester unitaire en imposant la conservation de $\sum_i u_i^2 = 1$. On considère ensuite une population de particules évoluant suivant ces règles et l'on couple l'évolution de chaque particule avec celle de son vecteur unitaire via un taux de réplication/annihilation égal à $-N(\mathbf{u})$. L'évolution de la probabilité jointe $\mathcal{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t)$ est alors donnée par

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t} = \left[-H_K + \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\sum_j A_{ij} u_j - N(\mathbf{u}) u_i \right) - N(\mathbf{u}) \right] \mathcal{F} \quad (6.5)$$

En effet, les deux premiers termes du membre de droite correspondent aux évolutions (5.34) et (6.4) et le dernier terme traduit le taux de mort/clonage. Si l'on définit

$$\psi_i(\mathbf{x}, t) = \int_{|\mathbf{u}|=1} d^N \mathbf{u} u_i \mathcal{F}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, t) \quad (6.6)$$

on vérifie alors, via une intégration par partie, que $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i c_i^\dagger |-\rangle$ évolue suivant (6.3).

6.1.3 Fonctions d'onde à k fermions

La généralisation à k fermions est très naturelle. Puisque l'on sait que les fermions correspondent aux formes différentielles, on va remplacer le vecteur \mathbf{u} par un k -volume orienté \mathbf{v} . La dynamique (6.1) pour un vecteur à k fermions

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1, \dots, i_k} \psi_{i_1, \dots, i_k}(\mathbf{x}) c_{i_1}^\dagger \dots c_{i_k}^\dagger |-\rangle \quad (6.7)$$

se lit composante par composante :

$$\dot{\psi}_{i_1, \dots, i_k} = -H_K \psi_{i_1, \dots, i_k} - \sum_{\sigma} \sum_{\alpha} \varepsilon(\sigma, \alpha) A_{\sigma(i_1), \alpha} \psi_{\sigma(i_2), \dots, \alpha, \dots, \sigma(i_k)} \quad (6.8)$$

où σ dénote toutes les permutations des k indices, et $\varepsilon(\sigma, \alpha)$ est la signature de la permutation $(i_1, i_2, \dots, \alpha, \dots, i_k) \rightarrow (\alpha, \sigma(i_1), \sigma(i_2), \dots, \sigma(i_k))$. À nouveau, pour représenter l'évolution de $|\psi\rangle$, les particules évoluent avec la dynamique de Kramers (5.34), tandis que les équations du mouvement pour \mathbf{v} sont données par

$$\dot{v}_{i_1, \dots, i_k} = - \sum_{\sigma} \sum_{\alpha} (-1)^{n(\sigma, \alpha)} A_{\sigma(i_1), \alpha} v_{\sigma(i_2), \dots, \alpha, \dots, \sigma(i_k)} + v_{i_1, \dots, i_k} \mathcal{N}(\mathbf{v}) \quad (6.9)$$

avec

$$\mathcal{N}(\mathbf{v}) = \sum_{i_1, \dots, i_k} v_{i_1, \dots, i_k} \sum_{\sigma} \sum_{\alpha} (-1)^{n(\sigma, \alpha)} A_{\sigma(i_1), \alpha} v_{\sigma(i_2), \dots, \alpha, \dots, \sigma(i_k)} \quad (6.10)$$

qui préserve la normalisation $\sum_{i_1, \dots, i_k} v_{i_1, \dots, i_k}^2$. Comme précédemment, on clone ou tue les particules avec un taux $-\mathcal{N}(\mathbf{v})$. On vérifie alors que la moyenne de v_{i_1, \dots, i_k} évolue effectivement comme $\psi_{i_1, \dots, i_k}(\mathbf{x})$.

Pour comprendre comment construire les états propres à k fermions au-dessous du trou spectral, il est utile de remarquer que les équations du mouvement pour \mathbf{v} correspondent à l'évolution d'un élément de volume orienté de dimension k suivant la dynamique non bruitée. L'élément de volume k -dimensionnel autour d'un point \mathbf{x} s'écrit :

$$\mathbf{V}^k = \delta \mathbf{x}_1 \wedge \delta \mathbf{x}_2 \wedge \dots \wedge \delta \mathbf{x}_k \equiv \mathcal{M} \sum_{i_1, \dots, i_k} v_{i_1, \dots, i_k} \hat{e}_{i_1} \wedge \dots \wedge \hat{e}_{i_k} \quad (6.11)$$

où \wedge est le produit vectoriel (extérieur), \hat{e}_i les vecteurs de base et la forme v_{i_1, \dots, i_k} est normalisée. L'orientation et la norme d'un élément de volume évoluent le long de la trajectoire d'une particule. L'équation (6.9) donne l'évolution de l'orientation \mathbf{v} et $-\mathcal{N} = \dot{\mathcal{M}}$ le taux d'expansion.

6.1.4 États propres de basse valeur propre de H

Avant de passer à l'étude des chemins de réaction, regardons quelles sont les structures stables sous la dynamique stochastique du secteur à k fermions, i.e. les vecteurs propres en dessous du trou spectral. Nous allons montrer ci-dessous de manière heuristique que les vecteurs propres à droite $\langle \mathbf{x} | \psi_a^R \rangle$ de basse valeur propre (i.e. de partie réelle allant à zéro avec T) sont concentrés sur les structures suivantes :

- pour $k = 0$: minima locaux,
- pour $k = 1$: chemins émanant des points cols d'ordre 1, tombant en spirale vers les minima locaux sous l'effet de la friction,
- pour tout k : les surfaces k -dimensionnelles générées par l'ensemble des chemins émanant des points critiques¹ d'ordre k , i.e. leur variété instable.

L'argument est le même que pour le cas purement dissipatif [186] : on suppose que la variété instable émanant d'un point col d'ordre k est uniformément couverte de particules dont les vecteurs \mathbf{v} sont tangents à cette variété. Ces deux propriétés sont conservées par la dynamique introduite précédemment. D'abord, au cours de la trajectoire d'une particule, le vecteur \mathbf{v} qui lui est attaché reste tangent à la surface : ceci s'explique par le fait que l'évolution (6.9) est précisément l'évolution de l'espace tangent. Ensuite, le taux de clonage compense exactement l'expansion d'un petit volume de dimension k de l'espace des phases et la densité reste donc constante à l'intérieur de celui-ci. Ainsi, les distributions des particules et des vecteurs qui leur sont attachés sont conservées au cours de la dynamique. On remarque entre autres que pour $k = 1$, les vecteurs propres à droite ressemblent fortement à des chemins de transition.

6.2 Chemins de transition et courants réduits

La motivation de ce travail vient pour une large part de la possibilité offerte par les secteurs fermioniques de localiser des structures intéressantes de l'espace des phases. En particulier, dans le cas purement dissipatif [185, 186], on déduit directement des vecteurs propres de basse valeur propre les courants de transition entre états métastables. Une fois de plus, la situation est ici plus complexe. En effet, comme nous le verrons par la suite, le formalisme suggère d'étudier une quantité plus intéressante que le courant de probabilité : un courant réduit, dont on a retiré les circulations d'équilibre qui ne contribuent pas aux transitions mais rendent leur échantillonnage difficile.

Considérons tout d'abord la dynamique de Kramers (5.34)

$$\frac{\partial P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)}{\partial t} = -H_K P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = -\operatorname{div} \mathbf{J} = - \left(\frac{\partial J_{q_i}}{\partial q_i} + \frac{\partial J_{p_i}}{\partial p_i} \right) \quad (6.12)$$

qui définit le courant

$$J_{q_i} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad J_{p_i} = - \left(\gamma T \frac{\partial}{\partial p_i} + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) \quad (6.13)$$

¹Un point critique est par définition un point où le gradient de \mathcal{H} s'annule. On parle de point critique d'ordre k si l'analyse de stabilité linéaire de son voisinage montre k directions instables.

Notons ici que cette définition est légèrement arbitraire, car si on ajoute un terme de divergence nulle au courant, l'équation (6.12) reste valable. Inspiré par le cas purement dissipatif, on applique l'opérateur \bar{Q} à une distribution de probabilité (une fonction d'onde du secteur à 0 fermion) pour obtenir :

$$(-i)T \bar{Q}P(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)|-\rangle = |\psi_1^R\rangle \equiv J_{q_i}^{\text{red}} a_i^\dagger |-\rangle + J_{p_i}^{\text{red}} b_i^\dagger |-\rangle \quad (6.14)$$

où nous avons défini le *courant réduit* via

$$J_{q_i}^{\text{red}} \equiv J_{q_i} + T \frac{\partial P(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial p_i} \quad J_{p_i}^{\text{red}} = J_{p_i} - T \frac{\partial P(\mathbf{q}, \mathbf{p})}{\partial q_i} \quad (6.15)$$

Ce courant présente plusieurs caractéristiques intéressantes :

- Il diffère du courant \mathbf{J} par un terme de divergence nulle et satisfait donc (6.12). Par conséquent, les flux des deux courants \mathbf{J} et \mathbf{J}^{red} au travers d'une surface fermée coïncident. Puisque c'est grâce à de tels flux que l'on définit les taux de transition, le courant \mathbf{J}^{red} contient a priori autant d'information « pertinente » que le courant initial \mathbf{J} , dès lors que l'on souhaite caractériser des réactions chimiques.
- Il est nul à l'équilibre : on montre qu'à l'intérieur d'un état métastable, il est exponentiellement petit tandis que le courant \mathbf{J} est au contraire très grand. Ceci est extrêmement utile, car si on échantillonne \mathbf{J} , l'écrasante majorité du « poids » que l'on mesure correspond à des oscillations proches des minima du Hamiltonien \mathcal{H} , ce qui n'est absolument pas pertinent pour les transitions entre états (voir figure 6.1). Au contraire, le courant réduit \mathbf{J}^{red} étant quasiment nul à l'intérieur des états métastables, son échantillonnage n'est pas « écranté » par une partie non pertinente.

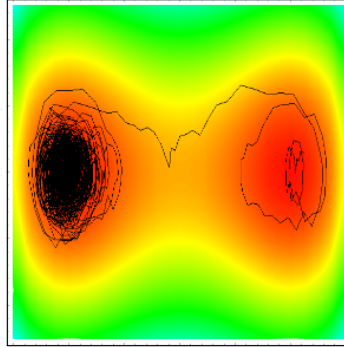


Fig. 6.1 : Exemple d'une transition spontanée entre deux puits de potentiel. Les abscisses correspondent à la position q et les ordonnées à l'impulsion p . Le code couleur représente la valeur du Hamiltonien. On voit que la quasi-totalité de la trajectoire correspond à des oscillations proches d'un des minima.

On peut par ailleurs prouver que si l'on cherche un courant qui satisfait (6.12), alors imposer les deux caractéristiques ci-dessus le détermine entièrement : \bar{Q} est le seul opérateur du premier ordre qui permette de trouver un champ de courant qui donne le même flux que le courant d'équilibre et soit nul dans les états métastables.

Dans le cas purement dissipatif, la supersymétrie nous permet de trouver le courant de transition usuel sur la base des états propres à 1 fermion. C'est une artillerie efficace, mais qui ne fournit pas d'information physique « nouvelle ». Ici, le formalisme est beaucoup plus puissant puisqu'il nous suggère lui-même d'étudier une quantité différente du courant usuel \mathbf{J} , qui s'avère plus pertinente pour les recherches de chemins de transition. Nous présentons ci-dessous une implémentation numérique simple, découlant de l'équation (6.3), très proche des dynamiques de population introduites aux chapitres 1 et 2.

6.2.0.1 Algorithme

On considère une population de \mathcal{N} couples (\mathbf{x}, \mathbf{v}) . À chaque pas de temps :

- 1] les positions $\mathbf{x}(t)$ de chaque particule évoluent avec la dynamique (5.34) et leur vecteur avec (6.4). Notons que de manière équivalente on évolue plutôt les vecteurs via

$$\dot{v}_i = -A_{ij}v_j \quad (6.16)$$

puis on les renormalise. Par ailleurs, on garde le facteur de renormalisation, qui vaut $\tau = -N(\mathbf{v})$ et donne donc le taux de clonage de la particule correspondante,

- 2] pour chaque particule, on connaît d'après le pas précédent le taux de clonage τ . On tire alors un nombre aléatoire ε entre 0 et 1 et l'on remplace la particule par $\lfloor \tau + \varepsilon \rfloor$ particules identiques (où $\lfloor x \rfloor$ est la partie entière de x). Par exemple, si $\tau = 1.2$, il y a 20% de chances pour que la particule soit clonée ($\varepsilon \geq 0.8$) et 80% que non ($\varepsilon < 0.2$). Notons que si $\tau < 1$, la particule peut être tuée,
- 3] une fois toutes les particules clonées, on a $\mathcal{N}(t+dt)$ particules au lieu des $\mathcal{N}(t)$ initiales. Si $\mathcal{N}(t+dt) < \mathcal{N}(t)$, on clone alors au hasard $\mathcal{N}(t) - \mathcal{N}(t+dt)$ particules. Au contraire, si $\mathcal{N}(t+dt) > \mathcal{N}(t)$, on en tue aléatoirement $\mathcal{N}(t+dt) - \mathcal{N}(t)$. On garde au final la valeur du facteur $R(t) = \frac{\mathcal{N}(t+dt)}{\mathcal{N}(t)}$.

Expliquons ici l'intérêt du troisième pas. Puisque la dynamique que nous avons présentée à la section précédente correspond à l'évolution de H dans le secteur à 1 fermion, la densité de probabilité \mathcal{F} évolue aux temps longs comme $e^{-\text{Re}(\lambda)t}$, où λ est la valeur propre de H du secteur à 1 fermion de plus petite partie réelle. Contrairement au cas à 0 fermion, celle-ci n'a aucune raison d'être nulle et si l'on se limite aux deux premiers pas, le nombre de particules va soit tendre vers 0 ($\text{Re}(\lambda) > 0$), soit diverger exponentiellement ($\text{Re}(\lambda) < 0$). Numériquement, ceci n'est évidemment pas souhaitable. Pour résoudre ce problème, on clone ou tue la population de manière *uniforme* pour la maintenir constante, l'uniformité nous assurant de ne pas gâcher l'échantillonnage. Par ailleurs, le taux de clonage « spontané » $R(t)$ de la population nous donne accès à $\text{Re}(\lambda) = -\frac{1}{t} \log \left[\prod_t R(t) \right]$, qui correspond à la probabilité de transition entre les deux états les plus stables de \mathcal{H} .

Cet algorithme est une transposition des approches de type *Diffusion Monte-Carlo* [2] utilisées en mécanique quantique pour échantillonner des états propres d'un Hamiltonien de Schrödinger. L'utilisation du clonage y est très répandue [2, 98], mais présente de nombreuses

implémentations différentes. Pour une présentation générale des diverses méthodes de clonage et de leur limitation, se reporter [42]. L'idée générale est que l'on doit trouver un équilibre entre d'une part empêcher la population de particules de mourir ou diverger et d'autre part minimiser l'erreur statistique que génèrent les pas de clonage [21, 79, 99, 145, 146].

Cette discussion est très proche de celle que nous avons présentée dans la section 1.3, lors de l'introduction de la dynamique biaisée par les Lyapunov. Effectivement, l'algorithme présenté ci-dessus correspond au cas $\alpha = 1$ de cette méthode appliquée au système de Kramers (4.1). Nous faisons le lien entre ces deux approches dans l'annexe I.

6.2.1 Quelques applications

6.2.1.1 Le double puits de potentiel

Pour illustrer la section précédente, considérons une particule évoluant dans un double puits de potentiel $V(q) = (q^2 - 1)^2$. En utilisant l'algorithme introduit ci-dessus pour différentes valeurs du couple température/friction, on voit sur la figure 6.2 les évolutions des chemins de transition².

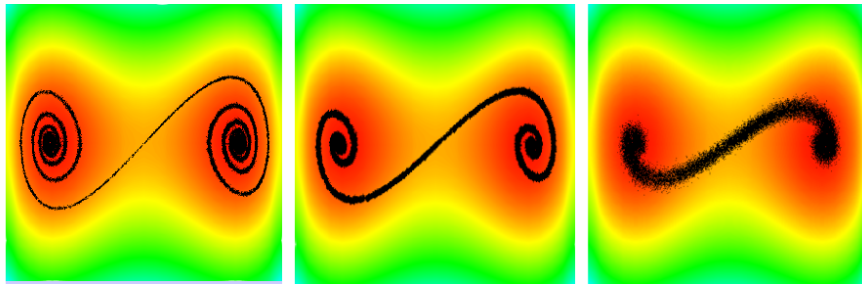


Fig. 6.2 : Courant réduit pour le double puits de potentiel de la section 6.2. Les particules se concentrent sur deux chemins amortis, nés au voisinage du point col et tombant en spirale vers les deux minima. La largeur de la structure est donnée par $\sim \sqrt{\gamma T}$ et le nombre de tours que font les particules en tombant est d'autant plus grand que la friction est faible.

Dynamiquement, si l'on démarre d'une distribution uniforme englobant le point col, seuls les chemins de réaction survivent aux temps longs (figure 6.3).

6.2.1.2 Trouver le col le plus proche

Notons que parmi les limitations des méthodes existantes figure souvent la nécessité de connaître approximativement le chemin de réaction ou au moins la localisation de l'état de transition³. Dans l'exemple précédent, la connaissance du point col est implicitement

²Les simulations numériques de l'équation (5.34), particulièrement dans le régime de basse température, doivent être réalisées avec soin pour préserver tant la distribution d'équilibre que le caractère quasi hamiltonien. Nous avons utilisé les intégrateurs quasi symplectiques présentés dans [123] qui fournissent des résultats valables dans toute la gamme de friction étudiée.

³Par exemple pour initialiser *transition path sampling*.

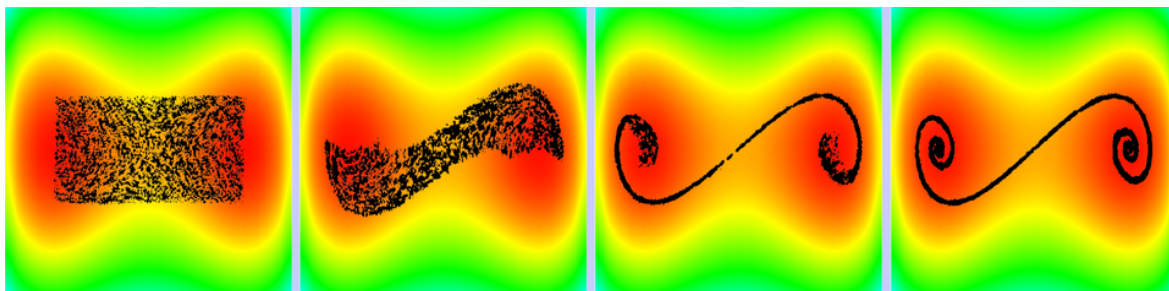


Fig. 6.3 : Si l'on démarre d'une distribution uniforme, seuls les chemins de réaction survivent aux temps longs.

nécessaire et l'on n'a donc pas progressé sur ce point. En combinant la méthode développée pour calculer les fonctions de grandes déviations des exposants de Lyapunov présentée à la section 1 avec celle présentée à la section 6.2.0.1, on peut toutefois dépasser cette restriction.

En effet, le point col correspond à la zone où « l'étirement » d'un vecteur tangent est maximal et les orbites qui s'en échappent sont donc les attracteurs de la dynamique biaisée par les Lyapunov (voir section 1.3). Ainsi, si l'on démarre d'un puits de potentiel, le système va évoluer comme sur la figure 1.2 et converger vers la séparatrice. Une fois que le système a convergé, on peut alors « brancher » la friction pour retrouver le résultat précédent. Nous appliquons cette méthode dans la section qui suit au cas d'un potentiel bruité.

6.2.1.3 Potentiel rugueux

Les trois principales limitations de l'exemple du double puits de potentiel sont la nécessité de connaître le point col, le fait que ce potentiel soit lisse et finalement son faible nombre de degrés de liberté : un ! Nous avons montré dans la section précédente que l'on peut s'abstenir de connaître le point initial. Nous montrerons dans la section suivante que la méthode est efficace, même avec un nombre de degrés de liberté relativement élevé. Mais regardons tout d'abord ce qui se passe quand plusieurs échelles de temps entrent en jeu. C'est par exemple le cas lorsqu'à un potentiel du type double puits, on ajoute un « bruit » d'intensité assez faible. Ici, on regarde par exemple l'effet d'un cosinus de faible amplitude sur le chemin de réaction. Nous considérons donc le Hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2} + (q^2 - 1)^2 - \frac{1}{10\pi} \cos(10\pi q) \quad (6.17)$$

La principale barrière de potentiel correspond à $\Delta E = 1$. Nous voulons donc réaliser une simulation à $kT \ll \Delta E$, pour que la notion de chemin de réaction soit bien définie, et choisissons par conséquent $T = 0,03$. Notons ici que le « bruit » dû au cosinus est de l'ordre de kT .

Démarrant de l'un des puits, on « chauffe » tout d'abord le système en utilisant la dynamique biaisée par les Lyapunov (présence de bruit et absence de friction). Lorsque la distance maximale entre deux particules du nuage est suffisamment grande, on « baisse » la force du

bruit, ce qui resserre le nuage autour de la séparatrice. On peut alors « allumer » la friction et les marcheurs convergent vers le chemin de réaction.

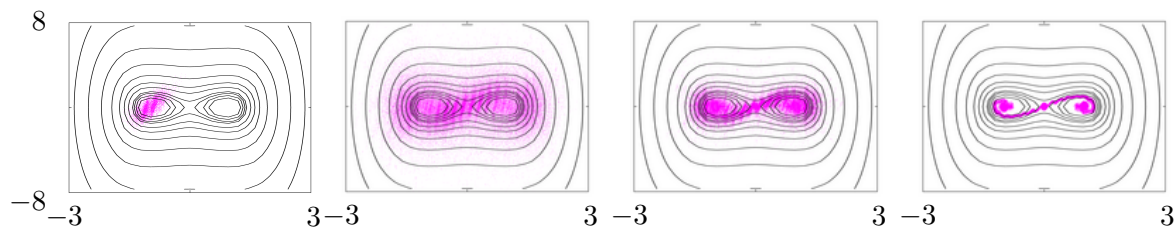


Fig. 6.4 : Détecter le chemin de réaction sur un potentiel rugueux. On démarre la dynamique biaisée sans friction. Lorsque la distance entre deux particules est supérieure à 25, on diminue la variance du bruit, puis allume la friction. Les marcheurs convergent alors vers le chemin de réaction.

Notons que si la température est telle que $T \gg \Delta E_{\text{cos}}$, où ΔE_{cos} est la hauteur des puits de potentiel dus au cosinus, alors la température « lisse » le potentiel et l'on retrouve un résultat semblable à celui des sections précédentes. Au contraire, si $kT \ll \Delta E_{\text{cos}}$ sont comparables, la transition correspond au niveau du col à une succession d'instantons et d'anti-instantons.

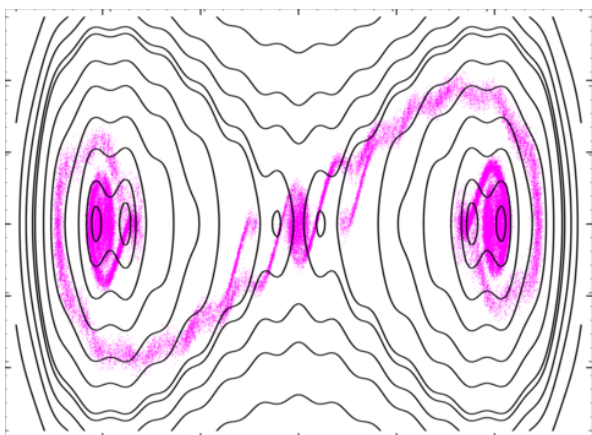


Fig. 6.5 : Chemin de réaction sur un potentiel rugueux

6.2.1.4 Vers des problèmes plus réalistes

Pour pouvoir prétendre s'attaquer à des problèmes de physico-chimie, il faut avant tout montrer que les résultats présentés ici ne reposent pas trop fortement sur la basse dimensionnalité du modèle étudié (qui est en particulier intégrable). Alessandro Mossa et Cecilia Clementi ont adapté l'algorithme présenté ci-dessus au cas d'une transition « hélice-pelote » de chaîne de polypeptides [132] (voir figure 6.2.1.4).

Le potentiel utilisé pour représenter la chaîne est un potentiel effectif d'interaction entre chaque polypeptide. Le système considéré est constitué de 12 polypeptides, soit $6 \times 12 = 72$

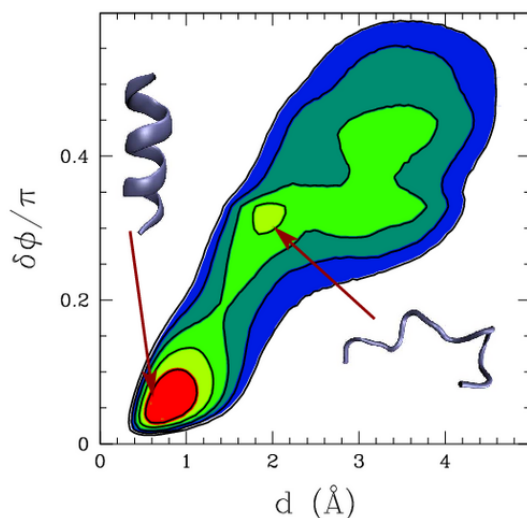


Fig. 6.6 : Profil d'énergie libre à la température de repliement. Les lignes de niveau de l'énergie libre sont obtenues à partir d'une simulation de dynamique moléculaire. Deux états principaux correspondant à une structure d'hélice et une structure en pelote sont séparés par une barrière d'énergie libre. Tiré de [132].

degrés de liberté. Notons ici que l'une des difficultés de la méthode proposée est qu'une fois que l'on a obtenu une densité de marcheurs dans l'espace des phases, il faut reconstruire l'état propre correspondant via la formule (6.6). Cela est difficile, en raison du « problème de signe ». En un mot, la partie symétrique en u_i de \mathcal{F} ne contribue pas à l'état propre ψ_i et écrante par conséquent la partie antisymétrique pertinente. Toutefois, comme on l'a vu dans les exemples précédents, les vecteurs sont tangents à la trajectoire le long du chemin de transition et la position des marcheurs est par conséquent un bon indice de la présence du chemin de réaction⁴. Par ailleurs, pour le calcul du taux de réaction, il n'est pas nécessaire de connaître ψ , et on peut ainsi s'abstraire du problème de signe.

Dans leurs travaux, Mossa et al. ont sélectionné les régions contenant une forte densité de marcheurs, telles que la variance de la distribution angulaire des vecteurs correspondants soit faible. Les résultats sont présentés figure 6.7.

6.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons montré comment réaliser le pendant stochastique de l'évolution induite par le Hamiltonien supersymétrique H . En particulier, cette dynamique permet de comprendre simplement pourquoi les états propres à k fermions dont la partie réelle de la valeur propre est faible se piquent sur les variétés instables des points critiques d'ordre k .

De la dynamique stochastique du secteur à 1 fermion, nous avons extrait un algorithme permettant de localiser les chemins de réaction et présenté diverses applications. Le travail

⁴On peut de plus montrer que le long du chemin de transition, c'est typiquement la partie antisymétrique de \mathcal{F} qui l'emporte sur la partie symétrique (cf. section 1.2.0.2).

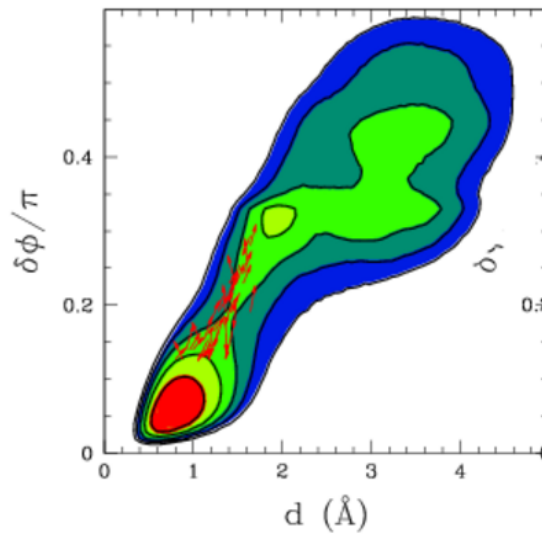


Fig. 6.7 : Résultat de la simulation pour la transition hélice-pelote d'une chaîne de 12 polypeptides. Les moyennes (6.6) ont été réalisées dans les régions ayant une grande densité de marcheurs, dont l'orientation des vecteurs est distribuée avec une faible variance. Le chemin de transition ainsi révélé coïncide parfaitement avec ce que laissent présumer les lignes de niveau de l'énergie libre, tracées toutes les 1kcal/mol.

réalisé par Mossa et al. [132] montre le potentiel de cette méthode. Il serait désormais intéressant de voir si son extension à des cas plus proches de la recherche actuelle - comme l'étude du repliement de protéine - est envisageable. Notons que coupler cette dynamique avec des méthodes existantes comme *transition path sampling* pourrait également s'avérer une ligne de recherche prometteuse.

Chapitre 7

Supersymétrie et topologie

La théorie de Morse étudie les relations entre les points critiques d'une fonction lisse, dite fonction de « Morse », et la topologie de la variété sur laquelle elle est définie. Outil majeur en topologie algébrique, elle joue également un rôle important en physique, par exemple dans la classification des orbites périodiques d'un système hamiltonien.

Une construction aussi simple qu'élégante fut présentée au début des années 80 par Witten [196], grâce à l'utilisation de la mécanique quantique supersymétrique, pour laquelle le potentiel joue le rôle de fonction de Morse. Cette approche repose sur une limite semiclassique dans laquelle les états propres à k fermions de plus basse valeur propre du Hamiltonien supersymétrique (5.33) sont des gaussiennes localisées autour des points critiques ayant k directions instables. Les charges supersymétriques Q et \bar{Q} , en envoyant des états à k fermions sur des états à $k \pm 1$ fermions induisent des relations entre les nombres de points critiques correspondants.

Peu après ces travaux, il devint clair que le Hamiltonien (5.33), ou plus précisément sa restriction au secteur à 0 fermion, peut être vu après un changement de base comme l'opérateur d'évolution d'une dynamique de Langevin [40, 140, 141, 152], la limite semiclassique correspondant au régime de faible température. Dans cette base, les états propres ne sont plus localisés sur les points critiques mais sur les variétés instables qui en émanent. Par exemple, les états propres à 1 fermion sont localisés sur les lignes de gradient reliant deux minima via un point col. On reconnaît ici le type de structures que nous avons mises en évidence à la section 6.1.4.

La démonstration de Witten repose sur le fait que le Hamiltonien supersymétrique lié à la dynamique de Langevin peut être mis sous une forme hermitienne. Cela n'est pas le cas pour la dynamique de Kramers, ce qui rend la démonstration plus compliquée. Dans la première section, nous étudions le spectre de faible valeur propre du Hamiltonien supersymétrique (5.45), dans le cadre le plus général. Dans la section suivante, nous en déduisons la théorie de Morse pour un Hamiltonien ne dépendant pas du temps. Nous présentons alors une approche similaire à celle de Witten, pour montrer que dans le cas d'un Hamiltonien du type $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2} + V(\mathbf{q})$, les états propres de basse valeur propre correspondent - dans une certaine base -

à des gaussiennes centrées sur les points critiques, les nombres de directions instables et de fermions étant égaux. Pour finir, nous traitons le cas général d'un Hamiltonien dépendant périodiquement du temps via la représentation de Floquet à la section 7.4.

7.1 Limite de basse température : points fixes et orbites périodiques

7.1.1 Fonction génératrice

Pour étudier les vecteurs propres de basse valeur propre¹ dans la limite de faible température, nous allons calculer la trace de l'opérateur d'évolution à différents temps et utiliser le résultat pour reconstruire le spectre. Une méthode simple et rapide est de procéder en utilisant les intégrales de chemin et la méthode du col.

7.1.1.1 De la fonction génératrice aux orbites périodiques classiques

Une manière compacte d'obtenir les propriétés spectrales de l'opérateur d'évolution est d'utiliser la fonction génératrice

$$T(\lambda, t) \equiv \text{Tr} \left(\lambda^F \mathcal{T} e^{-\int H(t') dt'} \right) = \sum_k \lambda^k \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int H(t') dt'} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}} \quad (7.1)$$

où \mathcal{T} traduit un produit ordonné dans le temps, et F est l'opérateur défini en (I.4) donnant le nombre de fermions. La fonction génératrice de l'opérateur d'évolution peut s'écrire en terme d'intégrales de chemin (voir section 5.2.1) :

$$T(\lambda, t) \equiv \text{Tr} \left(\lambda^F \mathcal{T} e^{-\int H(t') dt'} \right) = \int_{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0}^{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0} \mathcal{D}[\mathbf{q}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\eta}] \delta \left(\dot{p}_i + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \eta_i(t) \right) \delta \left(\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) \exp \left(-\frac{1}{4\gamma T} \int \sum_i \eta_i^2(t') dt' \right) W[\mathbf{q}, \mathbf{p}; t'] \quad (7.2)$$

où W est défini par

$$W[\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t); t'] = \int \mathcal{D}[\mathbf{c}, \bar{\mathbf{c}}] e^{-\int dt \bar{c}_i (\delta_{ij} \frac{d}{dt} - \ln \lambda) + A_{ij}[\mathbf{p}, \mathbf{q}] c_j} \quad (7.3)$$

et (\bar{c}_j, c_j) sont des variables de Grassmann. En utilisant la représentation de Fourier de la fonction δ et en intégrant sur le bruit, T se met sous la forme :

$$T(\lambda, t) = \int_{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0}^{\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0} \mathcal{D}[\mathbf{q}, \hat{\mathbf{q}}, \mathbf{p}, \hat{\mathbf{p}}] e^{\int dt' [\hat{p}_i (\dot{p}_i + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}) + \hat{p}_i^2 \gamma T + \hat{q}_i (\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i})]} W(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t) \quad (7.4)$$

L'intégration sur $\hat{\mathbf{p}}$ et $\hat{\mathbf{q}}$ donne finalement une version lagrangienne de l'intégrale de chemin :

$$T(\lambda, t) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}_0} \mathcal{D}[\mathbf{q}, \mathbf{p}] e^{-\int dt' \frac{(\dot{p}_i + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i})^2}{4\gamma T}} \delta \left(\dot{q}_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) W(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t) \quad (7.5)$$

¹Dans toute cette section, pour alléger le texte on parlera de « basse valeur propre » en lieu et place de « valeur propre de partie réelle nulle au premier ordre en T ».

Le dénominateur $1/\gamma T$ devient grand lorsque la température tend vers zéro, et l'intégrale de chemin est dominée par les orbites périodiques qui satisfont :

$$\begin{cases} \dot{p}_i^c = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\ \dot{q}_i^c = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}. \end{cases} \quad (7.6)$$

On ramène ainsi la trace à une somme sur les orbites périodiques « classiques », i.e. de bruit nul.

7.1.1.2 Contribution des orbites périodiques classiques

Pour étudier la contribution de ces orbites, linéarisons l'équation (7.4) autour d'une trajectoire satisfaisant (7.6). Introduisons pour cela les variables \mathbf{x}' et $\hat{\mathbf{x}}'$, définies par $x_i = x_i^c + \sqrt{T}x'_i$, $\hat{x}_i = \frac{1}{\sqrt{T}}\hat{x}'_i$. Les dérivées partielles de \mathcal{H} s'écrivent alors :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i} \Big|_{q^c, p^c} + \sqrt{T} x'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{q^c, p^c} \quad (7.7)$$

On obtient ainsi la contribution à cet ordre en T d'une orbite périodique :

$$\begin{aligned} T^c(\lambda, t) = \int \mathcal{D}[\mathbf{q}', \hat{\mathbf{q}}, \mathbf{p}', \hat{\mathbf{p}}] e^{\int dt \hat{p}_i \left(\dot{p}'_i + \gamma p'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} + \gamma q'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \Big|_{q^c, p^c} + p'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} + q'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} \Big|_{q^c, p^c} + \gamma \hat{p}_i \right)} \\ e^{\int dt \hat{q}_i \left(\dot{q}'_i - p'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} - q'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \Big|_{q^c, p^c} \right)} W(\mathbf{q}^c, \mathbf{p}^c; t) \end{aligned} \quad (7.8)$$

On reconnaît dans (7.8) la représentation sous forme d'intégrales de chemin de la trace de l'opérateur d'évolution associé au Hamiltonien dépendant du temps :

$$\begin{aligned} H^c = \frac{\partial}{\partial q'_i} \left(p'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} + q'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \Big|_{q^c, p^c} \right) - \frac{\partial}{\partial p'_i} \left(\gamma \frac{\partial}{\partial p'_i} + \gamma p'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} \right. \\ \left. + \gamma q'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial q_j} \Big|_{q^c, p^c} + p'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} + q'_j \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} \Big|_{q^c, p^c} \right) + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} \Big|_{q^c, p^c} b_i^\dagger a_j \\ \left. + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} b_j^\dagger b_i - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} \Big|_{q^c, p^c} a_i^\dagger b_j + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_j \partial q_i} \Big|_{q^c, p^c} (\gamma b_j^\dagger a_i + b_i^\dagger b_j - a_j^\dagger a_i) \right) \\ H^c = -\frac{\partial}{\partial x'_k} \left(D_{kj} \frac{\partial}{\partial x'_j} + A_{kj}^c(t) x'_j \right) + A_{ij}^c(t) c_i^\dagger c_j \end{aligned} \quad (7.9)$$

où $A_{ij}^c(t)$ est défini comme en (5.46), mais évalué uniquement le long de l'orbite périodique classique :

$$A_{ik}^c(t) \equiv A_{ik}[x^c(t)] = (D_{ij} + \Omega_{ij}) \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_j \partial x_k} \Big|_{x^c} \quad (7.10)$$

Nous avons employé ici une notation faisant explicitement référence à un potentiel global \mathcal{H} . Cela n'est toutefois pas nécessaire puisque dans le cas de forces dérivant localement mais pas globalement d'un potentiel, il suffit d'écrire (7.9) en utilisant la définition (5.49) des A_{kj}^c .

(7.9) est simplement le Hamiltonien supersymétrique correspondant à une diffusion dans un oscillateur harmonique dépendant du temps $\mathcal{H}^c = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial x_i \partial x_j} x'_i x'_j$, correspondant à

$$\dot{x}'_i = -A_{ij}^c(t)x'_j + D_i \eta_i \quad (7.11)$$

où η_i est un bruit blanc gaussien. À l'ordre dominant en T^{-1} , il faut calculer $T(\lambda, t)$ comme une somme sur les contributions $T^c(\lambda, t)$ de chaque orbite périodique :

$$T(\lambda, t) \sim \sum_k \lambda^k \sum_{\substack{\text{orbites} \\ \text{classiques } c}} \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int H^c(t') dt'} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}} \equiv \sum_{\substack{\text{orbites} \\ \text{classiques } c}} T^c(\lambda, t) \quad (7.12)$$

Remarquons qu'à cet ordre, les parties bosoniques et fermioniques sont découplées. Ainsi, chaque terme de la somme (7.12) est un produit de deux traces : une sur la partie bosonique, et une sur la partie fermionique, chacune avec un oscillateur harmonique, en général dépendant du temps. Il s'agit d'un exercice standard, détaillé dans l'annexe G. Pour chaque orbite, la contribution bosonique donne un facteur $|\det[1 - U^c(t)]|^{-1}$, tandis que la partie fermionique donne $\det[1 + \lambda U^c(t)]$, où $U^c(t)$ est la matrice $2N \times 2N$ définie par

$$\dot{U}^c(t') = -A^c(t')U^c(t') \quad U^c(0) = 1 \quad (7.13)$$

Au premier ordre en T^{-1} , nous obtenons ainsi :

$$T(\lambda, t) \xrightarrow{T \rightarrow 0} \sum_{\substack{\text{orbites} \\ \text{classiques } c}} \frac{\det[1 + \lambda U^c(t)]}{|\det[1 - U^c(t)]|} \quad (7.14)$$

Cette formule a deux limites, chacune traduisant une caractéristique importante de l'espace des phases :

- Si une valeur propre de U^c est égale à 1, pour une orbite quelconque, (7.14) diverge. Cela peut être accidentel, par exemple un point fixe qui traverse une transition de phase du deuxième ordre, ou bien plus profond s'il existe un continuum d'orbites périodiques, résultant d'une symétrie continue du modèle. Le problème devient alors celui de la théorie de Morse dégénérée².
- La méthode du col est légitime tant que l'on envoie la température à zéro en gardant « t » fixé. Si l'on s'intéresse au contraire à des orbites arbitrairement longues, dont la période va à l'infini lorsque $T \rightarrow 0$, il faut faire attention parce que l'action elle-même va dépendre de T et (7.14) peut donc ne pas être valable. Ce problème n'est pas spécifique à notre traitement : les orbites périodiques de très longues périodes sont un des dangers typiques de la limite semiclassique [48].

On se restreint donc ici aux cas où aucune valeur propre n'est de module 1³.

²Par exemple, dans un cas indépendant du temps, avec des forces non conservatives, chaque orbite est membre d'une famille continue, chaque membre correspondant à la même orbite, décalée continument dans le temps.

³On exclut donc les cas où certaines orbites ont une stabilité marginale, pour se restreindre aux cas d'orbites hyperboliques. C'est une limitation classique des formules de trace [48].

7.1.2 Reconstruction du spectre de faible valeur propre

7.1.2.1 Orbite de période τ , égale à celle de \mathcal{H}

Évaluons tout d'abord la contribution à la fonction génératrice d'une orbite périodique, isolée, de période τ égale à celle du Hamiltonien \mathcal{H} , en utilisant (7.14) :

$$\frac{\det[1 + \lambda U^c(t = n\tau)]}{|\det[1 - U^c(t = n\tau)]|} \sim \prod_{i=1}^{2N} \frac{1 + \lambda u_i^n}{|1 - u_i^n|} \quad (7.15)$$

où (u_1, \dots, u_{2N}) sont les valeurs propres de $U^c(\tau)$ ⁴. On peut lire dans le facteur $1 + \lambda u_i^n$ la contribution du vide fermionique, de valeur propre 1 plus λ fois la contribution de l'état à 1 fermion, de valeur propre u_i^n . La partie bosonique correspond au dénominateur. Pour reconnaître le spectre correspondant, on développe $\frac{1}{|1 - u_i^n|}$ sous la forme d'une série.

Considérons tout d'abord le cas d'un u_i réel. Si $|u_i| < 1$, alors :

$$\frac{1}{|1 - u_i^n|} = \frac{1}{1 - u_i^n} = \sum_{k=0}^{\infty} (u_i^n)^k \quad (7.16)$$

Au contraire, pour $|u_i| > 1$, on écrit $|1 - u_i^n|$ sous la forme $|u_i^n| \left(1 - \frac{1}{u_i^n}\right)$. Le même développement donne alors :

$$\frac{1}{|1 - u_i^n|} = \text{sign}(u_i) \sum_{k=1}^{\infty} u_i^{-kn} \quad (7.17)$$

Considérons ensuite le cas d'une paire de valeurs propres complexes (u_i, u_i^*) . Si $|u_i| < 1$, nous pouvons écrire :

$$\frac{1}{|1 - u_i^n|} \frac{1}{|1 - u_i^{*n}|} = \frac{1}{(1 - u_i^n)(1 - u_i^{*n})} = \sum_{k=0, k'=0}^{\infty} (u_i)^{nk} (u_i^*)^{nk'} \quad (7.18)$$

tandis que pour $|u_i| > 1$:

$$\frac{1}{|1 - u_i^n|} \frac{1}{|1 - u_i^{*n}|} = \sum_{k=1, k'=1}^{\infty} (u_i)^{-nk} (u_i^*)^{-nk'} \quad (7.19)$$

Finalement, la contribution sur une période ($n = 1$) d'une orbite périodique pour le spectre est le produit tensoriel des ensembles suivants (cf. figure 7.1) :

- $(1, u_i) \otimes (1, u_i, u_i^2, \dots)$ pour $u_i = u_i^*$, $|u_i| < 1$,
- $(1, u_i) \otimes (\frac{1}{u_i}, \frac{1}{u_i^2}, \dots)$ pour $u_i = u_i^*$, $|u_i| > 1$,
- $(1, u_i) \otimes (1, u_i, u_i^2, \dots) \otimes (1, u_i^*) \otimes (1, u_i^*, u_i^{*2}, \dots)$ pour $u_i \neq u_i^*$, $|u_i| < 1$,
- $(1, u_i) \otimes (\frac{1}{u_i}, \frac{1}{u_i^2}, \dots) \otimes (1, u_i^*) \otimes (\frac{1}{u_i^*}, \frac{1}{u_i^{*2}}, \dots)$ pour $u_i \neq u_i^*$, $|u_i| > 1$.

La contribution de plus grand module vaut toujours 1. Elle est obtenue en couplant le fondamental bosonique avec

- 1 fermion si $|u_i| > 1$, c'est-à-dire si l'orbite est instable,
- le vide fermionique si $|u_i| < 1$, c'est-à-dire si l'orbite est stable.

Ainsi, le fondamental de la contribution d'une orbite périodique classique est obtenu en prenant des états avec autant de fermions qu'il y a de directions instables.

⁴Par souci de simplicité, nous omettons l'indice c caractérisant l'orbite classique dans la suite.

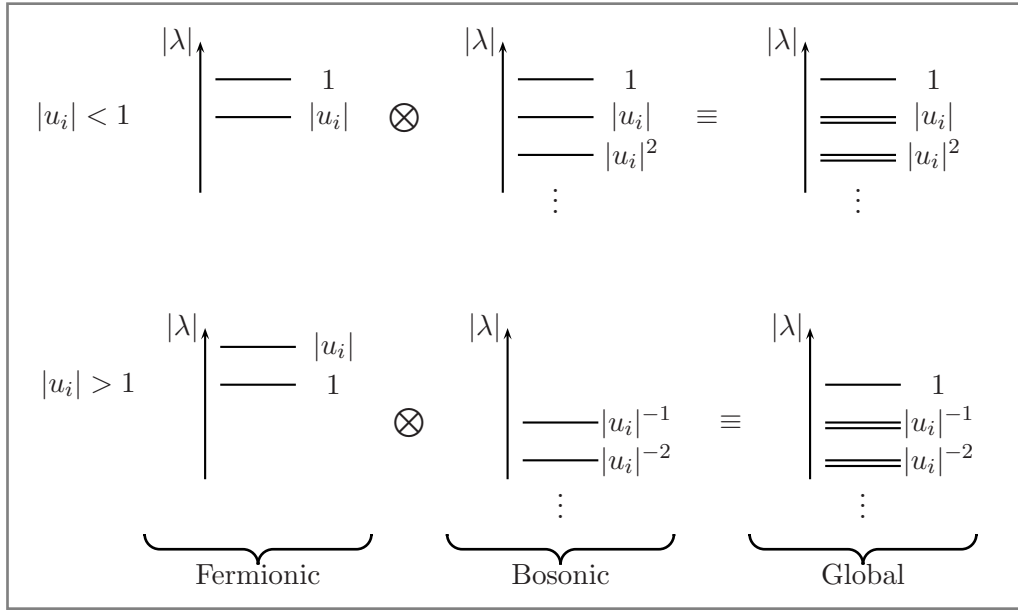


Fig. 7.1 : Structure du spectre pour $|u_i| < 1$ ou $|u_i| > 1$ à l'ordre dominant en T . La contribution globale d'une orbite est le produit tensoriel des parties bosoniques et fermioniques. Il y a un gap d'ordre 1 entre le module de l'état le plus stable et celui du premier excité lorsque T tend vers zéro. La valeur propre de l'état le plus stable est 1. Elle est obtenue en mettant 1 fermion par direction instable.

7.1.2.2 Orbite de période multiple de celle du Hamiltonien

Considérons à présent une orbite périodique primitive⁵ de période $p\tau$. À cette orbite correspondent en réalité p trajectoires différentes, chacune démarrant d'un point décalé d'un temps τ le long de l'orbite (figure 7.2). Pour chaque point initial, la précédente discussion est valide, et l'on obtient pour l'évolution sur un temps $p\tau$ un spectre comme décrit précédemment, mais où chaque niveau est dégénéré p fois (à cet ordre en T). Puisque seules les orbites fermées au temps t comptent dans la trace, la contribution de cette orbite sur n cycles est nulle si n n'est pas un multiple de p et elle est p fois la contribution d'un seul point initial autrement. Cela peut se comprendre si chaque état d'un p -uplet contribue sur un cycle ($t = \tau$) par une des p racines p^e de sa contribution sur p cycles : la somme des p différentes racines élevées à la puissance n étant non nulle si et seulement si p divise n .

Soulignons que l'invalidité de (7.14), par exemple parce qu'un des $|u_i| = 1$, traduit le fait que le spectre n'est plus la superposition de spectres harmoniques de fréquences d'ordre 1 et que le trou spectral entre l'état fondamental et le premier niveau excité tombe à zéro avec T . Dans de telles circonstances, la contribution des u_i tels que $|u_i| \neq 1$ est telle que décrite précédemment, et les autres degrés de liberté, correspondant à des directions où $|u_j| = 1$,

⁵qui n'est donc pas la répétition d'une orbite de période plus courte.

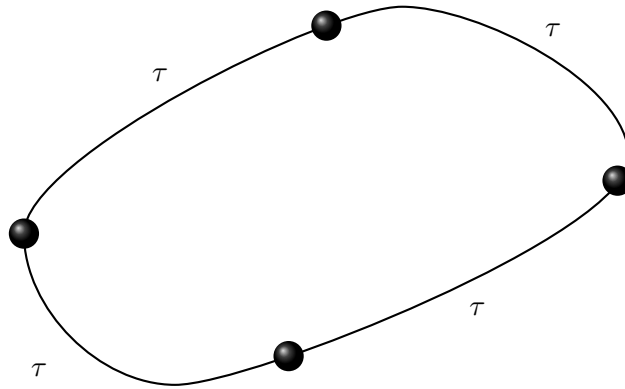


Fig. 7.2 : À une orbite primitive de période 4τ correspondent en réalité 4 orbites, décalées de τ dans le temps le long de la trajectoire.

doivent être traitées différemment (par exemple via des coordonnées collectives).

Le principal résultat de cette section est de montrer qu'à chaque orbite est associé un et un seul état propre de l'opérateur d'évolution, avec une valeur propre 1, à cet ordre en T . Cet état propre a k fermions si $U^c(\tau)$ a k valeurs propres de module supérieur à 1, c'est-à-dire si son indice de Morse est k .

7.2 Hamiltonien non dépendant du temps et théorie de Morse

7.2.1 Fermions, formes différentielles et topologie

On peut montrer (voir annexe **F**) que les fermions sont une représentation des formes différentielles de l'espace des phases. L'espace de Hilbert \mathbb{H} , somme directe des différents secteurs fermioniques, est alors vu comme la somme directe des sous-espaces engendrés par les 0-formes, 1-formes, 2-formes, etc... On montre dans cette représentation que Q correspond à la différentielle extérieure. Ainsi les états propres qui sont tués par Q représentent des formes différentielles fermées tandis que ceux qui sont dans son image correspondent à des formes exactes. Finalement, les formes différentielles qui sont fermées sans être exactes correspondent aux états propres isolés (tués par Q sans être dans son image). Ils engendrent un espace isomorphe au k^e groupe de cohomologie de De Rham, dont la dimension est le k^e nombre de Betti B_k (annexe **F**). L'importance de ces formes différentielles vient de leur forte connexion avec la topologie de l'espace sur lequel elles sont définies. Par exemple, sur un ouvert étoilé de \mathbb{R}^n , toutes les formes différentielles fermées sont exactes (c'est un théorème dû à Poincaré), alors que sur $\mathbb{R}^2 - \{(0, 0)\}$, la forme différentielle

$$\omega = \frac{-x dy + y dx}{x^2 + y^2} \quad (7.20)$$

est fermée sans être exacte⁶. Le changement de topologie dû au « trou » en $(0, 0)$ s'est donc traduit par l'apparition de formes différentielles fermées, non exactes. On peut montrer que dans ce cas, il existe une seule classe d'équivalence de telles formes, ce qui correspond à avoir un nombre de Betti $B_1 = 1$.

Grâce à l'organisation du spectre supersymétrique, nous allons pouvoir déduire un certain nombre de relations entre les différents B_k et déduire ainsi les inégalités fortes de Morse.

7.2.2 Inégalités de Morse

Si le système est conservatif et ne dépend pas du temps, les seules orbites périodiques classiques en présence de friction sont les points fixes. Il est facile de s'en convaincre en utilisant (7.6) :

$$\frac{d\mathcal{H}}{dt} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \dot{q}_i^c + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} p_i^c = -\gamma \sum_i \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right)^2 \quad (7.21)$$

Puisque l'énergie le long d'une orbite doit être périodique, la seule possibilité lorsque $\gamma \neq 0$ est que celle-ci soit constante et donc $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = 0$. Si le Hamiltonien est de la forme $\mathcal{H} = \frac{1}{2} \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{q})$, cela implique $p_i^c = 0$ et $q_i^c = \text{constant}$. De plus, $p_i^c = C^{st}$ impose $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} = 0$. Pour un Hamiltonien plus général, cette implication doit être vérifiée, mais elle est en général vraie, sauf dans des cas pathologiques⁷.

Pour tout point fixe x^c , les valeurs propres u_i^c de $U^c(t)$ sont :

$$u_i^c = e^{-A_i^c t} \quad (7.22)$$

où les A_i^c sont les valeurs propres (en général complexes) de $A_{ij}[x_c]$ (cf. équations (7.10) et (7.13)). L'indice de Morse d'un tel point critique est le nombre de valeurs propres telles que $|u_i^c| > 1$, ou de manière équivalente $\text{Re } A_i^c < 0$. Le résultat de la section précédente implique d'une part que tous les modules des valeurs propres de e^{-tH} sont à cet ordre en T plus petits ou égaux à 1 et d'autre part que le nombre M_k de valeurs propres qui valent 1 dans le sous-espace à k fermions coïncide avec le nombre de points critiques d'indice k .

Aux grands temps t , nous avons par conséquent :

$$\lim_{t \rightarrow \infty} T(\lambda, t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \sum_k \lambda^k \text{Tr} (e^{-tH})|_{k \text{ ferm.}} = \sum_k \lambda^k M_k \quad (7.23)$$

parce que les valeurs propres de e^{-tH} de module plus petit que 1 sont supprimées exponen-

⁶Vérifier qu'elle est fermée est immédiat et son intégrale le long du cercle unité vaut 2π , alors qu'elle vaudrait 0 si la forme était exacte.

⁷Par exemple, si les points où $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} = 0$ sont isolés dans les directions des p_i , alors cette hypothèse est vérifiée. C'est, par exemple, le cas lorsque $\mathcal{H} = (p - f(q))^2 + V(q)$. Dans des cas plus exotiques, par exemple si l'espace des phases est périodique en p et $\mathcal{H} = f(q)g(p) + h(q)$ avec $f(q_0) = f'(q_0) = 0$, la solution correspondant à $q = q_0$ et $p = h'(q_0)t$ est une orbite périodique qui n'est pas localisée sur un point critique.

tiellement. Par ailleurs :

$$\begin{aligned} T(\lambda, t) &= \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k \text{Tr} (e^{-tH}) \Big|_{k \text{ ferm.}} \\ &= \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k \text{Tr} (e^{-tH}) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{isolés}} + \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k \text{Tr} (e^{-tH}) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{appariés}} \end{aligned} \quad (7.24)$$

où les indices traduisent le fait que les traces sont prises sur des sous-espaces générés par des vecteurs propres « appariés » ou « isolés », tels qu'ils ont été définis à la section 5.2.2.2. Introduisons à présent les traces partielles :

$$R_k(t) \equiv \text{Tr} (e^{-tH}) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{états appariés tués par } \bar{Q}} \quad (7.25)$$

Tenant compte de l'appariement du spectre (figure 5.1), du fait que les vecteurs propres « isolés » sont de valeur propre nulle et que les dimensions des sous-espaces qu'ils génèrent sont les nombres de Betti (cf. Section 5.2.2.2), il vient

$$\begin{aligned} T(\lambda, t) &= \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k B_k + \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k (R_k(t) + R_{k-1}(t)) \\ \lim_{t \rightarrow \infty} T(\lambda, t) &= \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k B_k + \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k (R_k(\infty) + R_{k-1}(\infty)) \end{aligned} \quad (7.26)$$

où les $R_k(\infty)$ sont des entiers : le nombre de vecteurs propres appariés, annihilés par \bar{Q} , ayant une valeur propre nulle à l'ordre dominant en T^{-1} . En mettant ensemble (7.23) et (7.26), nous obtenons finalement :

$$M_k = B_k + R_k(\infty) + R_{k-1}(\infty). \quad (7.27)$$

Puisque $R_k(\infty) > 0$ (sauf $R_{-1}(\infty) = 0$), on déduit de la formule précédente les inégalités fortes de Morse :

$$\forall p \quad \sum_{k=0}^p (-1)^k B_{p-k} \leq \sum_{k=0}^p (-1)^k M_{p-k} \quad (7.28)$$

Un calcul simple montre que pour \mathcal{H} de la forme $\frac{1}{2}\mathbf{p}^2 + V(\mathbf{x})$, l'indice défini comme le nombre de valeurs propres de partie réelle négatives tend lorsque $\gamma \rightarrow 0$ vers l'indice usuel, défini comme le nombre de valeurs propres négatives de la Hessienne du potentiel V .

7.3 Une approche WKB

Dans cette section nous ne considérons que des Hamiltoniens de la forme

$$\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + V(\mathbf{q}) \quad (7.29)$$

En suivant un traitement standard de type WKB, on reconstruit la théorie de Morse d'une manière très similaire à l'approche développée dans le cas purement dissipatif par Witten [186, 196].

7.3.1 Forces conservatives

Dans le cas d'un processus de Langevin (sans inertie), l'opérateur de Fokker-Planck n'est pas hermitien, mais il peut être mis sous forme hermitienne grâce à une transformation symétrique et réelle [158, 186] tant que les forces en présence sont conservatives, i.e. dérivent globalement d'un potentiel. C'est également le cas de l'extension supersymétrique de cet opérateur et l'on obtient alors une mécanique quantique supersymétrique hermitienne. Dans le cas de Kramers, H ne peut pas être mis sous une forme hermitienne, ce qui est une source de difficultés non négligeable. Dans cette section, nous allons nous pencher plus particulièrement sur un cas pour lequel la discussion se simplifie considérablement, celui d'un Hamiltonien de la forme (7.29) pour lequel H s'écrit :

$$H = \sum_{i=1}^N \left[-\gamma T \frac{\partial^2}{\partial p_i^2} - \frac{\partial V}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \gamma - \gamma p_i \frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{\partial}{\partial q_i} p_i \right] + \sum_{i,j=1}^N \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} b_i^\dagger a_j + \sum_{i=1}^N \left[\gamma b_i^\dagger b_i - a_i^\dagger b_i \right] \quad (7.30)$$

On vérifie simplement que H , Q and \bar{Q} sont alors reliés à leur adjoint par ⁸

$$H^\dagger = RHR^{-1} \quad R\bar{Q}R^{-1} = Q^\dagger \quad RQR^{-1} = \bar{Q}^\dagger \quad (7.31)$$

où R est un opérateur réel, hermitien et inversible, défini par

$$R = R^\dagger = e^{\frac{\pi}{T}} P J, \quad \text{où } P|\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p})\rangle = |\psi(\mathbf{q}, -\mathbf{p})\rangle$$

$$J = \prod_i [1 + a_i^\dagger b_i + b_i^\dagger a_i - a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i + \gamma a_i^\dagger a_i + (\gamma - 2)a_i^\dagger b_i^\dagger a_i b_i] \quad (7.32)$$

L'équation (7.31) implique alors :

$$\tilde{H} \equiv R^{1/2*} H R^{-1/2*} = \left(R^{1/2} H R^{-1/2} \right)^\dagger \quad (7.33)$$

ce qui signifie que si $R^{1/2}$ était réel, \tilde{H} serait hermitien. Toutefois, ce n'est génériquement pas le cas. Nous allons montrer ci-dessous un résultat plus faible, qui permet néanmoins de récupérer une grande partie de la structure de la mécanique quantique supersymétrique hermitienne : R est défini positif – et donc $R^{1/2}$ est réel – *lorsqu'il est restreint aux sous-espaces propres de faible valeur propre*.

7.3.2 Approximation gaussienne

Dans le cas usuel de la mécanique quantique supersymétrique, il est pratique de travailler dans la base où H est hermitien, car les vecteurs propres en dessous du gap sont alors localisés sur les points fixes du potentiel. Procéder de manière analogue reviendrait ici à se placer dans une base intermédiaire, via $R^{1/2}$. Puisque $R^{1/2}$ est en général non hermitien, H n'est pas hermitien dans cette base, simplement symétrique (et complexe) ($H^* = H^\dagger$). Nous allons

⁸ En fait, cette symétrie est valide de manière plus générale pour un système en présence de forces conservatives et dont l'énergie est symétrique sous la réflexion de \mathbf{p} : $H(\mathbf{q}, -\mathbf{p}) = \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p})$.

plutôt introduire une autre base $|\psi^{hR}\rangle = e^{\frac{\beta\mathcal{H}}{2}}|\psi^R\rangle$ et montrer que les vecteurs propres $|\psi^{hR}\rangle$ dont les valeurs propres tendent vers zéro avec la température T sont des gaussiennes de variance finie. Changeons tout d'abord de base :

$$\begin{aligned} H' &= e^{\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} H e^{-\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} \\ &= \sum_i \left\{ -\gamma T \frac{\partial^2}{\partial p_i^2} - \frac{\gamma}{2} + \frac{\gamma}{4T} p_i^2 - \frac{\partial V}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} + p_i \frac{\partial}{\partial q_i} + \frac{\partial}{\partial q_i} p_i + \sum_j \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} b_i^\dagger a_j + \gamma b_i^\dagger b_i - a_i^\dagger b_i \right\} \end{aligned} \quad (7.34)$$

Bien que H' ne soit pas hermitien, il s'avère plus pratique que l'Hamiltonien initial. Pour chaque point fixe, nous proposons un ansatz WKB pour les vecteurs propres de plus basse valeur propre :

$$\begin{aligned} |\psi^{hR}\rangle &= |\psi_b^{hR}(\mathbf{q}, \mathbf{p})\rangle \otimes |\psi_f^{hR}\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2T}[B_{q_i q_j}^c (q_i - q_i^c)(q_j - q_j^c) + 2B_{p_i q_j}^c p_i (q_j - q_j^c) + B_{p_i p_j}^c p_i p_j]} \otimes |\psi_f^{hR}\rangle \end{aligned} \quad (7.35)$$

Dans l'annexe **H**, nous montrons que les gaussiennes ainsi définies ont une variance finie. Cela est dû au fait que la matrice \mathbf{B} dans (7.35) est définie positive, *contrairement au cas de la base initiale* où un tel ansatz gaussien ne serait pas possible⁹. Pour conclure, nous voyons que les vecteurs propres de valeur propre nulle à l'ordre dominant en T , sont, dans cette base, des gaussiennes centrées sur les points critiques : ceux avec k fermions sur des points cols d'indice k . Si cela est très proche du cas sans inertie, notons toutefois que les vecteurs droits et gauches de H' ne se correspondent pas, traduisant le caractère non hermitien de cet opérateur.

7.3.3 Sous-espace propre de valeur propre nulle

Dans la mécanique quantique supersymétrique usuelle, les vecteurs propres de valeur propre nulle sont annulés à la fois par Q et \bar{Q} . Cela se voit dans la base où H est hermitien, puisque Q et \bar{Q} y sont hermitiens conjugués. Dans le cas présent, la preuve est à nouveau plus technique. D'après (7.31)

$$RH = Q^\dagger RQ + \bar{Q}^\dagger R\bar{Q} \quad (7.36)$$

Clairement, les vecteurs $|\psi\rangle$ qui sont tués par H et RH sont les mêmes, et ils doivent satisfaire :

$$\langle \psi | RH | \psi \rangle = \langle \psi | Q^\dagger RQ | \psi \rangle + \langle \psi | \bar{Q}^\dagger R\bar{Q} | \psi \rangle = \langle Q\psi | R | Q\psi \rangle + \langle \bar{Q}\psi | R | \bar{Q}\psi \rangle = 0 \quad (7.37)$$

Si R était défini positif, cela impliquerait immédiatement que $Q|\psi\rangle$ et $\bar{Q}|\psi\rangle$ sont nuls. En fait, comme mentionné précédemment, R n'est *pas* défini positif, mais on peut montrer que c'est le cas de sa restriction au sous-espace de valeur propre nulle (à l'ordre dominant en

⁹Les états propres dans la base initiale sont constants le long des chemins de réaction et non concentrés sur les points critiques, cf. section 6.2. B admet donc des valeurs propres nulles, qui correspondraient à des directions de variance infinie.

T). Ce sous-espace contient en particulier les vecteurs propres dont les valeurs propres sont exactement zéro. Pour le montrer, nous développons un vecteur propre de valeur propre nulle $|\phi\rangle$ comme dans la section précédente :

$$|\phi\rangle = \sum_c \alpha^c e^{-\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} |g^c\rangle \otimes |f^c\rangle \quad (7.38)$$

où la somme porte sur tous les points critiques ‘ c ’ de $V(q)$. $|g^c\rangle$ est une gaussienne normalisée centrée sur le point critique tandis que $|f^c\rangle$ correspond à la partie fermionique de l’état propre. Calculons à présent $\langle\phi|R|\phi\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\phi|R|\phi\rangle &= \sum_{c,c'} \alpha^c \alpha^{c'*} \langle e^{-\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} g^c \otimes f^c | e^{\beta\mathcal{H}} P J | e^{-\frac{\beta\mathcal{H}}{2}} g^{c'} \otimes f^{c'} \rangle \\ &= \sum_{i,j} \alpha^c \alpha^{c'*} \langle g^c | P | g^{c'} \rangle \langle f^c | J | f^{c'} \rangle \end{aligned} \quad (7.39)$$

Deux gaussiennes centrées sur deux points critiques distincts ont une superposition nulle dans la limite de faible température :

$$\langle g^c | P | g^{c'} \rangle = \delta_{c,c'} C^c \quad \text{avec} \quad C^c > 0 \quad (7.40)$$

et le produit scalaire se réduit à

$$\langle\phi|R|\phi\rangle = \sum_c |\alpha^c|^2 C^c \langle f^c | J | f^c \rangle \quad (7.41)$$

Il reste à montrer que la contribution fermionique est positive. En supposant que l’on a diagonalisé la matrice des dérivées secondes du potentiel au niveau de chaque point critique, on a pour chaque direction i (cf. annexe (H)) :

- soit $V_{ii} > 0$ et alors

$$\langle f_i^c | J | f_i^c \rangle = 1 \quad (7.42)$$

- soit $V_{ii} < 0$ et

$$\langle f_i^c | J | f_i^c \rangle = 2[\gamma^2(\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4V_{ii}}) - 2V_{ii}(2\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4V_{ii}})] > 0 \quad (7.43)$$

Nous avons ainsi montré que dans tous les cas, à l’intérieur du sous-espace considéré,

$$\langle\phi|R|\phi\rangle > 0 \quad \text{ou} \quad |\phi\rangle = 0 \quad (7.44)$$

ce qui, appliqué à (7.37), implique que les vecteurs propres avec des valeurs propres exactement nulles sont « isolés », tout comme dans la mécanique quantique supersymétrique usuelle.

Au prix d’une perte de généralité, cette approche WKB montre d’une manière plus intuitive l’organisation du spectre en dessous du gap. Les vecteurs propres peuvent être vus, dans une base intermédiaire, comme des gaussiennes centrées sur les points critiques. Ce développement gaussien montre en particulier qu’il n’y a pas d’appariement dans le sous-espace de valeur propre nulle.

7.4 Supersymétrie et dépendance temporelle

Dans ce chapitre, nous traitons spécifiquement le cas où $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$ dépend périodiquement du temps et noterons τ sa période. Nous introduisons dans un premier temps le formalisme de Floquet et étendrons par la suite la supersymétrie à ce cas plus général. Nous montrerons alors comment on peut redériver la formule de Lefschetz. Dans le cas où la friction est suffisante pour empêcher la prolifération d'orbites de période longue, nous démontrons à nouveau les inégalités fortes de Morse.

7.4.1 Théorie de Floquet

L'équation de Fokker-Planck associée au problème de Kramers peut s'écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\rangle = -H_K(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t) |\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\rangle \quad (7.45)$$

La théorie de Floquet repose sur la recherche de solutions sous la forme

$$|\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\rangle = |u(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\rangle e^{-\lambda t} \quad (7.46)$$

où $|u(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\rangle$ est périodique de période τ . La partie imaginaire de λ peut être choisie dans la première « zone de Brillouin » $[-\frac{\pi}{\tau}, \frac{\pi}{\tau}]$. L'équation (7.45) devient alors :

$$(H_K + \frac{\partial}{\partial t}) |u(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\rangle = \lambda |u(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\rangle \quad (7.47)$$

Une manière alternative d'introduire le formalisme de Floquet [96] est de partir de l'équation stochastique. En introduisant une variable θ qui croît linéairement au cours du temps, nous pouvons réécrire l'équation de Langevin (5.34) comme un système évoluant avec un Hamiltonien indépendant du temps $\mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta)$:

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} - \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \sqrt{2\gamma T} \eta_i \\ \dot{\theta} = 1 \end{cases} \quad (7.48)$$

où $\theta(0) = 0$ (7.49)

Cette approche est très similaire au traitement des Hamiltoniens dépendants du temps en mécanique classique¹⁰. L'équation (7.47) mène à un opérateur de Kramers dans l'espace $(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \theta)$:

$$\mathbb{H}_K = -\gamma \sum_{i=1}^N \frac{\partial}{\partial p_i} \left(T \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} \quad (7.50)$$

¹⁰On parle alors de système à $N + \frac{1}{2}$ degrés de liberté.

Pour construire la supersymétrie correspondante, on généralise tout d'abord l'opérateur Q en introduisant un nouveau couple d'opérateurs fermioniques a_θ et a_θ^\dagger :

$$\mathbb{Q} \equiv Q - i a_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} = -i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial q_i} a_i + \frac{\partial}{\partial p_i} b_i \right) - i \frac{\partial}{\partial \theta} a_\theta \quad (7.51)$$

On peut alors généraliser \mathbb{H}_K en lui ajoutant des termes fermioniques :

$$\begin{aligned} \mathbb{H} \equiv \mathbb{H}_K &+ \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} b_i^\dagger a_j + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} b_i^\dagger b_j - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} a_i^\dagger b_j + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} (\gamma b_j^\dagger a_i + b_i^\dagger b_j - a_j^\dagger a_i) \\ &+ \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial \theta} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial \theta} \right) b_i^\dagger a_\theta - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial \theta} a_i^\dagger a_\theta \end{aligned} \quad (7.52)$$

\mathbb{H} commute avec \mathbb{Q} et nous pouvons également construire la seconde charge :

$$\bar{\mathbb{Q}} = -i \left[b_i^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial q_i} + \gamma \frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} + \gamma \frac{1}{T} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) - a_i^\dagger \left(\frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{1}{T} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) - a_\theta^\dagger \right] \quad (7.53)$$

qui satisfait
$$\bar{\mathbb{Q}}^2 = \mathbb{Q}^2 = 0, \quad T[\mathbb{Q}, \bar{\mathbb{Q}}]_+ = T(\mathbb{Q} + \bar{\mathbb{Q}})^2 = \mathbb{H} \quad (7.54)$$

Notons également que a_θ est une symétrie :

$$[\mathbb{H}, a_\theta] = 0 \quad (7.55)$$

qui implique que si $|\psi^R\rangle$ est un vecteur propre à droite de \mathbb{H} , alors $a_\theta |\psi^R\rangle$ est soit un vecteur propre dégénéré, soit nul. Dans les sections qui suivent, nous utilisons la supersymétrie pour étudier les vecteurs propres et déduire des relations entre les nombres de trajectoires périodiques.

7.4.2 Structure du spectre – quadruplets

Nous allons montrer ici que les vecteurs propres à droite sont dupliqués de la manière suivante : on peut construire une base $\{|\psi^0\rangle\} \equiv \{|\phi_i^0\rangle, |\chi_i^0\rangle, |\rho_i^0\rangle\}$ du sous-espace annihilé par a_θ qui satisfait (5.58) et la compléter par une famille libre dégénérée $\{|\psi^\theta\rangle\} \equiv \{|\phi_i^\theta\rangle, |\chi_i^\theta\rangle, |\rho_i^\theta\rangle\}$ dont les composantes suivant a_θ^\dagger sont non nulles. Cette base satisfait (cf. figure 7.3) :

$$\begin{aligned} a_\theta |\chi_i^0\rangle &= 0 & a_\theta |\phi_i^0\rangle &= 0 & a_\theta |\rho_i^0\rangle &= 0 \\ a_\theta |\chi_i^\theta\rangle &\sim |\chi_i^0\rangle & a_\theta |\phi_i^\theta\rangle &\sim |\phi_i^0\rangle & a_\theta |\rho_i^\theta\rangle &\sim |\rho_i^0\rangle \\ \mathbb{Q} |\phi_i^0\rangle &= |\chi_i^0\rangle & \mathbb{Q} |\rho_i^0\rangle &= 0 & \forall |\psi\rangle \mathbb{Q} |\psi\rangle &\neq |\rho_i^0\rangle \\ \bar{\mathbb{Q}} |\phi_i^0\rangle &= |\phi_i^\theta\rangle & \bar{\mathbb{Q}} |\phi_i^\theta\rangle &= |\chi_i^\theta\rangle & \bar{\mathbb{Q}} |\rho_i^0\rangle &= |\rho_i^\theta\rangle \end{aligned} \quad (7.56)$$

Pour construire une base telle que (7.56), on commence par noter que la procédure suivie dans la section 5.2.2.2 est toujours valide pour le sous-espace annihilé par a_θ . On peut

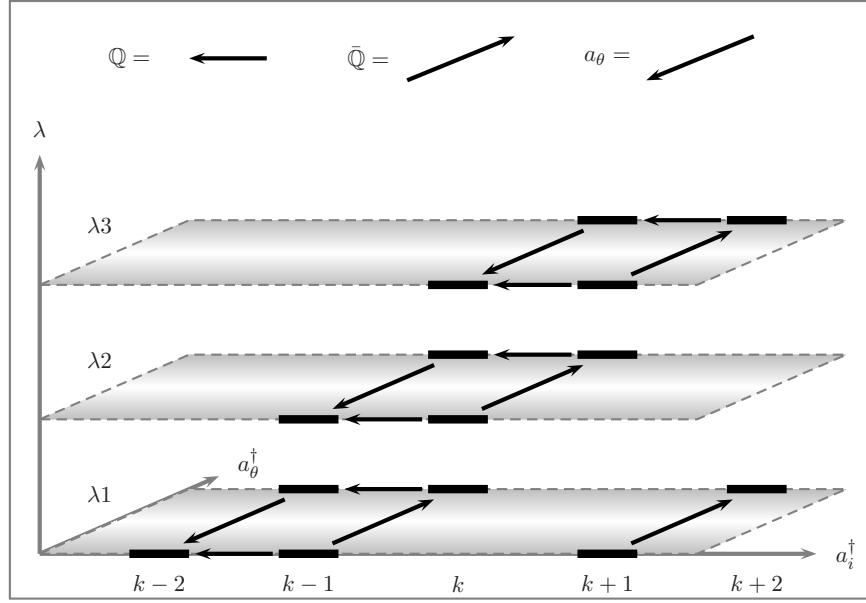


Fig. 7.3 : Structure du spectre de \mathbb{H} . L'axe vertical représente les différentes valeurs propres complexes. Les axes horizontaux représentent le nombre de fermions de type a_θ^\dagger d'une part et le nombre total d'autre part. On peut définir une base de vecteurs propres annihilés par a_θ qui est organisée comme dans le cas indépendant du temps. Elle peut être complétée par une famille libre dégénérée pour construire une base de l'espace complet.

alors construire une base $\{|\rho_i^0\rangle, |\phi_i^0\rangle, |\chi_i^0\rangle\}$ qui satisfait (5.58). Ensuite, on peut définir $\{|\psi^\theta\rangle\}$ comme :

$$\begin{aligned} |\phi_i^\theta\rangle &\equiv \bar{Q}|\phi_i^0\rangle = \bar{Q}|\phi_i^0\rangle + \frac{i}{T}a_\theta^\dagger|\phi_i^0\rangle \\ |\chi_i^\theta\rangle &\equiv Q|\phi_i^\theta\rangle = (Q\bar{Q} + \frac{1}{T}\frac{\partial}{\partial\theta})|\phi_i^0\rangle - \frac{i}{T}a_\theta^\dagger|\chi_i^0\rangle \\ |\rho_i^\theta\rangle &\equiv \bar{Q}|\rho_i^0\rangle = \bar{Q}|\rho_i^0\rangle + \frac{i}{T}a_\theta^\dagger|\rho_i^0\rangle \end{aligned} \quad (7.57)$$

a_θ envoie $\{|\psi^\theta\rangle\}$ sur $\{|\psi^0\rangle\}$ (à un facteur constant près), ce qui montre que $\{|\psi^\theta\rangle\}$ est une famille indépendante. La famille complète est évidemment également indépendante, elle génère tous les vecteurs annihilés par a_θ , grâce à la famille $\{|\psi^0\rangle\}$. En particulier, elle génère la famille $\{|\psi^0\rangle, |a^\dagger\psi^0\rangle\}$ qui est une base de l'espace complet.

Étudions la famille $\{|\rho_i^0\rangle\}$. Ces vecteurs sont annihilés par Q sans être dans son image. La dimension de l'espace qu'ils génèrent dans l'espace à k fermions est le k^e nombre de Betti B_k de l'espace des phases $\{\mathbf{p}, \mathbf{q}\}$ (cf. section 5.2.2.2). La dimension de l'espace généré par $\{|\rho_i^\theta\rangle\}$ dans le secteur à k fermions est alors égale à B_{k-1} (cf. figure 7.3). Dans tout ce qui suit, nous appellerons respectivement états « appariés » et « isolés » les vecteurs propres générés par $\{|\chi_i^0\rangle, |\phi_i^0\rangle, |\chi_i^\theta\rangle, |\phi_i^\theta\rangle\}$ et $\{|\rho_i^0\rangle, |\rho_i^\theta\rangle\}$.

Comme dans toute représentation de Floquet, le spectre est organisé en zones de Brillouin. Cela peut être vu de la manière suivante : considérons la famille d'opérateurs périodiques $O_m = e^{2\pi im\theta/\tau}$ où m est un entier. Clairement, $[\mathbb{H}, O_m] = \frac{2\pi im}{\tau}O_m$, ce qui implique que

si $|\psi^R\rangle$ est un vecteur propre associé à la valeur propre λ , alors $O_m|\psi^R\rangle$ est également un vecteur propre, de valeur propre $\lambda + \frac{2\pi im}{\tau}$. Cette redondance est éliminée lorsque l'on considère l'opérateur $e^{-n\tau\mathbb{H}}$ restreint à un point de départ particulier pour θ :

$$\mathrm{Tr} \left(\langle \theta = n\tau \mid e^{-n\tau\mathbb{H}} \mid \theta = 0 \rangle \right) \Big|_{\text{reste}} = \mathrm{Tr} \left[\mathcal{T} e^{\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right] \quad (7.58)$$

où « reste » signifie que la trace est prise sur toutes les variables (fermions compris) sauf θ et où $H(t)$ est donné par

$$\begin{aligned} H(t) \equiv & -\frac{\partial}{\partial p_i} \left(\gamma T \frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} + \gamma \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \right) + \frac{\partial}{\partial q_i} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} b_i^\dagger a_j + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} b_i^\dagger b_j \\ & - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} a_i^\dagger b_j + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} (\gamma b_j^\dagger a_i + b_i^\dagger b_j - a_j^\dagger a_i) + \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial t} + \gamma \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial t} \right) b_i^\dagger a_\theta - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial t} a_i^\dagger a_\theta. \end{aligned} \quad (7.59)$$

7.4.3 Trace de l'opérateur d'évolution

Commençons par introduire une fonction génératrice, comme dans la section précédente. En choisissant comme point de départ $\theta = 0$, nous pouvons calculer :

$$T(\lambda, n\tau) \equiv \sum_k \lambda^k \mathrm{Tr} \left(\langle \theta = n\tau \mid e^{-n\tau\mathbb{H}} \mid \theta = 0 \rangle \right) \Big|_{k \text{ ferm}}^{\text{reste}} = \sum_k \lambda^k \mathrm{Tr} \left(\mathcal{T} e^{\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm}} \quad (7.60)$$

Dans le secteur à k fermions, elle est divisée en deux parties :

$$T_k = \mathrm{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}} = \mathrm{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{isolés}} + \mathrm{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{appariés}} \quad (7.61)$$

Montrons tout d'abord que les vecteurs propres isolés ont une valeur propre nulle. Supposons $H|\rho_i^0\rangle = \lambda|\rho_i^0\rangle$ sans que λ soit un multiple (entier) de $i\frac{2\pi}{\tau}$, i.e. $\lambda \neq 0$ à l'intérieur de la première zone de Brillouin. Puisque Q et a_θ annihilent $|\rho_i^0\rangle$

$$\frac{1}{T} H|\rho_i^0\rangle = \mathbb{Q}\bar{\mathbb{Q}}|\rho_i^0\rangle = \frac{\lambda}{T} |\rho_i^0\rangle \quad (7.62)$$

De plus, comme $\mathbb{Q} = Q - ia_\theta \frac{\partial}{\partial \theta}$, (7.62) peut être écrite :

$$Q\bar{\mathbb{Q}}|\rho_i^0\rangle = \left(\lambda - \frac{\partial}{\partial \theta} \right) |\rho_i^0\rangle \quad (7.63)$$

Par ailleurs, puisque λ est non nulle dans la première zone de Brillouin, l'opérateur $\mathcal{O} \equiv \lambda - \frac{\partial}{\partial \theta}$ agissant sur des fonctions périodiques de θ est inversible. Comme $[Q, \mathcal{O}] = 0$, on voit également que $[Q, \mathcal{O}^{-1}] = 0$. Finalement, (7.63) se lit alors :

$$Q \left(\frac{T}{\lambda} \mathcal{O}^{-1} \bar{\mathbb{Q}} |\rho_i^0\rangle \right) = |\rho_i^0\rangle \quad (7.64)$$

ce qui contredit le fait que $|\rho_i^0\rangle$ n'est pas apparié par Q . Cela montre que les vecteurs isolés ont des valeurs propres nulles et que prendre une trace sur ceux-ci donne simplement leur nombre :

$$\mathrm{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{isolés}} = B_k + B_{k-1} \quad (7.65)$$

de telle manière que

$$T(\lambda, n\tau) = (1 + \lambda) \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k B_k + \sum_k \lambda^k \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{appariés}} \quad (7.66)$$

Par ailleurs, en raison de la structure en quadruplets,

$$\text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{appariés}} = \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{paires avec } a_\theta^\dagger} + \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{paires sans } a_\theta^\dagger} \quad (7.67)$$

ce qui mène à (cf. figure 7.3)

$$\begin{aligned} T(\lambda, n\tau) &= (1 + \lambda) \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k B_k + (1 + \lambda) \sum_k \lambda^k \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm.}}^{\text{sans } a_\theta} \\ &= (1 + \lambda) \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k B_k + (1 + \lambda) \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k (R_k(n\tau) + R_{k+1}(n\tau)) \end{aligned} \quad (7.68)$$

où nous avons à nouveau nommé $R_k(n\tau)$ les traces partielles de $e^{-n\tau\mathbb{H}}$ sur les états à k fermions annihilés par a_θ et mais pas par \mathbb{Q} .

Procédons à présent au calcul semiclassique de la trace. Comme nous avons besoin uniquement de la trace restreinte aux vecteurs de composante nulle suivant a_θ , tous les calculs menés à la section 7.2.2 peuvent être suivis tels quels. En effet, les deux derniers termes de (7.59) qui sont absents dans (5.45) sont nuls dans ce sous-espace. Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} T(\lambda, n\tau) &= \sum_k \lambda^k \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm}} \\ &= (1 + \lambda) \sum_k \lambda^k \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{\int_0^{n\tau} H(t) dt} \right) \Big|_{k \text{ ferm}}^{\text{sans } \theta} \\ &\xrightarrow{T \rightarrow 0} (1 + \lambda) \sum_{\substack{\text{orbites} \\ \text{classiques } c}} \frac{\det(1 + \lambda U^c(n\tau))}{|\det(1 - U^c(n\tau))|} \end{aligned} \quad (7.69)$$

de manière à ce qu'on obtienne in fine :

$$\sum_{\substack{\text{orbites} \\ \text{classiques } c}} \frac{\det(1 + \lambda U^c(n\tau))}{|\det(1 - U^c(n\tau))|} = \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k B_k + \sum_{k=0}^{2N} \lambda^k (R_k(n\tau) + R_{k+1}(n\tau)) \quad (7.70)$$

Pour $\lambda = -1$, on retrouve la formule de Lefschetz :

$$\forall n > 0, \quad \sum_{\substack{\text{orbites} \\ \text{classiques } c}} \text{sign} \left(\det(1 - U^c(n\tau)) \right) = \sum_{k=0}^{2N} (-1)^k B_k \quad (7.71)$$

On peut également obtenir les inégalités fortes de Morse quand le nombre total d'orbites périodiques est fini. Tel est, par exemple, le cas lorsque la friction est suffisamment forte et les forces dépendants du temps suffisamment faibles.

Considérons tout d'abord le cas où il y a seulement des orbites périodiques de période τ (par exemple pour une évolution dissipative, adiabatique). On se concentre sur une orbite et la matrice $U^c(\tau)$ correspondante, de valeurs propres $u_{i_1}, \dots, u_{i_{2N}}$. En ordonnant les u_i de manière à ce que u_{i_1}, \dots, u_{i_r} vérifient $|u_{i_j}| > 1$ d'une part et $u_{i_{r+1}}, \dots, u_{i_{2N}}$ vérifient $|u_{i_j}| < 1$ d'autre part, l'indice de Morse est alors égal à r par définition. Pour n grand, on calcule alors le membre de gauche de (7.70) :

$$\frac{\det(1 + \lambda U^c(n\tau))}{|\det(1 - U^c(n\tau))|} = \sum_k \lambda^k \sum_{j_1, \dots, j_k} \frac{u_{j_1}^n \dots u_{j_k}^n}{\prod_{i=1}^{2N} |1 - u_i^n|} \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} \sum_k \lambda^k \sum_{j_1, \dots, j_k} \frac{u_{j_1}^n \dots u_{j_k}^n}{|u_{i_1}^n \dots u_{i_r}^n|} = \lambda^r \quad (7.72)$$

puisque les seules contributions qui survivent correspondent à $\{j_1, \dots, j_k\} = \{i_1, \dots, i_r\}$ ¹¹.

Dans la limite $n \rightarrow \infty$, (7.70) devient alors :

$$\sum_{k=0}^{2N} \lambda^k B_k + \sum_k \lambda^k (R_{k+1}(\infty) + R_k(\infty)) = \sum_k \lambda^k M_k \quad (7.73)$$

où M_k est le nombre d'orbites d'indice de Morse k , et $R_k(\infty)$ le nombre de vecteurs propres de \mathbb{H} de valeur propre nulle (à cet ordre en T) annihilés par a_θ et pas par \mathbb{Q} .

Bien que nous ne connaissions pas d'exemple concret, décrivons succinctement comment l'équation (7.73) s'obtiendrait pour un système ayant un nombre *fini* d'orbites périodiques, ayant plusieurs périodes distinctes. Considérons la limite où n est un grand nombre premier. L'évaluation de la trace via l'intégrale de chemin nous dit que nous devons sommer les contributions de toutes les orbites de période $n\tau$, qui correspondent à n répétitions d'orbites de période τ . Par ailleurs, comme nous l'avons vu précédemment, le spectre de $\mathcal{T}e^{-\int_0^\tau H(t)dt}$ contient, en présence d'orbite de période première = $p\tau$, des multiplets proportionnels (à cet ordre) aux p différentes racines de l'unité et leur contribution disparaît de la trace sur n cycles, puisque n étant premier, il n'est pas un multiple de p . Ainsi, la formule (7.73) est toujours valide, mais les $R_k(\infty)$ ne comptent que les vecteurs propres de \mathbb{H} qui ont des valeurs propres nulles à cet ordre en T , sont annihilés par a_θ et pas par \mathbb{Q} et ne sont pas dans un multiplet.

Le fait que les $R_k(\infty)$ soient des entiers positifs dans l'équation (7.73) constitue les inégalités fortes de Morse, valides pour γ relativement grand et/ou de faibles intensités des forces non-conservatives, de manière à ce que le nombre d'orbites périodiques soit fini.

¹¹ On suppose à nouveau que le nombre de valeurs propres réelles inférieures à -1 est pair. Autrement, la contribution est $-\lambda^r$.

Chapitre 8

Conclusion

Dans cette partie, nous avons présenté la formulation supersymétrique de l'équation de Kramers et ses applications les plus simples. Via la forte connexion topologique de la supersymétrie, nous avons pu démontrer les inégalités de Morse et mettre en avant les relations profondes entre le spectre de l'Hamiltonien supersymétrique et les contraintes géométriques de l'espace des phases. En particulier, les états propres de faible valeur propre de H correspondent aux variétés instables des points critiques de l'espace des phases, avec une égalité entre les nombres de fermions et de directions instables des points critiques.

Toutefois, le principal intérêt de ce formalisme est qu'en plus d'un outil mathématique puissant, c'est une source d'informations sur des structures dynamiques pertinentes pour le physicien (chemins de transition, variétés instables, etc...). Plus précisément, la supersymétrie nous a naturellement amenés à définir un courant « réduit », plus pertinent que le courant usuellement déduit de l'équation de Kramers (5.35). Elle nous permet également de construire une méthode simple pour le déterminer numériquement, ce que nous avons fait dans quelques cas d'école. Soulignons à nouveau l'intérêt de ce genre d'approche par rapport à des simulations de type dynamique moléculaire : le temps de convergence est ici d'ordre 1 en T , contre $\exp(1/T)$ dans le cas de simulation directe. De plus, nous avons montré que très peu de connaissances préalables sur les transitions sont nécessaires, et le travail de Mossa et al. confirme que la méthode s'exporte bien vers des cas de plus haute dimensionnalité que ceux que nous avons présentés ici.

Une large part des résultats présentés dans cette troisième partie correspond aux **P1** et **P5**, réalisées en collaboration avec Sorin Tănase-Nicola et Jorge Kurchan.

Chapitre 9

Discussion et perspectives

Les travaux constituant cette thèse sont axés sur l'étude de différentes stratégies dont beaucoup espèrent aujourd'hui qu'elles constitueront un premier pas dans la direction d'une physique statistique hors équilibre. Plus précisément, nous nous sommes concentrés dans les deux premières parties sur l'utilisation du formalisme des grandes déviations (Chap 1-3) avant de présenter dans la troisième une approche supersymétrique de l'opérateur d'évolution d'un système stochastique (Chapitre 4-8). Les résultats de chaque partie étant repris dans leurs conclusions respectives (sections 1.7, 2.5, 3.7 et 8), nous ne les rappellerons que très succinctement et préférerons discuter leur intérêt et les perspectives qu'ils ouvrent.

Dans l'introduction, nous avons présenté les fonctions de grandes déviations comme des outils parfaits pour poser les bases d'une thermodynamique spatio-temporelle hors équilibre. Nous les avons par la suite calculées, simulées, étudiées, utilisées avec profit hors du cadre de la physique statistique, mais il faut reconnaître que, si elles constituent effectivement une approche pertinente pour répondre à un grand nombre de questions, elles ne remplissent pas, à l'heure actuelle, le rôle fondateur que l'on souhaiterait leur voir jouer pour la physique hors équilibre. En effet, on sait que pour de nombreux systèmes¹, les fluctuations d'observables purement statiques ne rendent pas compte d'effets dynamiques importants, comme par exemple l'absence de thermalisation d'un système sur une échelle de temps expérimentale. De plus, lorsque l'on se tourne alternativement vers les grandes déviations d'observables dynamiques, les paramètres intensifs qui leurs sont associés perdent tant leur sens physique que leur utilisation potentielle sous forme de contraintes expérimentales. Ainsi, bien que les fonctions de grandes déviations permettent dans ce cas d'étudier l'« hétérogénéité dynamique » des trajectoires rencontrées, on ne peut à l'heure actuelle parler de thermodynamique spatio-temporelle, le seul régime pertinent du point de vue physique étant celui de température infinie². Notons toutefois que le domaine des grandes déviations est en pleine expansion et rien ne dit que ces manques ne seront pas comblés dans un avenir plus ou moins proche.

De plus, l'absence de fondation d'une physique statistique hors équilibre est un crime

¹C'est par exemple le cas des systèmes cinétiquement contraints [76].

² $\alpha = 0$ décrit la physique du système non biaisé et correspond en physique statistique à $T = \infty$.

pardonnable, d'autant que les fonctions de grandes déviations restent des outils puissants, ayant de nombreuses applications. Ainsi, l'utilisation que nous avons présentée au chapitre 1 d'un thermostat numérique pour la chaotité permet effectivement de localiser des trajectoires rares dans des systèmes macroscopiques. Son potentiel dans le cadre de la mécanique céleste, par exemple pour quantifier les différents niveaux de chaotité du système solaire en accord avec les données expérimentales, est de plus extrêmement attirant. Par ailleurs, sans sortir du domaine de la physique statistique, la simplification offerte par les limites macroscopiques et le rôle d'entropie de macro-état qu'y jouent les fonctions de grandes déviations rend leur détermination importante. Sur ce point, l'utilisation d'algorithmes de réplication, que nous avons étendus au cas du temps continu dans le chapitre 2, devrait permettre une augmentation rapide du nombre de systèmes dont les fonctions de grandes déviations sont connues. Cela permettra alors de vérifier que ces dernières sont bien des outils pertinents, aptes à rendre compte des phénoménologies variées des modèles pour lesquels n'existe aucune approche statistique.

Notons ensuite que l'étude des grandes déviations du profil de densité du SSEP, présentée au chapitre 3, a permis de mettre en évidence un phénomène surprenant. Nous avons en effet montré que les grandes déviations du SSEP hors équilibre peuvent être ramenées à celle d'une chaîne à l'équilibre. Savoir si cette correspondance est exacte ou valide simplement au niveau des grandes déviations est une question ouverte, dont la réponse sera extrêmement intéressante. En effet, une correspondance au niveau microscopique serait surprenante et pourrait donner un éclairage différent sur la solution exacte de modèle. Si au contraire ce résultat n'est valide qu'à la limite hydrodynamique, d'une part il devrait alors être plus général, d'autre part nous aurions mis en évidence un système qui est transformable en un modèle d'équilibre au niveau macroscopique, mais pas lorsque l'on tient compte des corrections de taille finie, ce qui est fort intrigant.

Enfin, l'importance accordée dans cette discussion aux fonctions de grandes déviations ne doit pas éclipser l'intérêt des méthodes alternatives présentées dans la troisième partie. Ces dernières sont en effet remarquablement transversales, faisant le lien entre des études topologiques de l'espace des phases et des problèmes concrets de détermination de chemins de transition en physico-chimie. Le formalisme supersymétrique est, en un mot, une traduction élégante et puissante des connexions entre topologie et dynamique pour les systèmes stochastiques dans la limite de faible bruit. Il mène naturellement à la définition d'objets géométriques pertinents pour l'étude des transitions entre états métastables, dont nous avons proposé une méthode numérique de détermination. L'implémentation faite par Mossa et. al pour l'étude d'un modèle « gros-grain » de cette stratégie est extrêmement encourageante et son utilisation sur des potentiels « tout-atomes » constituerait indéniablement une preuve de sa pertinence pour l'étude de systèmes réalistes.

Annexe A

Bruit conservatif

Pour alléger la notation, nous utiliserons dans cette annexe la convention de sommation implicite sur les indices romains répétés. De plus, on écrira x_i^2 au lieu de $\sum_i x_i^2$.

A.1 Équations du mouvement

Les équations de Hamilton dans leur forme la plus générale s'écrivent :

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \mathcal{H}_{p_i} \\ \dot{p}_i = -\mathcal{H}_{q_i} \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

où l'on note \mathcal{H}_{x_i} en lieu et place de $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x_i}$. On ajoute alors un bruit blanc gaussien $\boldsymbol{\eta}$ ainsi qu'une friction que nous ajustons de manière à garder l'énergie \mathcal{H} constante. Le système (A.1) devient :

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \mathcal{H}_{p_i} \\ \dot{p}_i = -\mathcal{H}_{q_i} - z\mathcal{H}_{p_i} + \sqrt{2\varepsilon}\eta_i \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

où z est choisi tel que $\dot{\mathcal{H}} = 0$. Cette condition s'écrit :

$$\begin{aligned} \dot{\mathcal{H}} &= \mathcal{H}_{q_i}\dot{q}_i + \mathcal{H}_{p_i}\dot{p}_i = \mathcal{H}_{q_i}\mathcal{H}_{p_i} + \mathcal{H}_{p_i} \left(-\mathcal{H}_{q_i} - z\mathcal{H}_{p_i} + \sqrt{2\varepsilon}\eta_i \right) \\ &= -z\mathcal{H}_{p_i}^2 + \sqrt{2\varepsilon}\mathcal{H}_{p_i}\eta_i \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Au final, on choisit :

$$z = \sqrt{2\varepsilon} \frac{\mathcal{H}_{p_i}\eta_i}{\mathcal{H}_{p_i}^2} \quad (\text{A.4})$$

Les équations du mouvement s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \mathcal{H}_{p_i} \\ \dot{p}_i &= -\mathcal{H}_{q_i} - \sqrt{2\varepsilon} \frac{\mathcal{H}_{p_k}\eta_k}{\mathcal{H}_{p_i}^2} \mathcal{H}_{p_i} + \sqrt{2\varepsilon}\eta_i = -\mathcal{H}_{q_i} - \underbrace{\sqrt{2\varepsilon} \left(\delta_{ik} - \frac{\mathcal{H}_{p_i}\mathcal{H}_{p_k}}{\mathcal{H}_{p_i}^2} \right)}_{g_{ik}} \eta_k \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Remarquons ici que g est le projecteur sur la surface d'énergie dans l'espace des impulsions. En effet, g est bien un projecteur :

$$g_{ij}^2 = g_{ik}g_{kj} = \left(\delta_{ik} - \frac{\mathcal{H}_{p_i}\mathcal{H}_{p_k}}{\mathcal{H}_{p_i}^2} \right) \left(\delta_{kj} - \frac{\mathcal{H}_{p_k}\mathcal{H}_{p_j}}{\mathcal{H}_{p_k}^2} \right) = \left(\delta_{ij} - 2\frac{\mathcal{H}_{p_i}\mathcal{H}_{p_j}}{\mathcal{H}_{p_i}^2} + \frac{\mathcal{H}_{p_i}\mathcal{H}_{p_j}\mathcal{H}_{p_k}^2}{\mathcal{H}_{p_i}^2\mathcal{H}_{p_k}^2} \right) = g_{ij} \quad (\text{A.6})$$

De plus, le vecteur normal à la surface d'énergie dans l'espace des impulsions est la restriction du gradient aux variable p_i :

$$V = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{p_1} \\ \vdots \\ \mathcal{H}_{p_N} \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

qui est bien dans le noyau de g :

$$(gV)_i = g_{ij}V_j = \left(\delta_{ij}\mathcal{H}_{p_j} - \frac{\mathcal{H}_{p_i}\mathcal{H}_{p_j}^2}{\mathcal{H}_{p_k}^2} \right) = \mathcal{H}_{p_i} - \mathcal{H}_{p_i} = 0 \quad (\text{A.8})$$

g est donc bien le projecteur parallèlement à \mathcal{H}_p .

Lorsque $\mathcal{H}(q, p) = \frac{p^2}{2} + V(\mathbf{q})$, la dynamique (A.5) se réduit à

$$\begin{cases} \dot{q}_i = p_i \\ \dot{p}_i = -V_{q_i} - \sqrt{2\varepsilon} \frac{p_k \eta_k}{p_i^2} p_i + \sqrt{2\varepsilon} \eta_i = -V_{q_i} + \sqrt{2\varepsilon} g_{ij} \eta_j \end{cases} \quad (\text{A.9})$$

où $g_{ij} = \delta_{ij} - \frac{p_i p_j}{p^2}$. On se restreint dans la suite à ce cas pour alléger le plus possible la notation, mais le raisonnement présenté resterait valable pour un Hamiltonien plus général.

A.2 Équation de Fokker-Planck

L'équation de Langevin ci-dessus n'est complètement définie que lorsque l'on a choisi une prescription pour l'évaluation du préfacteur du bruit¹. Montrons à présent qu'avec une convention de Stratonovich, les mesures microcanoniques sont les distributions stationnaires de l'équation de Fokker-Planck associée. Partant de l'équation de Langevin

$$\dot{\xi}_i = h_i(\xi, t) + \sqrt{2\varepsilon} g_{ij} \Gamma_j \quad (\text{A.10})$$

et utilisant la convention de Stratonovich, on peut définir des coefficients de dérive et de diffusion [158] :

$$D_i = h_i + \varepsilon g_{kj} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x_k} \quad \text{et} \quad D_{ij} = \varepsilon g_{ik} g_{jk} \quad (\text{A.11})$$

Ce qui donne dans le cas présent :

$$\begin{cases} D_{q_i} = p_i & \text{et} & D_{p_i} = -V_{q_i} + \varepsilon g_{p_k p_j} \frac{\partial g_{p_i p_j}}{\partial p_k} \\ D_{p_i p_j} = \varepsilon g_{p_i p_k} g_{p_j p_k} \end{cases} \quad (\text{A.12})$$

¹Le calcul effectué pour montrer que l'énergie est conservée sous-entend une convention de Stratonovich [147].

L'équation de Fokker-Planck se lit alors :

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial t} &= -\frac{\partial}{\partial q_i} p_i + \frac{\partial}{\partial p_i} V_{q_i} + \frac{\partial}{\partial p_i} \varepsilon \left(\frac{\partial}{\partial p_j} g_{p_i p_k} g_{p_j p_k} - g_{p_j p_k} \frac{\partial g_{p_i p_k}}{\partial p_j} \right) \\ &= -\partial_{q_i} p_i + \partial_{p_i} V_{q_i} + \varepsilon \partial_{p_i} (g_{p_i p_k} \partial_{p_j} g_{p_j p_k})\end{aligned}\quad (\text{A.13})$$

En utilisant l'expression explicite de $g_{p_i p_j}$ et le fait que $g_{p_i p_j} p_j = 0$, on trouve :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q_i} p_i + \frac{\partial}{\partial p_i} V_{q_i} + \varepsilon \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{p_i p_j}{\sum_r p_r^2} \frac{\partial}{\partial p_j} \right] \quad (\text{A.14})$$

Considérons à présent l'évolution d'une distribution initiale f ne dépendant que de \mathcal{H} :

$$\frac{\partial f(\mathcal{H})}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial q_i} p_i f(\mathcal{H}) + \frac{\partial}{\partial p_i} V_{q_i} f(\mathcal{H}) + \varepsilon \frac{\partial}{\partial p_i} \left[\frac{\partial}{\partial p_i} f(\mathcal{H}) - \frac{p_i p_j}{p^2} \frac{\partial}{\partial p_j} f(\mathcal{H}) \right] \quad (\text{A.15})$$

En utilisant $\frac{\partial f(\mathcal{H})}{\partial x_i} = f'(\mathcal{H}) \mathcal{H}_{x_i}$, on trouve :

$$\frac{\partial f(\mathcal{H})}{\partial t} = -f'(\mathcal{H}) \left[\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} p_i - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} V_{q_i} \right] + \varepsilon \frac{\partial}{\partial p_i} \left[f'(\mathcal{H}) \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} - \frac{p_i p_j}{p^2} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_j} \right) \right] = 0 \quad (\text{A.16})$$

Nous avons montré comment construire une équation de Langevin qui conserve l'énergie et induit une mesure uniforme sur la surface d'énergie. Notons que l'implémentation de la dynamique (A.5) est potentiellement difficile : il s'agit d'un bruit multiplicatif, ce qui est toujours désagréable numériquement. Toutefois, il existe une implémentation très simple de cette dynamique, qui n'est exacte qu'à l'ordre $\sqrt{\varepsilon dt}$, mais à l'avantage de préserver *exactement* l'énergie. On tire un vecteur $\boldsymbol{\eta}$ sur une sphère de dimension N et de rayon 1, on ajoute $\sqrt{2\varepsilon dt} \boldsymbol{\eta}$ à \boldsymbol{p} , que l'on renormalise ensuite pour maintenir sa norme constante. Cela revient à effectuer la substitution

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \frac{|\boldsymbol{p}|}{|\boldsymbol{p} + \sqrt{2\varepsilon dt} \boldsymbol{\eta}|} \left(\boldsymbol{p} + \sqrt{2\varepsilon dt} \boldsymbol{\eta} \right) \quad (\text{A.17})$$

Au premier ordre en $\sqrt{2\varepsilon dt}$, ceci s'écrit bien :

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \boldsymbol{p} + \sqrt{2\varepsilon dt} \left[\boldsymbol{\eta} - \boldsymbol{p} \frac{\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{\eta}}{|\boldsymbol{p}|^2} \right] \quad (\text{A.18})$$

Si l'on souhaite également conserver l'impulsion totale, on remplace dans ce qui précède η_i par $\eta_i - \frac{1}{N} \sum_j \eta_j$. Notons que ces bruits conservatifs sont bien gaussiens. Cela peut être vérifié soit via le calcul explicite de leur distribution, soit en remarquant qu'ils sont des combinaisons linéaires de bruits gaussiens et donc nécessairement gaussiens.

Annexe B

Une famille de billards

Dès la fin du *XIX*^e siècle dans les travaux de Hadamard [87], qui donna le premier exemple de système chaotique, puis tout au long du *XX*^e siècle, les billards ont été des outils d'étude appréciés des mathématiciens ¹. Nous allons ici nous en servir pour illustrer une transition vers le chaos dans le cas des systèmes hamiltoniens avec interaction de coeur dur.

On considère le mouvement d'une particule sur un billard bidimensionnel dont le contour est défini par une fonction $R(\phi)$, où R correspond au rayon du billard et ϕ à l'angle usuel avec l'axe des abscisses (cf. figure B.3). $R = C^{st}$ correspond par exemple à un billard circulaire. Les particules alternent entre des trajectoires balistiques à vitesse constante et des réflexions spéculaires sur les bords du billard. On peut voir un tel billard comme la limite d'un système hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2} + V(x, y) \quad (\text{B.1})$$

où le potentiel V est nul à l'intérieur du billard et infini à l'extérieur. La chaotité d'un tel système provient de la forme de son contour qui influe sur la séparation de trajectoires voisines lors d'un rebond (cf figure B.1).

Dans le cas d'un billard circulaire, il y a une deuxième intégrale du mouvement en plus de l'énergie cinétique : l'angle χ que fait la trajectoire d'une particule avec le rayon du cercle (figure B.2). Un système de deux degrés de liberté admettant deux constantes du mouvement est intégrable et le billard circulaire nous servira de point de départ pour la transition vers le chaos. On s'intéresse à la famille de billards obtenue en perturbant celui-ci par une fonction périodique :

$$R(\phi) = 1 + \delta \cos(2\phi) \quad (\text{B.2})$$

δ est le paramètre qui règle l'écart au cas intégrable $R = 1$ (fig. B.3).

Pour pouvoir calculer les exposants de Lyapunov de ce système, il faut avoir accès à la

¹Notons toutefois que dans le cas de Hadamard, il s'agissait d'un billard dynamique, c'est à dire du mouvement « balistique » sur une variété de courbure négative constante, dont le rapport avec un billard usuel n'est pas du tout évident !

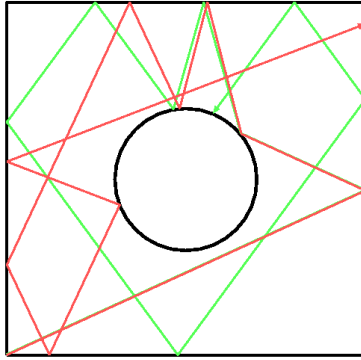


Fig. B.1 : La séparation de deux trajectoires initialement proches augmente exponentiellement avec le nombre de rebonds sur une surface de courbure négative. Les deux trajectoires représentées démarrent du coin en bas à gauche et se séparent significativement au bout de deux rebonds sur le cercle central.

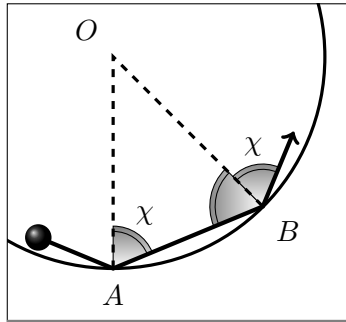


Fig. B.2 : Encart d'un billard circulaire. Le triangle OAB étant isocèle, l'angle χ entre la trajectoire d'une particule et le rayon du cercle est une constante du mouvement.

dynamique tangente. Les phases de vol balistique correspondent à

$$\dot{p} = 0 \quad \dot{q} = p \quad (\text{B.3})$$

ce qui se traduit pour les vecteurs tangents par

$$\dot{u}_p = 0 \quad \dot{u}_q = u_p \quad (\text{B.4})$$

Pour calculer l'évolution des vecteurs tangents lors d'un rebond, il faut analyser séparément l'influence de petites variations de vitesse et de position lors d'un impact. Ceci a été fait entre autres lors des études de gaz de sphères dures [49, 50, 190] et nous présentons ici une rapide démonstration géométrique du résultat.

Les variations de vitesse lors de l'impact sont relativement transparentes, car elles ne modifient pas la position de celui-ci. De plus, une différence de vitesse tangente δv_{\parallel} n'est pas modifiée lors d'un rebond tandis qu'un décalage dans la vitesse normale au contour du billard se retourne (figure B.4.a). De même, un décalage de position suivant la tangente à la pente n'est pas modifié tandis qu'un décalage de position dans la direction normale se renverse

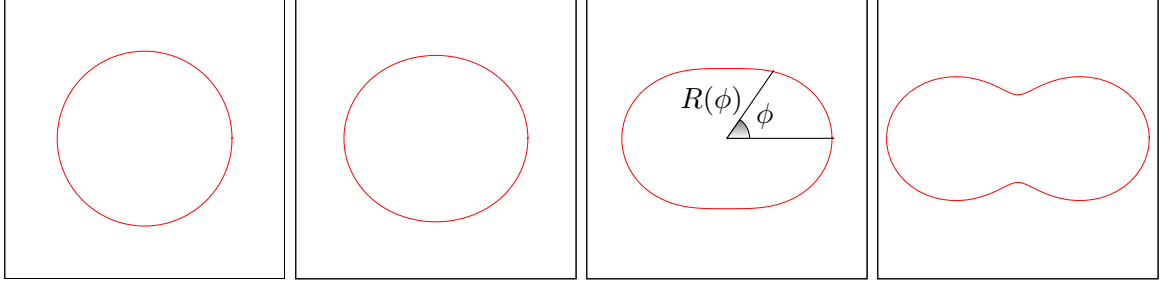


Fig. B.3 : Forme des billards définis par (B.2). Différentes valeurs de δ sont présentées, de gauche à droite : $\delta = 0$; 0.05 ; 0.2 ; 0.5.

(figure B.4.a). Toutefois, les décalages de position d'impact induisent des décalages dans les directions des vitesses après rebonds. La figure B.5 montre la conséquence d'un décalage δx_{\parallel} tangent à la surface. Il induit une modification $2\delta\Xi \frac{\delta x_{\parallel}}{R}$ pour l'angle de sortie Ξ . La composante tangente de la vitesse, qui était $V \cos \Xi$, où V représente le module de la vitesse, devient donc $V \cos \Xi - V \sin \Xi \frac{\delta x_{\parallel}}{R}$. Un décalage δx_{\perp} se traduit par un décalage tangent $\delta x_{\parallel} = \delta x_{\perp} \tan \Xi$. Ainsi, la matrice qui donne l'évolution des vecteurs tangents lors d'un rebond sur un billard bidimensionnel prend la forme suivante dans la base locale $(\delta v_{\parallel}, \delta v_{\perp}, \delta x_{\parallel}, \delta x_{\perp})$:

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \frac{2V \cos \Xi}{R} & \frac{2V \sin \Xi}{R} \\ 0 & -1 & -\frac{2V \sin \Xi}{R} & -\frac{2V \sin^2 \Xi}{R \cos \Xi} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{B.5})$$

où R est le rayon de courbure au niveau de l'impact.

B.1 Section de Poincaré du billard

Ce système possède deux degrés de liberté et l'espace des phases est donc de dimension 4. La dynamique étant hamiltonienne, les trajectoires sont confinées sur les surfaces d'énergie $\mathcal{H} = C^{st}$ qui sont de dimension 3². Lors de l'évolution d'une particule sur le billard, la vitesse reste constante entre deux impacts et évolue par saut lors d'un rebond. Une trajectoire est donc entièrement décrite par les positions des impacts (abscisse curviligne s) et la direction de la vitesse après impact (cosinus de l'angle de la trajectoire avec la tangente au bord du billard $p = \cos \varphi$). On peut montrer que ces deux coordonnées, présentées sur la figure B.6, sont conjuguées : p est le moment associé à s . La représentation (p, s) correspond en fait à l'intersection de la surface d'énergie par un plan de dimension 2. C'est une paramétrisation de la section de Poincaré du système.

²La valeur précise de \mathcal{H} n'est pas pertinente puisqu'elle définit simplement la norme du vecteur vitesse sans affecter la forme de la trajectoire.

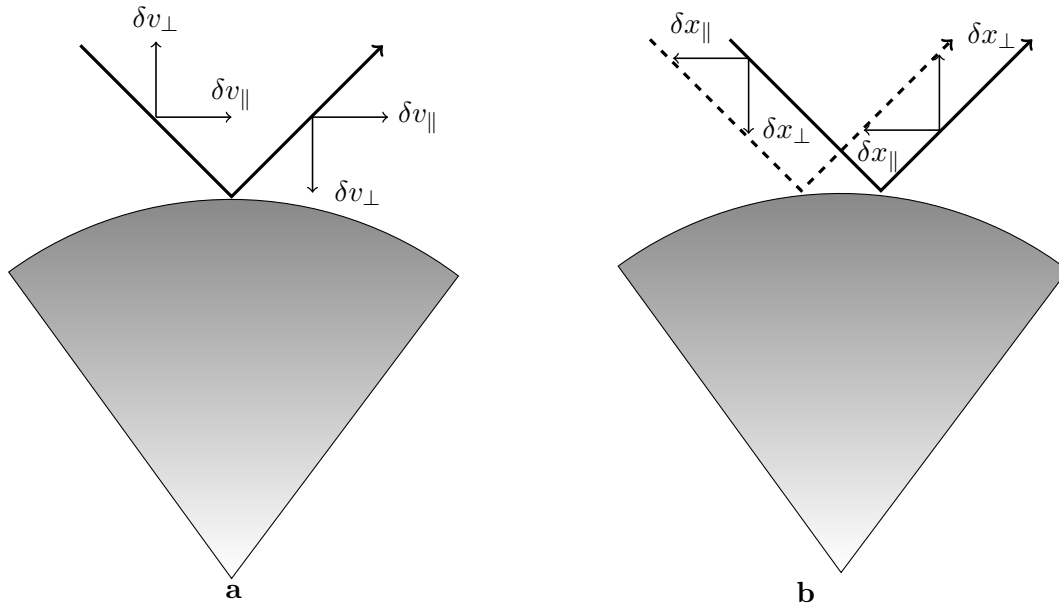


Fig. B.4 : **a :** Lors d'un rebond, la composante tangentielle de la vitesse reste inchangée tandis que la composante normale se retourne. Le même phénomène se produit donc pour des différences infinitésimale δv_{\parallel} et δv_{\perp} . **b :** De même, lors d'un impact, les décalages tangents δx_{\parallel} ne changent pas tandis que les décalages normaux s'inversent $\delta x_{\perp} \rightarrow -\delta x_{\perp}$. Les décalages de vitesse n'ont aucun effet au moment du rebond sur les positions, mais la réciproque n'est pas vraie. Les conséquences d'un décalage δx_{\parallel} sur les vitesses sont présentées sur la figure B.5.

Dans le cas du billard circulaire, les tores invariants correspondent à $p = p(0)$ constant. Soit les trajectoires qui les composent sont périodiques (l'angle φ divisé par 2π est un nombre rationnel), soit elles remplissent densément la ligne $p = p_0$. C'est ce que l'on voit sur la figure B.7.a. Comme dans la section précédente, lorsque l'on augmente la perturbation $\delta > 0$, les tores rationnels se cassent pour laisser place à des îles intégrables qu'entourent des zones chaotiques. Les deux îles principales correspondent à des trajectoires présentées sur la figure B.8.a tandis que les trajectoires périphériques correspondent à la figure B.8.b.

Lorsque $\delta > 0$, le système n'est plus intégrable, certaines trajectoires explorent des régions de l'espace des phases de dimension 3. Elles remplissent de manière aléatoire certaines zones de la section de Poincaré. C'est ce que l'on voit sur la figure B.7.c au voisinage du principal point fixe instable.

B.2 Naissance du chaos

Lorsque δ augmente, on s'éloigne de plus en plus du cas intégrable et les tores invariants vont être peu à peu détruits. Ceci est présenté sur la figure B.7 : le chaos apparaît tout d'abord au niveau de la séparatrice principale, puis s'étend au système au fur et à mesure que des tores rationnels éclatent. Comme précédemment, la dynamique biaisée par les Lyapunov converge alors pour $\alpha = 1$ vers la zone stochastique issue du point fixe instable, qui devient de plus en

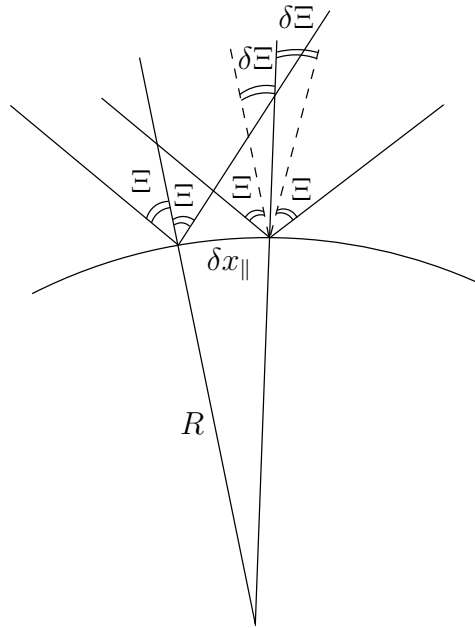


Fig. B.5 : Au premier ordre, l'effet d'un décalage δx_{\parallel} tangent à la surface est de remplacer l'angle de sortie Ξ par $\Xi + 2\delta\Xi$, où $\delta\Xi = 2\frac{\delta x_{\parallel}}{R}$. L'effet d'un décalage normal δx_{\perp} est le même que celui d'un décalage tangent $\delta x_{\parallel} = \delta x_{\perp} \tan \Xi$.

plus « chaotique » lorsque δ augmente (figure B.7.g, h et i). À nouveau, les tores intégrables séparent les différentes régions chaotiques et les séparatrices secondaires jouent le rôle d'états métastables pour la dynamique biaisée (figure B.7.j). Remarquons finalement le niveau de détail que l'on peut obtenir sur la variété instable (figure B.7.k).

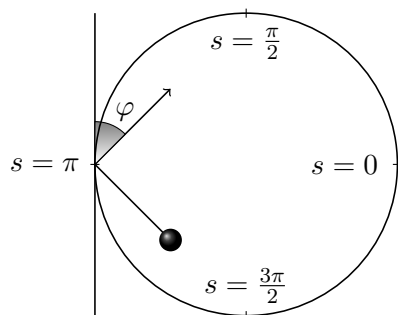


Fig. B.6 : Coordonnées de la section de Poincaré dans le cas d'un billard circulaire : l'abscisse curviligne s et le cosinus de l'angle φ entre la vitesse sortante et la tangente au billard , $p = \cos \varphi$.

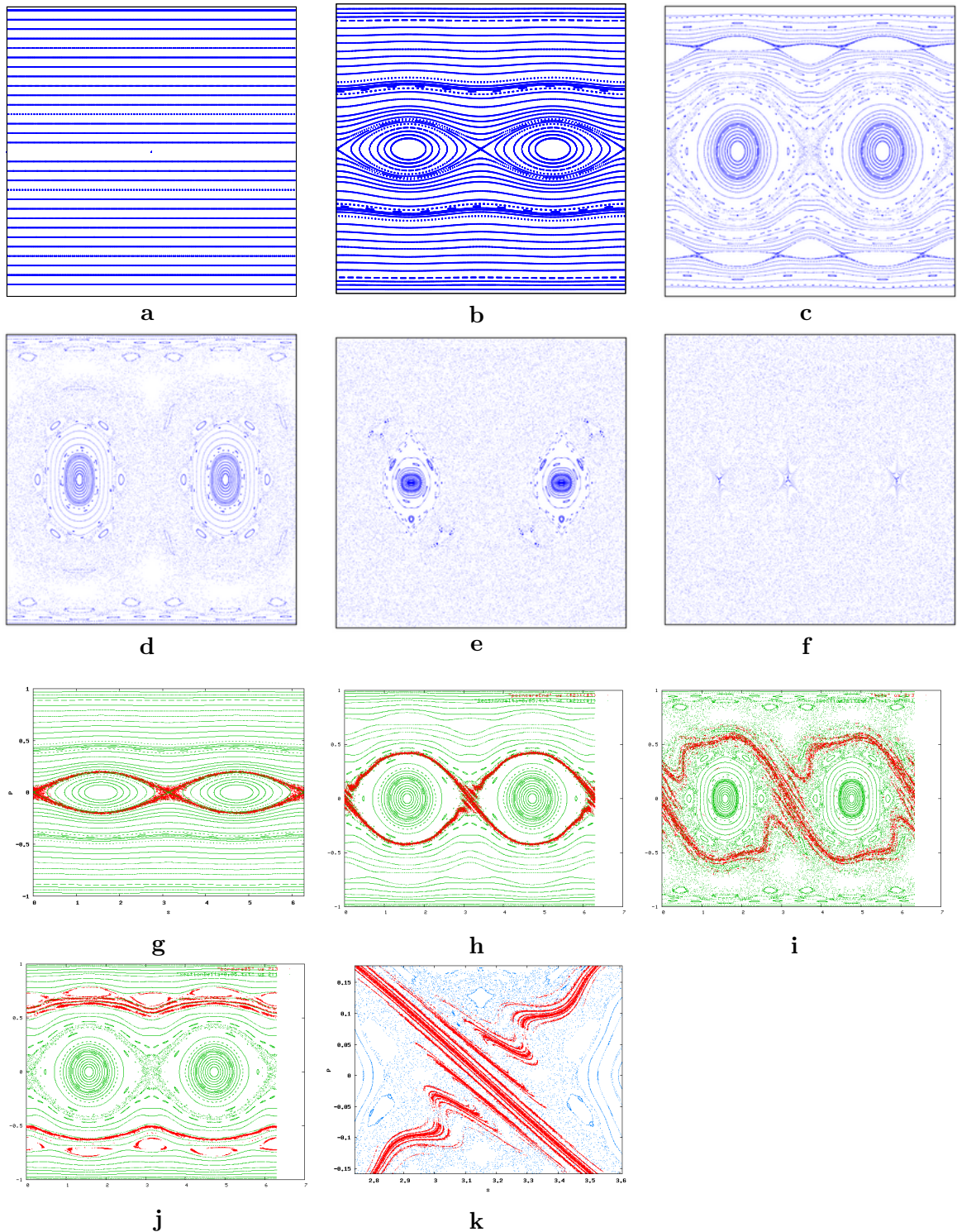


Fig. B.7 : Section de Poincaré du billard pour différentes valeur de δ . a : $\delta = 0$; b : $\delta = 0,01$; c : $\delta = 0,05$; d : $\delta = 0,1$; e : $\delta = 0,2$; f : $\delta = 0,5$. Résultats de la dynamique biaisée par les Lyapunov pour $\alpha = 1$. g : $\delta = 0,01$, h, j et k : $\delta = 0,05$, i : $\delta = 0,1$.

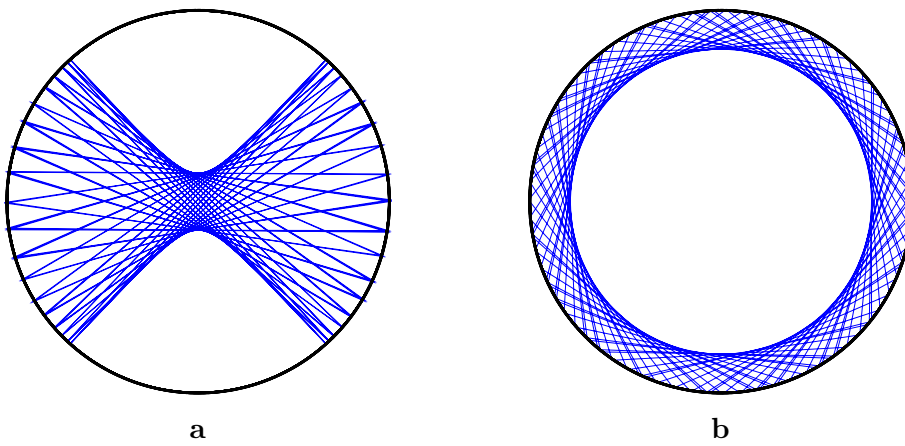


Fig. B.8 : Différents types de trajectoires dans l'espace réel. **a** : ce type de trajectoire correspond aux structures au centre de la section de Poincaré. **b** : trajectoire de grand $|p|$, elle correspond aux trajectoires périphériques (p ne change pas de signe).

Annexe C

Application standard amortie

Pour illustrer l'algorithme dans le cas d'un système non symplectique, nous considérons à présent le cas de l'application standard amortie :

$$\begin{aligned} p_{n+1} &= e^{-\gamma} \left(p_n - \frac{k\delta}{2\pi} \sin(2\pi q_n) \right) \\ q_{n+1} &= q_n + \frac{e^\gamma - 1}{\gamma} p_{n+1} \end{aligned} \tag{C.1}$$

Le taux de contraction du volume de l'espace des phases est $e^{-\gamma}$. Pour $\gamma = 0$, (C.1) se réduit au cas non amorti (1.48). Ce système admet des attracteurs non chaotiques, mais le franchissement des barrières se fait via des régions de forte chaotité. C'est un modèle de réaction chimique en milieu gazeux, où l'amortissement est faible et les états de transition chaotiques.

Puisque le système est dissipatif, les marcheurs tombent vers les attracteurs (figure C.1.a). Ces derniers sont séparés par des trajectoires *chaotiques* instables qui ne sont pas visibles aux temps longs. Sur la figure C.1.b, nous présentons le résultat de la dynamique biaisée par les Lyapunov pour $\alpha = 3$: les marcheurs convergent vers la région chaotique instable. Notons que le biais est suffisant pour stabiliser une structure qui n'est pas sur l'attracteur. Le panneau de droite montre l'attracteur (rouge), les deux principales séparatrices détectées par la dynamique biaisée (bleu) et l'état de transition (violet), i.e. les configurations visitées lors d'une transition activée par dessus la barrière.

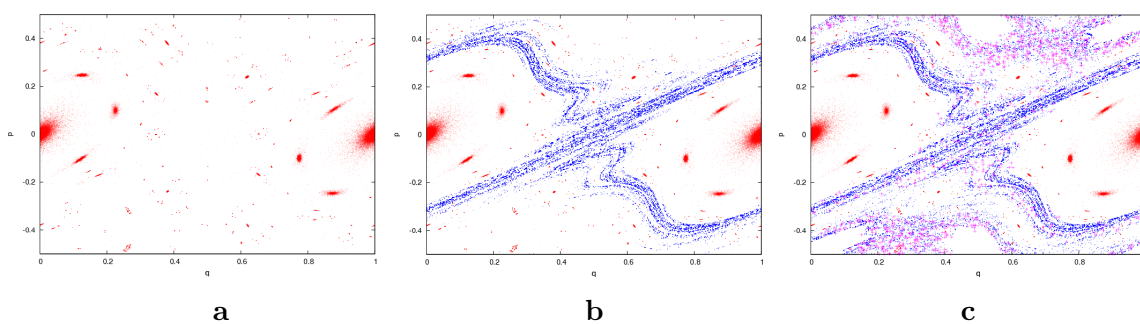


Fig. C.1 : **a** : Attracteurs de l'application (C.1) pour $\gamma = 0.001$, $k = 1.33$, $\delta = 1$. **b** : Les attracteurs (rouge) et la région chaotique (bleu) obtenue avec la dynamique biaisée, pour $\alpha = 3$. 10,000 marcheurs ont évolué avec un bruit de variance 10^{-9} . **c** : Attracteurs (rouge), zones chaotiques principales et secondaires (bleu) obtenues avec la dynamique biaisée. L'état de transition (croix mauves) coïncide avec la zone stochastique et correspond à une transition d'une durée de 1000 pas (sur un temps total de simulation de 10 millions de pas).

Annexe D

Solution de l'équation maîtresse

Considérons une chaîne de Markov en temps continu :

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathcal{C}, t) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W(\mathcal{C}' \rightarrow \mathcal{C}) P(\mathcal{C}', t) - r(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}, t) \quad (\text{D.1})$$

Une solution explicite s'écrit :

$$\begin{aligned} P(\mathcal{C}, t) = & \sum_n \sum_{\mathcal{C}_1 \dots \mathcal{C}_n} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \\ & e^{-(t-t_n)r(\mathcal{C}_n)} r(\mathcal{C}_{n-1}) e^{-(t_n-t_{n-1})r(\mathcal{C}_{n-1})} \dots r(\mathcal{C}_0) e^{-(t_1-t_0)r(\mathcal{C}_0)} \\ & \frac{W(\mathcal{C}_{n-1} \rightarrow \mathcal{C}_n)}{r(\mathcal{C}_{n-1})} \dots \frac{W(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1)}{r(\mathcal{C}_0)} P(\mathcal{C}_0, t_0) \end{aligned} \quad (\text{D.2})$$

Celle-ci peut se comprendre simplement. On somme sur toutes les histoires possibles, c'est-à-dire sur tous les nombres n possibles de changements de configuration et sur toutes les successions de configurations $\mathcal{C}_1 \dots \mathcal{C}_n$ pouvant leur correspondre. Ensuite, pour chaque transition $\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1}$,

$$r(\mathcal{C}_k) e^{-(t_{k+1}-t_k)r(\mathcal{C}_k)} \quad (\text{D.3})$$

correspond à la distribution de probabilité de l'intervalle $t_{k+1} - t_k$ passé dans la configuration \mathcal{C}_k et

$$\frac{W(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})}{r(\mathcal{C}_k)} \quad (\text{D.4})$$

à la *probabilité* de la transition. Notons également la présence de

$$e^{-(t-t_n)r(\mathcal{C}_n)} = 1 - \int_{t_n}^t dt' r(\mathcal{C}_n) e^{-(t'-t_n)r(\mathcal{C}_n)} \quad (\text{D.5})$$

qui correspond à la probabilité de ne pas changer de configuration entre t_n et t . En appliquant ceci à l'équation (2.16), on obtient alors :

$$\begin{aligned} \hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t) = & \sum_n \sum_{\mathcal{C}_1 \dots \mathcal{C}_n} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \\ & e^{-(t-t_n)r(\mathcal{C}_n)} r(\mathcal{C}_{n-1}) e^{-(t_n-t_{n-1})r(\mathcal{C}_{n-1})} \dots r(\mathcal{C}_0) e^{-(t_1-t_0)r(\mathcal{C}_0)} \\ & \frac{W_\alpha(\mathcal{C}_{n-1} \rightarrow \mathcal{C}_n)}{r(\mathcal{C}_{n-1})} \dots \frac{W_\alpha(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1)}{r(\mathcal{C}_0)} P(\mathcal{C}_0, t_0) \end{aligned} \quad (\text{D.6})$$

Notons qu'ici

$$\frac{W_\alpha(\mathcal{C}_{n-1} \rightarrow \mathcal{C}_n)}{r(\mathcal{C}_{n-1})} \quad (\text{D.7})$$

n'est pas une probabilité et que

$$r(\mathcal{C}_k)e^{-(t_{k+1}-t_k)r(\mathcal{C}_k)} \quad (\text{D.8})$$

ne correspond pas à la densité de probabilité de l'intervalle $t_{k+1} - t_k$ pour la dynamique modifiée par α . On peut alors faire apparaître les bons coefficients artificiellement :

$$\begin{aligned} \hat{P}(\mathcal{C}, \alpha, t) &= \sum_n \sum_{\mathcal{C}_1 \dots \mathcal{C}_n} \int_{t_0}^t dt_n \int_{t_0}^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_{t_0}^{t_2} dt_1 \\ &\quad \mathcal{Y}(\mathcal{C}_n)^{t-t_n} e^{-(t-t_n)r_\alpha(\mathcal{C}_n)} \dots \mathcal{Y}(\mathcal{C}_0)^{t_1-t_0} r_\alpha(\mathcal{C}_0) e^{-(t_1-t_0)r_\alpha(\mathcal{C}_0)} \\ &\quad \frac{W_\alpha(\mathcal{C}_{n-1} \rightarrow \mathcal{C}_n)}{r_\alpha(\mathcal{C}_{n-1})} \dots \frac{W_\alpha(\mathcal{C}_0 \rightarrow \mathcal{C}_1)}{r_\alpha(\mathcal{C}_0)} P(\mathcal{C}_0, t_0) \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

où les \mathcal{Y} sont définis par

$$\mathcal{Y}(\mathcal{C}_k) = e^{r_\alpha(\mathcal{C}_k) - r(\mathcal{C}_k)} \quad (\text{D.10})$$

et $r_\alpha(\mathcal{C}_k)$ est le taux d'échappement de la dynamique biaisée :

$$r_\alpha(\mathcal{C}_k) = \sum_{\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}} W_\alpha(\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}') \quad (\text{D.11})$$

Pour obtenir la fonction de partition dynamique, il ne reste alors qu'à sommer (D.9) sur la configuration finale. Le facteur

$$\mathcal{Y}(\mathcal{C}_k)^{t_{k+1}-t_k} = e^{(t_{k+1}-t_k)(r_\alpha(\mathcal{C}_k) - r(\mathcal{C}_k))} \quad (\text{D.12})$$

traduit l'augmentation exponentielle de $\hat{P}(\mathcal{C}_k, s, t)$ entre t_k et t_{k+1} . $Z(s, t)$ est ainsi une somme pondérée sur toutes les trajectoires d'une chaîne de Markov modifiée : les facteurs $\mathcal{Y}(\mathcal{C}_k)^{t_{k+1}-t_k}$ et $[W_\alpha(\mathcal{C}_k \rightarrow \mathcal{C}_{k+1})/r_\alpha(\mathcal{C}_k), r_\alpha(\mathcal{C}_k)e^{-(t_{k+1}-t_k)r_\alpha(\mathcal{C}_k)}]$ correspondant respectivement aux poids et probabilités des trajectoires. Notons que ces poids $\mathcal{Y}(\mathcal{C}_k)^{t_{k+1}-t_k}$ sont toujours exponentiels et que l'on doit utiliser une procédure d'enrichissement pour les calculer correctement avec un nombre fini de simulations.

L'algorithme présenté à la section 2.3.3 revient alors simplement à simuler une population de clones du système évoluant avec les taux modifiés W_α et utiliser un pas de réplcation pour garantir l'échantillonnage des trajectoires pertinentes.

Annexe E

Lien vers les modèles de spin et processus d'exclusion partielle

E.1 Présentation

Nous présentons la connexion avec les opérateurs de spin sur une généralisation du SSEP : le processus d'exclusion partielle [166]. Celui-ci correspond à un réseau unidimensionnel de L sites pouvant chacun être occupé par au plus $2j$ particules (figure E.1). Le taux de transition du site k vers le site $k+1$ (resp. $k+1$ vers k) est $\frac{p}{2j} n_k (2j - n_{k+1})$ (resp. $\frac{q}{2j} n_{k+1} (2j - n_k)$), où n_k et n_{k+1} sont les nombres d'occupation des sites k et $k+1$. Pour $j = \frac{1}{2}$, ce modèle redonne simplement le SSEP.

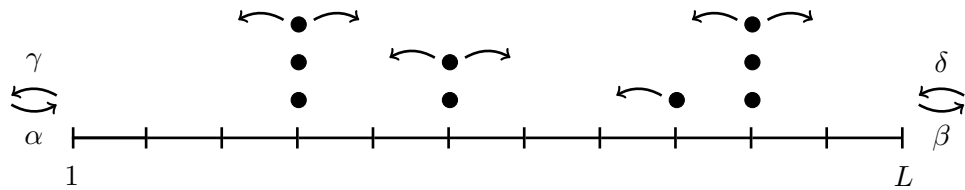


Fig. E.1 : Représentation schématique d'un processus d'exclusion partielle unidimensionnel de taille L .

E.2 Équation maîtresse

Pour écrire l'équation maîtresse dans une forme relativement compacte, nous notons $n_k^\pm = n_k \pm 1$. L'évolution de la probabilité d'observer le système dans une configuration $\{n_i\}$ est alors :

$$\frac{\partial P(\{n\})}{\partial t} = \sum_{\{n'\}} W(\{n'\} \rightarrow \{n\})P(\{n'\}) - W(\{n\} \rightarrow \{n'\})P(\{n\}) \quad (\text{E.1})$$

où $W(\{n'\} \rightarrow \{n\})$ est le taux de transition de la configuration $\{n'\}$ vers la configuration $\{n\}$. En utilisant la définition des taux, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\{n\})}{\partial t} = & \sum_{k=1}^{L-1} \left[P(\{n_k^-, n_{k+1}^+\}) \frac{q}{2j} n_{k+1}^+ (2j - n_k^-) + P(\{n_k^+, n_{k+1}^-\}) \frac{p}{2j} n_k^+ (2j - n_{k+1}^-) \right. \\ & \left. - P(\{n_k, n_{k+1}\}) \left(\frac{q}{2j} n_{k+1} (2j - n_k) + \frac{p}{2j} n_k (2j - n_{k+1}) \right) \right] \\ & + \alpha (2j - n_1^-) P(\{n_1^-\}) + \gamma n_1^+ P(\{n_1^+\}) + \delta (2j - n_L^+) P(\{n_L^-\}) + \beta n_L^+ P(\{n_L^+\}) \\ & - (\alpha n_1 + \gamma (2j - n_1) + \delta (2j - n_L) + \beta n_L) P(\{n_1, n_L\}) \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Introduisons à présent une représentation non hermitienne des opérateurs de spin pour écrire l'opérateur d'évolution associé à l'équation maîtresse. Un état du système est donné par le produit tensoriel des états de chaque site i : $|\psi\rangle = \otimes_i |\psi_i\rangle$. Chaque état $|\psi_i\rangle$ est un vecteur à $2j + 1$ composantes, tel que l'état avec n particules est représenté par

$$|n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{E.3})$$

où le 1 est sur la $(n + 1)^{\text{e}}$ ligne en partant du haut. On peut alors définir les matrices de taille $(2j + 1) \times (2j + 1)$ suivantes :

$$S^+ = \begin{pmatrix} 0 & & & & \\ 2j & \ddots & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad S^- = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & 2j \\ & & & & 0 \end{pmatrix} \quad S^z = \begin{pmatrix} -j & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & j \end{pmatrix} \quad (\text{E.4})$$

Sur chaque site, leur action est donnée par

$$S_i^+ |n_i\rangle = (2j - n_i) |n_i + 1\rangle \quad S_i^- |n_i\rangle = n_i |n_i - 1\rangle \quad S_i^z |n_i\rangle = (n_i - j) |n_i\rangle \quad (\text{E.5})$$

et elles vérifient les relations de commutation

$$[S^z, S^\pm] = \pm S^\pm \quad [S^+, S^-] = 2S^z \quad (\text{E.6})$$

ce qui montre qu'elles forment une représentation des opérateurs de spin (i.e. du groupe $SU(2)$) de spin j .

On peut alors écrire l'opérateur d'évolution du système à l'aide de ces matrices. Pour cela, on définit le vecteur $|\psi\rangle = \sum_{\{n\}} P(\{n\}) |\{n\}\rangle$. En le dérivant par rapport au temps, en

injectant l'équation maîtresse et réorganisant la somme, on obtient :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} &= \sum_{\{\tilde{n}\}} \sum_{k=1}^L \frac{q}{2j} \tilde{n}_{k+1} (2j - \tilde{n}_k) P(\{\tilde{n}_k, \tilde{n}_{k+1}\}) |\tilde{n}_k + 1, \tilde{n}_{k+1} - 1\rangle \\
 &+ \frac{p}{2j} \tilde{n}_k (2j - \tilde{n}_{k+1}) P(\{\tilde{n}_k, \tilde{n}_{k+1}\}) |\tilde{n}_k - 1, \tilde{n}_{k+1} + 1\rangle \\
 &- \left(\frac{q}{2j} \tilde{n}_{k+1} (2j - \tilde{n}_k) + \frac{p}{2j} \tilde{n}_k (2j - \tilde{n}_{k+1}) \right) P(\{\tilde{n}_k, \tilde{n}_{k+1}\}) |\tilde{n}_k, \tilde{n}_{k+1}\rangle \\
 &+ \alpha (2j - \tilde{n}_1) P(\tilde{n}_1) |\tilde{n}_1 + 1\rangle + \gamma \tilde{n}_1 P(\tilde{n}_1) |\tilde{n}_1 - 1\rangle \\
 &+ \delta (2j - \tilde{n}_L) P(\tilde{n}_L) |\tilde{n}_L + 1\rangle + \beta \tilde{n}_L P(\tilde{n}_L) |\tilde{n}_L - 1\rangle \\
 &- [\alpha (2j - \tilde{n}_1) + \gamma \tilde{n}_1 + \delta (2j - \tilde{n}_L) + \beta \tilde{n}_L] P(\{\tilde{n}_1, \tilde{n}_L\}) |\{\tilde{n}_1, \tilde{n}_L\}\rangle
 \end{aligned} \tag{E.7}$$

D'après (E.5), cela se récrit :

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial|\psi\rangle}{\partial t} &= -\hat{H}|\psi\rangle \\
 \text{où} \quad \hat{H} &= \sum_{k=1}^L \frac{q}{2j} [-S_{k+1}^- S_k^+ + (j + S_{k+1}^z)(j - S_k^z)] + \frac{p}{2j} [-S_{k+1}^+ S_k^- + (j - S_{k+1}^z)(j + S_k^z)] \\
 &- \alpha [S_1^+ - (j - S_1^z)] - \gamma [S_1^- - (j + S_1^z)] - \delta [S_L^+ - (j - S_L^z)] - \beta [S_L^- - (j + S_L^z)]
 \end{aligned} \tag{E.8}$$

La représentation à l'aide d'intégrales de chemin du propagateur associé à cet opérateur d'évolution peut être faite via l'utilisation d'états cohérents [177]. On obtient alors dans la limite hydrodynamique la correspondance annoncée :

$$S_z = 2\rho - 1 \quad S_+ = 2(1 - \rho)e^{\hat{\rho}} \quad S_- = 2\rho e^{-\hat{\rho}} \tag{E.9}$$

Notons que S_+ n'est pas le hermitien conjugué de S_- car la représentation (E.4) des opérateurs de spin n'est pas la représentation hermitienne usuelle de $SU(2)$.

Annexe F

Fermions et formes différentielles

Dans cette section, nous allons mettre en évidence la relation entre les formes différentielles¹ et les fermions [196]. Considérons une forme différentielle générique de degré k , définie sur une variété différentielle de dimension $2N$ (l'espace des phases!), que l'on décompose sous la forme :

$$\omega = dx^i \wedge \omega_1 + \omega_2 \quad (\text{F.1})$$

où ω_1 et ω_2 sont des formes différentielles de degré $k-1$ et k ne contenant pas dx_1 . \wedge représente le produit vectoriel (ou produit extérieur) usuel. De manière analogue, en notant d_i^\dagger , d_i les opérateurs de création et annihilation fermionique, une fonction d'onde à k fermions s'écrit :

$$|\psi\rangle = d_i^\dagger |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \quad (\text{F.2})$$

où $|\psi_1\rangle$ et $|\psi_2\rangle$ sont des fonctions à $k-1$ et k fermions, ne contenant pas de fermion dans l'état i .

F.1 Produits extérieur et intérieur

Le produit extérieur par dx_i correspond alors à l'action d'un opérateur de création a_i^\dagger :

$$dx_i \wedge \omega = dx_i \wedge \omega_2 \quad \iff \quad a_i^\dagger |\psi\rangle = a_i^\dagger |\psi_2\rangle \quad (\text{F.3})$$

Les propriétés d'antisymétrie sont bien respectées :

$$d_i^\dagger d_j^\dagger + d_j^\dagger d_i^\dagger = 0 \quad dx_i \wedge dx_j + dx_j \wedge dx_i = 0 \quad (\text{F.4})$$

Notons également que les formes génériques des décompositions des fonctions d'onde et des formes différentielles sont similaires :

$$\omega = \sum_{k=0}^{2N} \sum_{i_1 \dots i_k} \omega_{i_1 \dots i_k} dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k} \quad \iff \quad |\psi\rangle = \sum_{k=0}^{2N} \sum_{i_1 \dots i_k} \psi_{i_1 \dots i_k} d_{i_1}^\dagger \dots d_{i_k}^\dagger |-\rangle \quad (\text{F.5})$$

¹Pour plus de renseignements sur les formes différentielles, consulter [38, 162]. Une bonne alternative, plus abordable pour les physiciens, est le chapitre 5 de l'ouvrage de Nakahara [137].

où les $\omega_{i_1 \dots i_k}$ et les $\psi_{i_1 \dots i_k}$ sont anti-symétriques.

De même, le produit intérieur² $i_{\frac{\partial}{\partial x_i}}$ par un vecteur de base de l'espace tangent $\frac{\partial}{\partial x_i}$ correspond à l'action d'un opérateur d'annihilation d_i . En effet, on le vérifie sur les formules (F.1) et (F.2) :

$$i_{\frac{\partial}{\partial x_i}}(\omega) = \omega_1 \quad a_i|\psi\rangle = |\psi_1\rangle \quad (\text{F.6})$$

F.2 Dérivée extérieure

La dérivée extérieure d est une application linéaire qui envoie une forme de degré k sur une forme de degré $k + 1$. Par définition, son action sur une forme ω du type (F.5) s'écrit :

$$d\omega = \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \omega_{i_1 \dots i_k} dx_j \wedge dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k} \quad (\text{F.7})$$

Cela est évidemment similaire à l'action de Q^\dagger sur une fonction d'onde du type (F.5) :

$$Q^\dagger|\psi\rangle = -i \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} \psi_{i_1 \dots i_k} a_j^\dagger a_{i_1}^\dagger \dots a_{i_k}^\dagger |-\rangle \quad (\text{F.8})$$

Si l'on note \mathbb{H}_k l'espace des formes différentielles de degré k , d induit la séquence (également appelée complexe de De Rham) :

$$\mathbb{H}_0 \xrightarrow{d_0} \mathbb{H}_1 \xrightarrow{d_1} \dots \mathbb{H}_k \xrightarrow{d_{2N-1}} \mathbb{H}_{2N} \quad (\text{F.9})$$

où d_i est la restriction de d aux formes différentielles de degré i .

Pour la même raison que $Q^2 = 0$, il est également vrai que $d^2 = 0$. Ainsi l'image de d_i est incluse dans le noyau de d_{i+1} . Un élément du noyau de d_i est une forme différentielle fermée de degré i , tandis qu'un élément de son image est une forme différentielle exacte de degré $i + 1$. Notons que si une forme différentielle exacte est nécessairement fermée, la réciproque n'est pas vraie, dès lors que les formes différentielles ne sont pas définies sur un ouvert étoilé de R^{2N} . L'espace quotient du noyau de d_i par l'image de d_{i-1} - c'est-à-dire l'ensemble des classes d'équivalence des formes différentielles de degré i qui sont fermées sans être exactes - est nommé i^e groupe de cohomologie de De Rham. Sa dimension est le i^e nombre de Betti B_i de la variété.

Notons finalement que la conjugaison particule-trou nous permet de revenir à notre problème initial : si l'on pose $d_i = c_i^\dagger$, $d_i^\dagger = c_i$ et que l'on échange le rôle des secteurs à k et $2N - k$ fermions, Q^\dagger devient alors Q , et c'est bien cette dernière qui joue le rôle de dérivée extérieure.

²On rappelle que le produit intérieur de la forme $dx_{i_1} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}$ par $\frac{\partial}{\partial x_{i_1}}$ est simplement $dx_{i_2} \wedge \dots \wedge dx_{i_k}$.

Annexe G

Évaluation de la contribution d'une orbite périodique

Calculons la trace correspondant aux degrés de liberté bosoniques. Supposons tout d'abord que la densité de probabilité est gaussienne :

$$P(\mathbf{X}, t) = \exp\left(-\frac{1}{2} B_{ij}(t)(X_i - X_i^0(t))(X_j - X_j^0(t)) + C(t)\right) \quad (\text{G.1})$$

où $X_i^0(t)$ doit être déterminé et $C(t)$ est un facteur de normalisation. $P(\mathbf{X}, t)$ évolue selon (7.9) :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(D_{kj} \frac{\partial}{\partial x_j} + A_{kj}^c x_j \right) P \quad (\text{G.2})$$

ce qui donne :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \left[(X_i - X_i^0)(X_j - X_j^0)(BDB - BA^c)_{ij} - (X_i - X_i^0)X_j^0 BA_{ij}^c - DB_{kk} + A_{kk}^c \right] P \quad (\text{G.3})$$

D'autre part, en dérivant directement (G.1), on obtient :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = P \left[-\frac{\dot{B}_{ij}}{2} (X_i - X_i^0)(X_j - X_j^0) + B_{ij} \dot{X}_i^0 (X_j - X_j^0) + \dot{C}(t) \right] \quad (\text{G.4})$$

En égalant les équations (G.3) et (G.4), il vient :

$$\begin{cases} -\dot{\mathbf{B}} = 2(\mathbf{BDB}) - (\mathbf{BA}^c) - (\mathbf{BA}^c)^\dagger \\ \mathbf{B}\dot{\mathbf{X}}^0 = -\mathbf{BA}^c \mathbf{X}^0 \\ \dot{C}(t) = -\text{Tr}(\mathbf{DB} - \mathbf{A}^c) \end{cases} \quad (\text{G.5})$$

La première équation impose pour \mathbf{B}^{-1} :

$$\frac{d}{dt} \mathbf{B}^{-1} = 2\mathbf{D} - \mathbf{A}\mathbf{B}^{-1} - \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^\dagger \quad (\text{G.6})$$

ce qui s'intègre en

$$\mathbf{B}^{-1} = 2 \int_0^t \mathbf{U}(t)\mathbf{U}^{-1}(t')\mathbf{D}\mathbf{U}^{\dagger-1}(t')\mathbf{U}^\dagger(t)dt' + \mathbf{U}(t)\sigma_0\mathbf{U}^\dagger(t) \quad (\text{G.7})$$

En multipliant la seconde équation de (G.5) par B^{-1} à gauche, on trouve :

$$\dot{X}_l^0 = -A_{lm}^c X_m^0 \quad (\text{G.8})$$

ce qui signifie que \mathbf{X}^0 suit l'évolution à bruit nul. L'équation (7.13) nous dit alors que

$$X_i^0(t) = U_{ij}^c(t) X_j^0(0) \quad (\text{G.9})$$

est une solution de (G.8).

De la normalisation de P , on déduit :

$$\sqrt{\frac{\det \mathbf{B}(t)}{(2\pi)^N}} = e^{C(t)} \quad (\text{G.10})$$

qui satisfait la troisième équation de (G.5). Partant de $P(\mathbf{X}, 0) = \delta(\mathbf{X} - \mathbf{Y})$, i.e. $\mathbf{X}^0(0) = \mathbf{Y}$ et $B_{ij}(0) = \lim_{\Delta \rightarrow \infty} \Delta \delta_{ij}$, la densité est :

$$P_{\mathbf{Y}}(\mathbf{X}, t) = \sqrt{\frac{\det \mathbf{B}(t)}{(2\pi)^N}} e^{-\frac{B_{ij}}{2}(X_i - U_{ik}^c Y_k)(X_j - U_{jl}^c Y_l)} \quad (\text{G.11})$$

La trace est alors donnée par

$$\int P_{\mathbf{Y}}(\mathbf{Y}, t) d\mathbf{Y} = \sqrt{\frac{\det \mathbf{B}}{(2\pi)^N}} \sqrt{\frac{(2\pi)^N}{\det(1 - U^c(t))^\dagger \det \mathbf{B} \det(1 - U^c(t))}} \quad (\text{G.12})$$

soit

$$\int P_{\mathbf{Y}}(\mathbf{Y}, t) d\mathbf{Y} = \frac{1}{|\det(1 - U^c(t))|} \quad (\text{G.13})$$

Ainsi, la contribution bosonique à la trace d'une orbite classique est $\frac{1}{|\det(1 - U^c)|}$.

La contrepartie fermionique à cette contribution est obtenue en prenant

$$\sum_p \lambda^p \text{Tr} \left(\mathcal{T} e^{-\int A_{ij}^c c_i^\dagger c_j} \right) \Big|_{\text{p ferm.}} = \sum_p \lambda^p \sum_{i_1, \dots, i_p} \langle -|c_{i_1} \dots c_{i_p} \mathcal{T} e^{-\int A_{ij}^c c_i^\dagger c_j} c_{i_p}^\dagger \dots c_{i_1}^\dagger | - \rangle \quad (\text{G.14})$$

où le produit ordonné dans le temps est défini le long de la trajectoire classique. Calculons tout d'abord le terme $\langle -|c_{i_1} \dots c_{i_p} \mathcal{T} e^{-\int A_{ij}^c c_i^\dagger c_j} c_{i_p}^\dagger \dots c_{i_1}^\dagger | - \rangle$. En utilisant

$$\left(\mathcal{T} e^{-\int_0^t A_{ij}^c c_i^\dagger c_j} \right) c_{i_l}^\dagger \left(\mathcal{T} e^{\int_0^t A_{ij}^c c_i^\dagger c_j} \right) = U_{ik}^c(t) c_{i_k}^\dagger \quad (\text{G.15})$$

qui se vérifie simplement en dérivant droite et gauche par rapport au temps t et en notant $O = \mathcal{T} e^{-\int A_{ij}^c c_i^\dagger c_j}$, on trouve :

$$\begin{aligned} \langle -|c_{i_1} \dots c_{i_p} O c_{i_p}^\dagger \dots c_{i_1}^\dagger | - \rangle &= \langle -|c_{i_1}, \dots, c_{i_p} O c_{i_p}^\dagger O^{-1} O c_{i_{p-1}}^\dagger O^{-1} \dots O c_{i_1}^\dagger O^{-1} | - \rangle \\ &= \langle -|c_{i_1}, \dots, c_{i_p} \sum_{j_p} U_{j_p i_p}^c c_{j_p}^\dagger \sum_{j_{p-1}} U_{j_{p-1} i_{p-1}}^c c_{j_{p-1}}^\dagger \dots \sum_{j_1} U_{j_1 i_1}^c c_{j_1}^\dagger | - \rangle \\ &= \sum_{j_1 \dots j_p} \prod_{k=1}^p U_{j_k i_k}^c \langle -|c_{i_1}, \dots, c_{i_p} c_{j_p}^\dagger \dots c_{j_1}^\dagger | - \rangle \end{aligned} \quad (\text{G.16})$$

Pour que l'un des termes ne soit pas nul, j_1, \dots, j_p doit être une permutation de i_1, \dots, i_p . Le produit scalaire est alors simplement égal au signe de la permutation, et l'on obtient :

$$\langle -|c_{i_1}, \dots, c_{i_p} O c_{i_p}^\dagger, \dots, c_{i_1}^\dagger| - \rangle = \det_p U_{i_1, \dots, i_p}^c \quad (\text{G.17})$$

où $\det_p U_{i_1, \dots, i_p}^c$ est le mineur d'ordre p de $U^c(t)$ associé aux directions i_1, \dots, i_p . On peut à présent calculer la fonction génératrice des contributions fermioniques :

$$\begin{aligned} \sum_p \lambda^p \text{Tr} \mathcal{T} e^{-\int_0^t A_{ij}^c c_i^\dagger c_j} \Big|_{p \text{ fermions}} &= \sum_p \lambda^p \sum_{i_1, \dots, i_p} \det_p U_{i_1, \dots, i_p}^c \\ &= \det(1 + \lambda U^c(t)) \end{aligned} \quad (\text{G.18})$$

Finalement, la fonction génératrice de la contribution d'une orbite périodique classique ' c ' est :

$$T^c(\lambda, t) = \frac{\det(1 + \lambda U^c(t))}{|\det(1 - U^c(t))|} \quad (\text{G.19})$$

et nous trouvons donc :

$$T(\lambda, t) = \sum_{\substack{\text{orbites} \\ \text{classiques } c}} \frac{\det(1 + \lambda U^c(t))}{|\det(1 - U^c(t))|} \quad (\text{G.20})$$

Annexe H

Développement gaussien - WKB

Considérons un unique point col (nous omettons l'indice « c ») que nous supposons à l'origine sans perte de généralité. Supposons de plus V développé au second ordre en q_i et la Hessienne $\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}(0)$ diagonalisée. Nous pouvons donc traiter séparément chaque mode et considérer de manière équivalente un problème unidimensionnel. Nous abandonnons donc les indices i, j pour alléger la notation. Nous désirons alors construire pour chaque point col un vecteur propre à droite de valeur propre nulle au premier ordre en T :

$$H^c |\psi^{hR}\rangle = 0 \quad (\text{H.1})$$

Il doit donc exister λ tel que

$$\begin{cases} \left(-\gamma T \frac{\partial^2}{\partial p^2} - \frac{\gamma}{2} + \frac{\gamma}{4T} p^2 - V'' q \frac{\partial}{\partial p} + p \frac{\partial}{\partial q} \right) |\psi_b^{hR}\rangle = \lambda |\psi_b^{hR}\rangle \\ (V'' b^\dagger a + \gamma b^\dagger b - a^\dagger b) |\psi_f^{hR}\rangle = -\lambda |\psi_f^{hR}\rangle \end{cases} \quad (\text{H.2})$$

Regardons tout d'abord la partie fermionique. Dans la base $|-\rangle, |a^\dagger\rangle, |b^\dagger\rangle, |a^\dagger b^\dagger\rangle$, celle-ci se lit :

$$H_{\text{ferm.}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & V'' & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix} \quad (\text{H.3})$$

Le spectre et les vecteurs propres correspondants s'obtiennent simplement :

$$\begin{aligned} \lambda = 0 &\leftrightarrow |\psi_f^{hR}\rangle = |-\rangle \\ \lambda = \frac{\gamma}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{\gamma^2 - 4V''} &\leftrightarrow |\psi_f^{hR}\rangle = -\gamma \pm \sqrt{\gamma^2 - 4V''} |a^\dagger\rangle + 2V'' |b^\dagger\rangle \\ \lambda = \gamma &\leftrightarrow |\psi_f^{hR}\rangle = |a^\dagger b^\dagger\rangle \end{aligned} \quad (\text{H.4})$$

En ce qui concerne la partie bosonique de (H.2), la forme gaussienne du vecteur propre permet de calculer explicitement le membre de gauche :

$$\begin{aligned} H_{\text{bos.}} |\psi_b^{hR}\rangle &= \left((B_{pp} - \frac{1}{2})\gamma + \left(\frac{\gamma}{4} - \gamma B_{pp}^2 - B_{pq} \right) \frac{p^2}{T} + (V'' B_{pq} - \gamma B_{pq}^2) \frac{q^2}{T} \right. \\ &\quad \left. + (-2\gamma B_{pq} B_{pp} + V'' B_{pp} - B_{qq}) \frac{pq}{T} \right) |\psi_b^{hR}\rangle \end{aligned} \quad (\text{H.5})$$

Le préfacteur du terme quadratique doit être égal à zéro. D'autre part la gaussienne doit être bien normalisée, i.e. les vecteurs propres de B doivent être positifs. Après un calcul simple mais long, deux solutions sont possibles en fonction du signe de V'' :

- si $V'' > 0$, alors $B_{pp} = \frac{1}{2}$, $B_{pq} = 0$ et $B_{qq} = \frac{V''}{2}$. Cela correspond à une valeur propre 0 pour la partie bosonique et la partie fermionique correspondante est donc le vide :

$$|\psi_{V''>0}^{hR}\rangle = e^{-\frac{1}{4T}(p^2+V''q^2)} \otimes |-\rangle \quad (\text{H.6})$$

- si $V'' < 0$, alors $B_{pp} = \frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{2\gamma}$, $B_{pq} = \frac{V''}{\gamma}$ et $B_{qq} = -V''\frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{2\gamma}$. Cela correspond à une valeur propre $-\frac{\gamma}{2} + \frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{2}$ pour la partie bosonique qui est compensée par la partie fermionique correspondante $(-\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4V''})|a^\dagger\rangle + 2V''|b^\dagger\rangle$:

$$|\psi_{V''<0}^{hR}\rangle = e^{-\frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{4\gamma T}(p^2-V''q^2)-\frac{1}{\gamma T}V''pq} \otimes \left((-\gamma - \sqrt{\gamma^2 - 4V''})|a^\dagger\rangle + 2V''|b^\dagger\rangle \right) \quad (\text{H.7})$$

Le même développement pour H^\dagger mène à

- si $V'' > 0$, alors $B_{pp} = \frac{1}{2}$, $B_{pq} = 0$ et $B_{qq} = \frac{V''}{2}$. Cela correspond à une valeur propre 0 pour la partie bosonique et la partie fermionique correspondante est donc le vide :

$$|\psi_{V''>0}^{hL}\rangle = e^{-\frac{1}{4T}(p^2+V''q^2)} \otimes |-\rangle \quad (\text{H.8})$$

- si $V'' < 0$, alors $B_{pp} = \frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{2\gamma}$, $B_{pq} = -\frac{V''}{\gamma}$ et $B_{qq} = -V''\frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{2\gamma}$. Cela correspond à une valeur propre $-\frac{\gamma}{2} + \frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{2}$ pour la partie bosonique, qui est compensée par la partie fermionique correspondante $(\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4V''})|a^\dagger\rangle + 2|b^\dagger\rangle$:

$$|\psi_{V''<0}^{hL}\rangle = e^{-\frac{\sqrt{\gamma^2-4V''}}{4\gamma T}(p^2-V''q^2)+\frac{1}{\gamma T}V''pq} \otimes \left((\gamma + \sqrt{\gamma^2 - 4V''})|a^\dagger\rangle + 2|b^\dagger\rangle \right) \quad (\text{H.9})$$

La structure du spectre peut être directement lue dans les vecteur propres : une direction stable correspond à une absence de fermion alors qu'une direction instable correspond à un vecteur propre à 1 fermion. Nous avons montré que les vecteurs propres à droite et à gauche de valeur propre nulle sont des gaussiennes à cet ordre dans la base intermédiaire, mais on voit qu'ils ne sont pas pour autant égaux.

Annexe I

Dynamique biaisée par les Lyapunov et limite de faible friction

Nous avons vu dans la section 6.2.0.1 que la dynamique biaisée par les Lyapunov et l'évolution des fonctions d'onde à k fermions sont intimement liées. La principale différence vient du couplage au bain thermique : le système de Kramers est en équilibre tandis que la dynamique biaisée par les Lyapunov utilise le bruit comme un artefact garantissant la diversité des clones. De plus, alors que le résultat de la dynamique biaisée par les Lyapunov s'interprète directement comme un biais dans l'espace des trajectoires, une transformation (6.6) est nécessaire dans le cas des chemins de réaction pour remonter des marcheurs aux fonctions d'onde du Hamiltonien supersymétrique. Dans cette annexe, nous faisons le lien entre ces deux approches en montrant comment prendre la limite $\gamma \rightarrow 0$ dans le formalisme supersymétrique des équations de Kramers.

I.1 Limite $\gamma \rightarrow 0$

La manière la plus simple de prendre la limite de friction nulle est simplement de poser $\gamma = 0$. Les équations d'évolution (5.34) se réduisent alors à l'évolution hamiltonienne :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \quad (\text{I.1})$$

L'évolution des densités de probabilité $P(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ s'obtient alors via l'équation de Liouville :

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -H_{\mathcal{H}}P \quad \text{avec} \quad H_{\mathcal{H}} = -\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) \quad (\text{I.2})$$

L'opérateur d'évolution supersymétrique se réduit finalement à

$$H_{\mathcal{H}}^S = -\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} b_i^\dagger a_j - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} a_j^\dagger b_i + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_j \partial q_i} (b_i^\dagger b_j - a_j^\dagger a_i) \quad (\text{I.3})$$

Il correspond à la supersymétrie des équations de Hamilton [52, 53, 83, 130, 143, 144]. $H_{\mathcal{H}}^S$ admet un groupe de symétries beaucoup plus large que celui de H que nous avons présenté à la section 5.2.1. Il est généré par l'opérateur dont l'action est de multiplier par \mathcal{H}^1 et par

$$\begin{aligned}
 K &= \sum_{i=1}^N a_i b_i & K^\dagger &= -\sum_{i=1}^N a_i^\dagger b_i^\dagger & F &= \sum_{i=1}^N (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) \\
 Q_1 &= -i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial q_i} a_i + \frac{\partial}{\partial p_i} b_i \right) & Q_2 &= [K^\dagger, Q_1]_- = -i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial q_i} b_i^\dagger - \frac{\partial}{\partial p_i} a_i^\dagger \right) \\
 Q_3 &= [Q_2, \mathcal{H}]_- = -i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} b_i^\dagger - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} a_i^\dagger \right) & Q_4 &= [Q_1, \mathcal{H}]_- = -i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} a_i + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} b_i \right).
 \end{aligned} \tag{I.4}$$

Les charges supersymétriques sont nilpotentes :

$$Q_1^2 = Q_2^2 = Q_3^2 = Q_4^2 = 0 \tag{I.5}$$

et telles que

$$H_{\mathcal{H}}^S = (Q_1 + Q_2 + Q_3)^2 \tag{I.6}$$

L'étude de cet opérateur est non triviale, car la définition de l'espace de Hilbert sous-jacent est rendue difficile par l'absence d'opérateur dérivée du deuxième ordre. Rien ne garantit d'avoir un spectre discret et toute l'analyse construite précédemment pour H n'a pas de raison d'être valable. Si nous voulons prolonger au cas hamiltonien l'étude faite précédemment, il faut donc prendre la limite $\gamma \rightarrow 0$ moins « brutalement », ce que nous faisons dans la section suivante.

I.2 Friction nulle et température infinie

Nous venons de voir que l'extension supersymétrique dans le cas purement hamiltonien pose problème car l'espace de Hilbert sous-jacent est difficile à définir proprement. Ceci est dû à l'absence d'opérateur de dérivation du second ordre dans l'Hamiltonien $H_{\mathcal{H}}$. Au contraire, dans le cas de Kramers, la présence de bruit et de friction soigne cette pathologie via l'apparition du Laplacien partiel $\gamma T \sum_i \frac{\partial^2}{\partial p_i^2}$, qui rend H_K hypoelliptique [90]. Notons que c'est la présence de bruit, et non de friction, qui est responsable de l'apparition d'un opérateur diffusif. Le préfacteur de ce Laplacien étant γT , il est tentant de maintenir ce coefficient constant, tout en envoyant γ à zéro, c'est-à-dire de prendre la limite

$$\gamma \rightarrow 0 \quad T \rightarrow \infty \quad \gamma T = \varepsilon \tag{I.7}$$

¹ou par n'importe quelle autre constante du mouvement.

Les équations du mouvement sont alors :

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} + \sqrt{2\varepsilon}\eta_i \quad (\text{I.8})$$

où les η_i sont N bruits blancs gaussiens de variance 1. On reconnaît les équations du mouvement (1.30) introduites lors de l'étude des grandes déviations de l'exposant de Lyapunov. L'évolution d'une densité de probabilité dans l'espace des phases suit

$$\begin{aligned} \frac{\partial P(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)}{\partial t} &= \varepsilon \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2 P(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)}{\partial p_i^2} - \{\mathcal{H}, P(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t)\} \\ &= -H_{\mathcal{H}, \varepsilon} P(\mathbf{q}, \mathbf{p}; t); \quad H_{\mathcal{H}, \varepsilon} = \sum_{i=1}^N \left[-\varepsilon \frac{\partial^2}{\partial p_i^2} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right]. \end{aligned} \quad (\text{I.9})$$

La présence du Laplacien rend cet opérateur hypoelliptique. Notons toutefois que l'espace de Hilbert n'est bien défini que pour un espace des phases compact. En effet, on vérifie trivialement que la mesure plate est l'état stationnaire de la dynamique (I.9). Pour que ce vecteur propre soit normalisable, il est donc nécessaire que son support, i.e. l'espace des phases, soit borné. Une alternative est fournie par l'utilisation d'un bruit multiplicatif qui conserve la valeur du Hamiltonien \mathcal{H} . Toute mesure plate *sur une surface d'énergie* est dans ce cas stationnaire et le problème est bien défini dès que le Hamiltonien est confinant (cf. annexe A).

I.2.0.1 Extension fermionique et symétries

Lorsque l'on prend la limite $\gamma \rightarrow 0$, $T \rightarrow \infty$ avec $\gamma T = \varepsilon$ constant, l'extension supersymétrique (5.39) de l'opérateur de Kramers se transforme en

$$H_\varepsilon = H_{\mathcal{H}, \varepsilon} + \sum_{i,j=1}^N \left(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial q_j} b_i^\dagger a_j - \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} a_i^\dagger b_j + \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q_i \partial p_j} (b_i^\dagger b_j - a_j^\dagger a_i) \right) \quad (\text{I.10})$$

La partie fermionique est la même que pour le cas purement hamiltonien (I.3) tandis que son pendant bosonique a changé. Insistons à nouveau sur le fait que ceci est parfaitement normal puisque que la partie fermionique correspond à une linéarisation *pour une réalisation du bruit donnée* des équations du mouvement. Le groupe de symétries de H_ε est plus réduit que celui du cas purement hamiltonien. Notons tout d'abord qu'à nouveau, le nombre de fermions est une symétrie :

$$F = \sum_{i=1}^N (a_i^\dagger a_i + b_i^\dagger b_i) \quad [F, H_\varepsilon] = 0 \quad (\text{I.11})$$

Il existe de plus quatre autres opérateurs de symétrie :

$$\begin{aligned} Q &= -i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial q_i} a_i + \frac{\partial}{\partial p_i} b_i \right) & K_+ &= \sum_{i=1}^N -a_i^\dagger b_i^\dagger \\ \bar{Q} &= [K^\dagger, Q]_- = -i \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial q_i} b_i^\dagger - \frac{\partial}{\partial p_i} a_i^\dagger \right) & K_- &= \sum_{i=1}^N a_i b_i \end{aligned} \quad (\text{I.12})$$

En outre, si l'on introduit

$$A = -i \sum_{i=1}^N \left(\varepsilon \frac{\partial}{\partial p_i} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i} \right) b_i^\dagger - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i} a_i^\dagger \quad (\text{I.13})$$

cet opérateur satisfait

$$H_\varepsilon = \{Q, A\} \quad (\text{I.14})$$

Toutefois, A n'est pas une symétrie de H et $A^2 \neq 0$. En effet, on vérifie directement

$$A^2 = -\varepsilon \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p_i \partial p_j} a_i^\dagger b_i^\dagger \quad \text{et} \quad [A, H] = [A^2, Q] \quad (\text{I.15})$$

Dans le cas où $\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + V(\mathbf{q})$, cette structure se simplifie légèrement :

$$A^2 = -\varepsilon K^+ \quad [A, H] = [A^2, Q] = -\varepsilon [K^+, Q] = -\varepsilon \bar{Q} \quad (\text{I.16})$$

Dans le cas général, un calcul similaire pour \bar{Q} montre que

$$H = \left\{ \bar{Q}, i \sum_{i=1}^N \varepsilon \frac{\partial}{\partial p_i} b_i^\dagger + [\mathcal{H}, Q] \right\} \quad (\text{I.17})$$

Bien que nous ayons perdu la structure supersymétrique globale, l'existence des symétries ci-dessus continue d'assurer au spectre une organisation particulière. Cette dernière est toutefois radicalement différente du cas présenté pour la dynamique de Kramers. En effet, tout d'abord il n'y a plus de gap d'ordre 1. Les équations (I.8) induisent une diffusion en énergie et le gap entre l'état fondamental et le premier excité est d'ordre ε . De plus, les structures de paires ont disparu. Il reste toutefois un élément intéressant : les vecteurs propres isolés de valeur propre nulle continuent d'avoir un sens topologique. Ils sont liés aux séparatrices n'étant pas continument déformables vers un point. Comme nous l'expliquons dans la section suivante, l'existence d'états fermioniques de long temps de vie correspond numériquement à des distributions *anti-symétriques* stables de marcheurs. Ces dernières nécessitent une faible probabilité de « retournement » des vecteurs et nous pensons que le nombre de tels états peut ainsi être associé aux nombres de séparatrices « topologiques ». Cette ligne de recherche reste ouverte et nous espérons que l'intérêt de la communauté mathématique pour ces problèmes [24, 92] permettra de faire le lien avec notre approche.

I.2.0.2 Des marcheurs aux fermions

Nous avons vu ci-dessus que dans la limite $\gamma \rightarrow 0$, $T \rightarrow \infty$ et $\gamma T = \varepsilon$, la structure supersymétrique ne survit que partiellement. Nous montrons en outre ci-dessous que si les algorithmes introduits pour trouver les chemins de réaction et les grandes déviations sont similaires, *ils ne convergent pas* vers les mêmes régions de l'espace de Hilbert sur lequel sont définies les densités de probabilité des marcheurs : les chemins de réaction correspondent à

des distributions anti-symétriques en \mathbf{v} alors que les grandes déviations sont typiquement dominées par des structures *symétriques*.

L'efficacité de l'algorithme introduit à la section 6.2.0.1 pour la recherche de chemin de réaction est due au fait que l'on est rarement confronté au problème de signe *au niveau du chemin de transition*. À partir des distributions $\mathcal{F}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \mathbf{v})$ vers lesquelles converge l'algorithme, on peut donc en général reconstruire les fonctions d'onde $|\psi\rangle$ via l'équation (6.6). Pour comprendre intuitivement cela, reprenons le cas du double puits de potentiel. Au niveau du point col, un vecteur tangent au chemin de réaction pointe soit vers le puits de gauche, soit vers le puits de droite. Son orientation au niveau du point col sera ensuite conservée le long du chemin. Imaginons que nous démarrions une simulation avec des populations de $n_L = N/2 + \delta N$ et $n_R = N/2 - \delta N$ marcheurs orientés respectivement vers les puits de gauche et de droite. $\delta N \ll N$ est une légère dissymétrie initiale qui rend compte de l'impossibilité en pratique d'avoir une distribution parfaitement symétrique. Les équations d'évolution de n_L et n_R sont schématiquement :

$$\dot{n}_L = \alpha n_L + \Gamma \quad \dot{n}_R = \alpha n_R + \Gamma \quad n_R + n_L = N \quad (\text{I.18})$$

Le terme proportionnel à n_α traduit le clonage et ne dépend pas de l'orientation des vecteurs, seulement de leur position. Il est donc égal pour n_L et n_R . Γ impose la constance de la population totale, que l'on impose via la troisième équation². En la dérivant, on obtient :

$$\Gamma = -\alpha \frac{n_L + n_R}{2} = -\alpha \frac{N}{2} \quad (\text{I.19})$$

Les équations du mouvement se réécrivent donc :

$$\dot{n}_L = \alpha n_L - \alpha \frac{N}{2} \quad \dot{n}_R = \alpha n_R - \alpha \frac{N}{2} \quad (\text{I.20})$$

dont les solutions satisfaisant les conditions initiales choisies sont :

$$n_L = \frac{N}{2} + \delta N e^{\alpha t} \quad n_R = \frac{N}{2} - \delta N e^{\alpha t} \quad (\text{I.21})$$

Ainsi, la différence initialement très faible s'amplifie exponentiellement avec le temps et la distribution finale de vecteur est anti-symétrique³. On peut alors reconstruire les fonctions d'onde fermioniques en utilisant (6.6).

Dans le cas de la dynamique biaisée par les Lyapunov, un marcheur qui s'échappe du point col le long de la séparatrice y revient au bout d'un tour. Il arrive à ce moment avec une orientation orthogonale à la variété instable et peut donc repartir soit dans la même orientation qu'au tour précédent, soit avec une orientation contraire. Nommons β le taux avec lequel les vecteurs changent leur orientation lorsqu'ils reviennent dans le voisinage du

²qui correspond en quelque sorte au troisième pas de l'algorithme.

³Notons que ceci est un phénomène connu en écologie : deux espèces ne peuvent partager une même niche écologique.

point col. Ce taux ne dépend pas de l'orientation des vecteurs et est typiquement supérieur à α ⁴. Les équations d'évolution des n_α sont alors :

$$\dot{n}_1 = (\alpha - \beta)n_1 + \beta n_2 + \Gamma \quad \dot{n}_2 = (\alpha - \beta)n_2 + \beta n_1 + \Gamma \quad n_1 + n_2 = N \quad (\text{I.22})$$

On trouve à nouveau $\Gamma = -\alpha \frac{N}{2}$. En faisant la différence des deux équations d'évolution et en posant $u = n_1 - n_2$, on obtient :

$$\dot{u} = (\alpha - 2\beta)u \quad (\text{I.23})$$

Dès que $\beta > \alpha/2$, la moindre différence entre les populations n_1 et n_2 tend vers zéro et c'est la composante symétrique de la distribution de marcheurs qui l'emportent. L'approche supersymétrique ne décrit plus les distributions vers lesquelles l'algorithme converge, puisque l'on ne peut plus reconstruire les fonctions d'onde en utilisant (6.6).

Un raisonnement différent, qui aurait pu nous faire aboutir au même résultat, est le suivant : les fonctions d'ondes à 1 fermion correspondant aux courants de réaction sont les images par \bar{Q} de fonctions d'onde à 1 fermion, dont les valeurs propres sont nécessairement positives⁵. Ainsi, le taux de réplication moyen est dans ce cas nécessairement inférieur à 1. Au contraire l'exposant de Lyapunov λ_1 est par définition positif pour les système hamiltoniens. Ainsi $\langle e^{\lambda_1 t} \rangle$ doit être supérieur à 1. Ceci correspond à un taux de réplication supérieur à 1 et les vecteurs correspondant n'ont donc rien à voir avec le spectre d'un éventuel opérateur d'évolution fermionique.

⁴Le taux de clonage moyen est proportionnel au plus grand exposant de Lyapunov λ_1 , qui ne doit pas être trop important pour que l'on puisse encore parler de chemin de réaction. Au contraire, β est lié au temps mis par un marcheur à revenir vers le point col, qui est d'ordre 1.

⁵Théorème de Perron-Fröbenius.

Bibliography

- [1] Bovier A, M. Eckhoff, V. Gayrard, and M. Klein. *Metastability and low-lying spectra in reversible Markov chains*. Commun. Math. Phys., **228**, 219, (2002).
- [2] J.B. Anderson. *A random-walk simulation of the Schrödinger equation: H_3^+* . J. Chem. Phys., **63**, 1499, (1975).
- [3] V.I. Arnold. Russ. Math. Surv., **18**, 9, (1963).
- [4] V.I. Arnold. *Instability of dynamical systems with many degrees of freedom*. Doklady Akademii Nauk SSSR, **156**, 9–12, (1964).
- [5] V.I. Arnold. *Mathematical Methods of Classical Mechanics*. Springer-Verlag, New York, (1989).
- [6] A. Avogadro. *Essay on a Manner of Determining the Relative Masses of the Elementary Molecules of Bodies, and the Proportions in Which They Enter into These Compounds*. J. de Physique, **73**, 58–76, (1811).
- [7] J. Banks, J. Brooks, G. Cairns, G. Davis, and P. Stacey. *On devaney definition of chaos*. American Mathematical Monthly, page 332, (1992).
- [8] C. Becchi, A. Rouet, and R. Stora. *Renormalization of Abelian Higgs-Kibble model*. Commun. Math. Phys., **42**, 127, (1975).
- [9] C. Becchi, A. Rouet, and R. Stora. *Renormalization of gauge theories*. Ann. Phys., **98**, 28, (1976).
- [10] C Beck and F Schlögl. *Thermodynamics of Chaotic Systems*. Cambridge University Press, (1993).
- [11] G. Benettin, L. Galgani, and JM. Strelcyn. *Kolmogorov entropy and numerical experiments*. ys. Rev. A, **14**, 2338–2345, (1976).
- [12] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli, and JM. Strelcyn. *All Lyapunov characteristic numbers are effectively computable*. C. R. Acad. Sci., Paris, **286A**, 431, (1978).

-
- [13] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli, and JM. Strelcyn. *Lyapunov characteristic exponents for smooth dynamical systems and for Hamiltonian systems*. *Mecanica*, **15**, 9, (1980).
- [14] R. Benzi, G. Paladin, G. Parisi, and A. Vulpiani. *Characterisation of intermittency in chaotic systems*. *J. Phys. A*, **18**, 2157–2165, (1985).
- [15] G.P. Berman and F.M. Izrailev. *The Fermi-Pasta-Ulam problem: 50 years of progress*. *Chaos*, **15**, 015104, (2005).
- [16] P. Bernard. *Perturbation d'un Hamiltonien partiellement hyperbolique*. *CRAS. Série 1, Mathématique*, **323**, 189–194, (1996).
- [17] M. Bernstein and L.S. Brown. *Supersymmetry and the Bistable Fokker-Planck Equation*. *Phys. Rev. Lett.*, **52**, 1933, (1984).
- [18] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. *Fluctuations in stationary nonequilibrium states of irreversible processes*. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 04601, (2001).
- [19] L. Bertini, D. Gabrielli, and J.L. Lebowitz. *Large deviations for a stochastic model of heat flow*. *J. Stat. Phys.*, **121**, 843, (2005).
- [20] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, G. Jona-Lasinio, and C. Landim. *Large deviation approach to non equilibrium processes in stochastic lattice gases*. *Bull. of Braz. Math. Soc.*, **37**, 611, (2006).
- [21] K. Binder, editor. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Springer-Verlag, NY, (1979).
- [22] G.D. Birkhoff. *Proof of Poincaré Geometric theorem*. *Trans. Amer. Math. Soc.*, **14**, 14–22, (1913).
- [23] G.D. Birkhoff. *An extension of Poincaré's last geometric theorem*. *Acta Math.*, **47**, 297–311, (1925).
- [24] J.M. Bismut. *The Hypoelliptic Laplacian on the cotangent bundle*. *J. Am. Math. Soc.*, **18**, 379–476, (2005).
- [25] R.A. Blythe, M.R. Evans, F. Colaiori, and F.H.L. Essler. *Exact solution of a partially asymmetric exclusion model using a deformed oscillator algebra*. *J. Phys. A.*, **33**, 2313–2332, (2000).
- [26] T. Bodineau and B. Derrida. *Current fluctuations in non-equilibrium diffusive systems: an additivity principle*. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 180601, (2004).

- [27] T. Bohr and D. Rand. *The entropy function for characteristic exponents*. Physica D, **25**, 387–398, (1987).
- [28] P. G. Bolhuis, D. Chandler, C. Dellago, and P. L. Geissler. *Transition path sampling: Throwing ropes over rough mountain passes, in the dark*. Annu. Rev. Phys. Chem, **53**, 291, (2002).
- [29] L. Boltzmann. *Über das Wärmegleichgewicht zwischen mehratomigen Gasmolekülen*. Wiener Ber., **63**, 397–418, (1871).
- [30] L. Boltzmann. *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*. Wiener Ber., **66**, 275–370, (1872).
- [31] L. Boltzmann. *Über die Beziehung dem zweiten Hauptsatze der mechanischen Wärmetheorie und der Wahrscheinlichkeitsrechnung respektive den Sätzen über das Wärme-gleichgewicht*. Wiener Ber., **76**, 373–435, (1877).
- [32] A. Bovier, M. Eckhoff, V. Gayrard, and M. Klein. *Metastability in stochastic dynamics of disordered mean field models*. Probab. Theor. Relat. Fields, **119**, 99, (2001).
- [33] A. Bovier, M. Eckhoff, V. Gayrard, and M. Klein. *Metastability in reversible diffusion processes I. Sharp asymptotics for capacities and exit times*. preprint, (2003).
- [34] A. Bovier, V. Gayrard, and M. Klein. *Metastability in reversible diffusion processes II. Precise asymptotics for small eigenvalues*. preprint, (2003).
- [35] R. Bowen. *Equilibrium States and the Ergodic Theory of Anosov Diffeomorphism*, volume 470 of *Lecture Notes in Math*. Springer, Berlin, (1975).
- [36] L. Brillouin. *The ondulatory mechanics of Schrodinger; A general method of resolution by successive approximations*. CRAS, **183**, 24–26, (1926).
- [37] M. Brown and W. D. Neumann. *Proof of the Poincaré-Birkhoff fixed point theorem*. Michigan Math. J., **24**, 21–31, (1977).
- [38] H. Cartan. *Théorie élémentaire des fonctions analytiques d'une ou plusieurs variables complexes*. Hermann, Paris, (1961).
- [39] J.H.E. Cartwright, M.O. Magnasco, O. Piro, and I. Tuval. *Bailout Embeddings and Neutrally Buoyant Particles in Three-Dimensional Flows*. Phys. Rev. Lett., **89**, 264501, (2002).
- [40] S. Cecotti and L. Girardello. *Stochastic and parastochastic aspects of supersymmetric functional measures - a new non-perturbative approach to supersymmetry*. Ann. Phys. (N.Y.), **145**, 81, (1983).

-
- [41] O. Cepas and J. Kurchan. *Canonically invariant formulation of Langevin and Fokker-Planck Equations*. cond-mat/9706296, (1997).
- [42] N. Cerf and O. Martin. *Finite population-size effects in projection Monte Carlo methods*. Phys. Rev. E, **51**, 3679–3693, (1995).
- [43] R. Chetrite and K. Gawedzki. *Fluctuation Relations for Diffusion Processes*. Arxiv/math-ph, (2007). URL <http://arxiv.org/abs/0707.2725>.
- [44] R. Chetrite, J.Y. Delannoy, and K. Gawedzki. *Kraichnan flow in a square: an example of integrable chaos*. Arxiv/nlin.cd, (2006). URL <http://arxiv.org/abs/nlin.CD/0606015>.
- [45] B.V. Chirikov. *Universal instability of many-dimensional oscillator systems*. Phys. Rep., **52**, 263–379, (1979).
- [46] W. Cowieson and L.S. Yound. *SRB Measures as Zero-noise Limits*. Ergodic Theory and Dynamical Systems, **25**, 1115–1138, (2005).
- [47] T. Cretegny, T. Dauxois, S. Ruffo, and A. Torcini. *Localization and equipartition of energy in the beta-FPU chain: Chaotic breathers*. Physica D, **121**, 109–126, (1998).
- [48] P. Cvitanović, R. Artuso, R. Mainieri, G. Tanner, and G. Vattay. *Chaos: Classical and Quantum*. Niels Bohr Institute, Copenhagen, (2005). URL <http://ChaosBook.org>.
- [49] C. Dellago and H.A. Posch. *Lyapunov exponents of systems with elastic hard collisions*. Phys. Rev. E, **52**, 2401–2407, (1995).
- [50] C. Dellago, H.A. Posch, and W.G. Hoover. *Lyapunov instability in a system of hard disks in equilibrium and nonequilibrium steady states*. Phys. Rev. E, **53**, 1485–1501, (1996).
- [51] C. Dellago, P. G. Bolhuis, F. S. Csajka, and D. Chandler. *Transition Path Sampling and the Calculation of Rate Constants*. J. Chem. Phys., **108**, 1964, (1998).
- [52] E. Deotto, E. Gozzi, and D. Mauro. *Hilbert space structure in classical mechanics. I*. J. Math. Phys, **44**, 5902, (2003).
- [53] E. Deotto, E. Gozzi, and D. Mauro. *Hilbert space structure in classical mechanics. II*. J. Math. Phys, **44**, 5937, (2003).
- [54] C. Deroulers and R. Monasson. *Field theoretic approach to metastability in the contact process*. Phys. Rev. E, **69**, 016126, (2004).
- [55] B. Derrida. *Non equilibrium steady states: fluctuations and large deviations of the density and of the current*. J. Stat. Mech., page P07023, (2007).

- [56] B. Derrida and J.L. Lebowitz. *Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process*. Phys. Rev. Lett., **80**, 209, (1998).
- [57] B. Derrida, M.R. Evans, V. Hakim, and V. Pasquier. *Exact solution of a 1d asymmetric exclusion model using a matrix formulation*. J. Phys A, **26**, 1493, (1993).
- [58] B. Derrida, J.L. Lebowitz, and E.R. Speer. *Free energy functional for nonequilibrium systems: An exactly solvable case*. Phys. Rev. Lett., **87**, 150601, (2001).
- [59] R.L. Devaney. *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*. Menlo Park, Benjamin/Cummings, (1986).
- [60] R. Dickman and R. Vidigal. *Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state*. J. Phys. A, **35**, 1147, (2002).
- [61] J.P.K. Doye and D.J. Wales. *Surveying a potential energy surface by eigenvector following*. Z. Phys. D, **40**, 194, (1997).
- [62] W. E, Weiqing W. Ren, and E. Vanden-Eijnden. *String method for the study of rare events*. Phys. Rev. B, **66**, 052301, (2002).
- [63] W. E, W. Ren, and E. Vanden-Eijnden. *Energy landscape and thermally activated switching of submicron-sized ferromagnetic elements*. J. Appl. Phys., **93**, 2275, (2003).
- [64] A. Einstein. *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*. Ann. d. Phys., **17**, 549, (1905).
- [65] A. Einstein. *Kinetische Theorie des Wärmegleichgewichtes und des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik*. Annalen der Physik, **9**, 417–433, (1902).
- [66] A. Einstein. *Eine Theorie der Grundlagen der Thermodynamik*. Annalen der Physik, **11**, 170–187, (1903).
- [67] A. Einstein. *Zur allgemeinen molekularen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*. Annalen der Physik, **14**, 354–362, (1904).
- [68] R.S. Ellis. *Entropy, large deviations, and Statistical Mechanics*. Springer-Verlag, New York, (1985).
- [69] F.H.L. Essler and V. Rittenberg. *Representations of the quadratic algebra and partially asymmetric diffusion with open boundaries*. J. Phys. A, **29**, 3375, (1996).
- [70] R.P. Feynman. *Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics*. Rev. Mod. Phys., **20**, 267, (1948).

-
- [71] A. Fick. *On liquid diffusion*. Phil. Mag., **10**, 31–39, (1855).
- [72] M. Flacioni, U. Marini Bettolo Marconi, and A. Vulpiani. *Ergodic properties of high-dimensional symplectic maps*. Phys. Rev. A, **44**, 2263–2270, (1991).
- [73] H. C. Fogedby, A. B. Eriksson, and L. V. Mikheev. *Continuum-limit, galilean invariance, and solitons in the quantum equivalent of the noisy burgers-equation*. Phys. Rev. Lett., **75**, 1883, (1995).
- [74] C. Froeschle, M. Guzzo, and E. Lega. *Graphical Evolution of the Arnold Web: From Order to Chaos*. Science, **289**, 2108–2110, (2000).
- [75] G.W. Gardiner. *Handbook of stochastic methods*. Springer-Verlag, (1983).
- [76] J.P. Garrahan, R.L. Jack, V. Lecomte, E. Pitard, K. van Duijvendijk, and F. van Wijland. *Dynamic first-order transition in kinetically constrained models of glasses*. Phys. Rev. Lett., **98**, 195702, (2007).
- [77] P. Gaspard. *Chaos, scattering and statistical mechanics*, volume 9 of *Cambridge Non-linear Science Series*. Cambridge University Press, (1998).
- [78] B. Gaveau and L.S. Schulman. *Theory of nonequilibrium first-order phase transitions for stochastic dynamics*. J. Math. Phys., **39**, 1517, (1998).
- [79] E.M. Gelbard. *Present status and future-prospects of neutronics monte-carlo*. Prog. Nucl. Energy, **24**, 1, (1990).
- [80] C. Giardinà, J. Kurchan, and L. Peliti. *Direct evaluation of large-deviation functions*. Phys. Rev. Lett., **6**, 120603, (2006).
- [81] J.W. Gibbs. *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. Yale University Press, (1902).
- [82] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, (1980).
- [83] E. Gozzi. *Stochastic and Nonstochastic Supersymmetry*. Progress of Theoretical Physics Supplement, **111**, 115, (1993).
- [84] R. Graham and D. Roekaerts. *Stochastic representation of arbitrary fermion sectors in supersymmetric quantum mechanics on Riemann manifolds*. Phys. Rev. D, **34**, 2312, (1986).
- [85] P. Grassberger. *Go with the winners: a general Monte Carlo strategy*. Comp. Phys. Comm., **147**, 54–70, (2002).
- [86] P. Grassberger, R. Badii, and A. Politi. *Scaling laws for invariant measures on hyperbolic and nonhyperbolic attractors*. J. Stat. Phys., **51**, 135–178, (1988).

- [87] J. Hadamard. *Les surfaces à courbures opposées et leurs lignes géodésiques*. J. Math. Pures et Appl., **4**, 27–73, (1898).
- [88] T.E. Harris. *Contact Interactions on a Lattice*. Ann. Probab., **2**, 969, (1974).
- [89] W.B. Hayes. *Is the Outer Solar System Chaotic?* preprint astro-ph/0702179, (2007). URL <http://aps.arxiv.org/abs/astro-ph/0702179>.
- [90] B. Helffer and F. Nier. *Hypoelliptic Estimates and Spectral Theory for Fokker-Planck Operators and Witten Laplacians*. Springer, (2000).
- [91] B. Helffer and F. Nier. *Hypoelliptic Estimates and Spectral Theory for Fokker-Planck Operators and Witten Laplacians*, volume 1862 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer, (2005).
- [92] F. Herau, M. Hitrik, and J. Sjostrand. *Tunnel effect for Kramers-Fokker-Planck type operators*. preprint math/0703684, 2007. URL <http://arxiv.org/abs/math/0703684>.
- [93] P. Hänggi, P. Talkner, and M. Borkovec. *Reaction-rate theory: fifty years after Kramers*. Rev. Mod. Phys., **62**, 252, (1990).
- [94] Janssen79. *Field-theoretic method applied to critical dynamics*. In *Dynamical Critical Phenomena and Related Topics*, volume 104 of *Lecture Notes in Physics*, pages 25–47. Springer Berlin / Heidelberg, (979).
- [95] J.Dalton. *On the Absorption of Gases by Water and Other Liquids*. Number 1 in *Memoirs of the Literary and Philosophical Society of Manchester*. (1805).
- [96] P. Jung and P. Hänggi. *Amplification of small signals via stochastic resonance*. Phys. Rev. A., **44**, 8032, (1991).
- [97] H. Jónsson, G. Mills, and W. Jacobsen. *Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations*. World Scientific, (1998).
- [98] M.H. Kalos. *Monte carlo calculations of ground state of 3- and 4-body nuclei*. Phys. Rev., **128**, 1791, (1962).
- [99] M.H. Kalos. *Energy of a simple triton model*. Nucl. Phys. A, **126**, 609, (1969).
- [100] C. Kipnis, C. Marchioro, and E. Presutti. *Heat-flow in an exactly solvable model*. J. Stat. Phys., **27**, 65, (1982).
- [101] J.G. Kirkwood. *Statistical Mechanics of Fluid Mixtures*. J. Chem. Phys., **3**, 300–313, (1935).
- [102] H. Kleinert and S.V. Shabanov. *Supersymmetry in stochastic processes with higher order time derivatives*. Physics Letters A, **235**, 105, (1997).

-
- [103] A.N. Kolmogorov. Dokl. Akad. Nauk SSSR, **98**, 527, (1954).
- [104] A.N. Kolmogorov. *New Metric Invariant of Transitive Dynamical Systems and Endomorphisms of Lebesgue Spaces*. Dokl. Akad. Nauk. SSSR, **119**, 861–864, (1958).
- [105] A.N. Kolmogorov. *General Theory of Dynamical Systems and Classical Mechanics*. In Amsterdam, editor, *Proc. Intern. Congress of Mathematicians*, volume 1, page 315, (1958).
- [106] A.N. Kolmogorov. *Entropy per unit time as a metric invariant of automorphism*. Dokl. Akad. Nauk. SSSR, **124**, 754–755, (1959).
- [107] H.A. Kramers. *Wave mechanics and half-integral quantisation*. Z. Physik, **39**, 828–840, (1926).
- [108] H.A. Kramers. *Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions*. Physica, **7**, 284, (1940).
- [109] M.D. Kruskal and N.J. Zabusky. *Stroboscopic-Perturbation Procedure for Treating a Class of Nonlinear Wave Equations*. J. Math. Phys., **5**, 231, (1964).
- [110] A Laio and M Parrinello. *Escaping free-energy minima*. PNAS, **99**, 12562, (2002).
- [111] J. Laskar. *A numerical experiment on the chaotic behaviour of the Solar System*. Nature, **338**, 237–238, (1989).
- [112] L. Landau and E. Lifchitz. *Mécanique quantique*. Éditions Mir, Moscou, (1974).
- [113] J.S. Langer. *Theory of condensation point*. Ann. Phys., **41**, 108, (1967).
- [114] P.T. Lansbury. *Evolution of amyloid: What normal protein folding may tell us about fibrillogenesis and disease*. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, **96**, 3342, (1999).
- [115] J. Laskar. *The chaotic motion of the solar system - A numerical estimate of the size of the chaotic zones*. Icarus, **88**, 266–291, (1990).
- [116] J. Laskar. *Frequency-analysis for multidimensional systems - Global dynamics and diffusion*. Physica D, **67**, 257–281, (1993).
- [117] J. Laskar. *Large-scale chaos in the solar-system*. Astronomy and Astrophysics, **287**, L9–L12, (1994).
- [118] J.L. Lebowitz and H. Spohn. *A Gallavotti-Cohen type symmetry in the large deviation functional for stochastic dynamics*. J. Stat. Phys., **95**, 333, (1999).
- [119] V. Lecomte, C. Appert-Rolland, and F. van Wijland. *Chaotic properties of systems with Markov dynamics*. Phys. Rev. Lett., **95**, 010601, (2005).

- [120] V. Lecomte, C. Appert-Rolland, and F. van Wijland. *Thermodynamic formalism and large deviation functions in continuous time Markov dynamics*. J. Stat. Phys., **127**, 51, (2007).
- [121] A.L. Lichtenberg and M.A. Lieberman. *Regular and Chaotic Dynamics*. Springer, New York, (1983).
- [122] N. Lorenz. *Deterministic Nonperiodic Flow*. J. Atm. Sci., **20**, 130–141, (1963).
- [123] R. Mannella. *Quasisymplectic integrators for stochastic differential equations*. Phys. Rev. E, **69**, 041107, (2004).
- [124] R. Marcinek and E. Pollak. *Numerical methods for locating stable periodic orbits embedded in a largely chaotic system*. J. Chem. Phys., **100**, 5894–5904, (1993).
- [125] J.C. Maxwell. Rep. Brit. Ass. Adv. Sci., **29**, Notices and Abstract,9, (1859).
- [126] J.C. Maxwell. Phil. Mag., **19**, 19, (1860).
- [127] J.C. Maxwell. Phil. Mag., **20**, 21, (1860).
- [128] J.C. Maxwell. Phil. Trans. R. Soc. Lond., **157**, 49, (1867).
- [129] J.C. Maxwell. *Molecules*. Nature, pages 437–441, (1873September).
- [130] M. Miettinen and A. J. Niemi. *On the Arnold conjecture and the Atiyah-Patodi-Singer index theorem*. Phys. Lett. B, **461**, 89, (1999).
- [131] J. Moser. *New aspects in the theory of stability of hamiltonian systems*. Comm. Pure Appl. Math., **11**, 81, (1958).
- [132] A. Mossa and C. Clementi. *Supersymmetric Langevin equation to explore free-energy landscapes*. Phys. Rev. E, page 046707, (2007).
- [133] N. Mousseau and G.T. Barkema. *Traveling through potential energy landscape of disordered materials: The activation-relaxation technique*. Phys. Rev. E, **57**, 2419, (1997).
- [134] N. Murray and M. Holman. *The role of chaotic resonances in the Solar System*. Nature, **410**, 773–779, (2001).
- [135] N. Murray and M. Holman. *The origin of chaos in the outer solar system*. Science, **283**, 1877–1881, (1999).
- [136] O. Mülken and H. van Beijeren. *Thermodynamic formalism for field-driven Lorentz gases*. Phys. Rev. E, **69**, 046203, (2004).
- [137] M. Nakahara. *Geometry, Topology and Physics*. Adam Hilber, (1990).

-
- [138] L. Navarro. *Gibbs, Einstein and the Foundations of Statistical Mechanics*. Arch. Hist. Exact Sci., **53**, 147–180, (1998).
- [139] N.N. Nekhoroshev. *Functs. Analis i ego prilozheniya*, **5**, 82, (1971).
- [140] H. Nicolai. *Supersymmetry and functional-integration measures*. Nucl. Phys. B, **176**, 419, (1980).
- [141] H. Nicolai. *New characterization of scalar supersymmetric theories*. Phys. Lett. B, **89**, 341, (1980).
- [142] H. Nicolai. *On the functional-integration measure of supersymmetric yang-mills theories*. Phys. Lett. B, **117**, 408, (1982).
- [143] A.J. Niemi. *A lower-bound for the number of periodic classical trajectories*. Phys. Lett. B, **355**, 501, (1995).
- [144] A.J. Niemi and P. Pasanen. *Topological sigma-model, Hamiltonian dynamics and loop space Lefschetz number*. Phys. Lett. B, **386**, 123, (1996).
- [145] M.P. Nightingale and H.W.J. Blöte. *Gap of the linear spin-1 Heisenberg antiferromagnet: A Monte Carlo calculation*. Phys. Rev. B, **33**, 659, (1986).
- [146] M.P. Nightingale and H.W.J. Blöte. *Monte Carlo calculation of free energy, critical point, and surface critical behavior of three-dimensional Heisenberg ferromagnets*. Phys. Rev. Lett., **60**, 1562, (1988).
- [147] B.K. Oksendal. *Stochastic Differential Equations: An Introduction with Applications*. Springer, 5^e edition, (1998).
- [148] L. Onsager and S. Machlup. *Fluctuations and irreversible processes*. Phys. Rev., **91**, 1505–1512, (1953).
- [149] L. Onsager and S. Machlup. *Fluctuations and irreversible process. 2. systems with kinetic energy*. Phys. Rev., **91**, 1512–1515, (1953).
- [150] V. I. Oseledets. *Multiplicative ergodic theorem: Characteristic Lyapunov exponents of dynamical systems*. Trudy MMO, **19**, 179–210, (1968).
- [151] E. Ott. *Chaos in dynamical systems*. Cambridge University Press, (1993).
- [152] G. Parisi and N. Sourlas. *Supersymmetric field-theories and stochastic differential-equations*. Nucl. Phys., **B206**, 321, (1982).
- [153] J. Perrin. *Molecular agitation and the brownian movement*. CRAS, **146**, 967–970, (1908).

- [154] Y.B. Pesin. *Characteristic Lyapunov Exponents and Smooth Ergodic Theory*. Russian Math. Surveys, **32**, 54–114, (1977).
- [155] H. Poincaré. *Sur un théorème de géométrie*. Rend. Circ. Mat. Palermo, **33**, 375–407, (1912).
- [156] P. Pollner and G. Vattay. *New Method for Computing Topological Pressure*. Phys. Rev. Lett., **76**, 4155–4158, (1996).
- [157] N. Rajewsky and M. Schreckenberg. *Exact results for one-dimensional cellular automata with different types of updates*. Physica A, **245**, 139–144, (1997).
- [158] H. Risken. *The Fokker-Plank equation*. Springer, (1996).
- [159] C. Ritter, M.L. Maddelein, A.B. Siemer, T. Lühns, M. Ernst, B.H. Meier, S.J. Saupe, and R. Riek. *Correlation of structural elements and infectivity of the HET-s prion*. Nature, **435**, (2005).
- [160] D. Robin, C. Steire, J. Laskar, and L. Nadolski. *Global dynamics of the advanced light source revealed through experimental frequency map analysis*. Phys. Rev. Lett., **85**, 558–561, (2000).
- [161] R.T. Rockafellra. *Convex Analysis*. Princeton University Press, (1970).
- [162] W. Rudin. *Principles of Mathematical Analysis*. New York McGraw-Hill, Inc., (1976).
- [163] D. Ruelle. *Zeta-functions for expanding maps and Anosov flows*. Inventiones Mathematicae, **34**, 231, (1976).
- [164] D. Ruelle. *Thermodynamic Formalism*. Addison-Wesley, (1978).
- [165] T. Sasamoto. *One-dimensional partially asymmetric simple exclusion process with open boundaries: orthogonal polynomials approach*. J. Phys. A, **32**, 7109–7131, (1999).
- [166] G. Schütz and S. Sandow. *Non-abelian symmetries of stochastic-processes - derivation of correlation-functions for random-vertex models and disordered-interacting particle-systems*. Phys. Rev. E, **49**, 2726, (1994).
- [167] D.J. Searles, D.J. Evans, and D.J. Isbister. *The number dependence of the maximum Lyapunov exponent*. Physica A, **240**, 96–104, (1997).
- [168] D.J. Selkoe. *Alzheimer's Disease - Genotypes, Phenotype, and Treatments*. Science, **275**, 630, (1997).
- [169] M.A. Sepulveda, R. Badii, and E. Pollak. *Spectral analysis of conservative dynamical systems*. Phys. Rev. Lett., **63**, 1226–1229, (1989).

-
- [170] I. Shimada and T. Nagashima. *A Numerical Approach to Ergodic Problem of Dissipative Dynamical Systems*. Prog. Theor. Phys., **61**, 1605–1616, (1979).
- [171] Y.G. Sinai. *On the Notion of Entropy of a Dynamical System*. Doklady of Russian Academy of Sciences, **124**, 768–771, (1959).
- [172] Y.G. Sinai. *Gibbs measures in ergodic theory*. Russ. Math. Surveys, **27**, 21–69, (1972).
- [173] Y.G. Sinai. *Kolmogorov’s work on ergodic theory*. Ann. Prob., **17**, 833–839, (1989).
- [174] C. Skokos. *Alignment indices: a new, simple method for determining the ordered or chaotic nature of orbits*. J. Phys. A, **34**, 10029–10043, (2001).
- [175] P. Sollich. *Diagrammatic methods for dynamics*. URL <http://www.mth.kcl.ac.uk/~psollich/diagrams/diagrams.pdf>.
- [176] H. Spohn. *Long range correlations for stochastic gases in a non-equilibrium steady state*. J. Phys. A, **16**, 4275, (1983).
- [177] M. Stone, K. Park, and A. Garg. *The semiclassical propagator for spin coherent states*. J. Math. Phys., **41**, 8025, (2000).
- [178] G.J. Sussman and J. Wisdom. *Chaotic evolution of the solar-system*. Science, **257**, 56–62, (1992).
- [179] O.F. Syljuåsen. *Continuous-time diffusion Monte Carlo and the quantum dimer model*. Phys. Rev. B, **71**, 020401, (2005).
- [180] Y. Takahashi and Y. Oono. *Towards the Statistical Mechanics of Chaos*. Prog. Theor. Phys., **71**, 851–854, (1984).
- [181] W. Thomson. *On the thermal effects of fluids in motion*. Math. and Phys. Papers, **1**, 333–455, (1856).
- [182] H. Touchette. *Legendre-Fenchel transforms in a nutshell*. URL <http://www.maths.qmul.ac.uk/~ht/archive/lfth2.pdf>.
- [183] A. Trombettoni and A. Smerzi. *Discrete Solitons and Breathers with Dilute Bose-Einstein Condensates*. Phys. Rev. Lett., **86**, 2353–2356, (2001).
- [184] S. Tănase-Nicola and J. Kurchan. *Statistical-mechanical formulation of Lyapunov exponents*. J. Phys. A, **36**, 10299, (2003).
- [185] S. Tănase-Nicola and J. Kurchan. *Topological methods for searching barriers and reaction paths*. Phys. Rev. Lett., **91**, 188302, (2003).
- [186] S. Tănase-Nicola and J. Kurchan. *Metastable states, transitions, basins and borders at finite temperatures*. Journal of Statistical Physics, **116**, Nos. 5/6, (2004).

- [187] H. van Beijeren and J.R. Dorfman. *A Note on the Ruelle Pressure for a Dilute Disordered Sinai Billiard*. J. Stat. Phys., **108**, 767–785, (2002).
- [188] H. van Beijeren and O. Mülken. *Thermodynamic formalism for the Lorentz gas with open boundaries in d dimensions*. Phys. Rev. E, **71**, 036213, (2005).
- [189] J. van Tiel. *Convex Analysis: An Introductory Text*. John Wiley, New York, (1984).
- [190] R. van Zon, H. van Beijeren, and C. Dellago. *Largest Lyapunov Exponent for Many Particle Systems at Low Densities*. Phys. Rev. Lett., **80**, 2035–2038, (1998).
- [191] A F Voter. *Hyperdynamics: Accelerated Molecular Dynamics of Infrequent Events*. Phys. Rev. Lett., **78**, 3908, (1997).
- [192] D.J. Wales. *Energy Landscapes*. Cambridge University Press, (2003).
- [193] G. Wentzel. *A generalisation of the quantum constraints for the purposes of the wave mechanics*. Z. Physik., **38**, 518–529, (1926).
- [194] J. Wess and B. Zumino. *Lagrangian model invariant under supergauge transformations*. Phys. Lett. B, **49**, 52, (1974).
- [195] W. E. Wiesel. *Continuous time algorithm for Lyapunov exponents. I*. Phys. Rev. E, **47**, 3686–3691, (1993).
- [196] E. Witten. *Supersymmetry and Morse theory*. J. Diff. Geom, **17**, 661, (1982).
- [197] H. Yoshida. *Construction of higher order symplectic integrators*. Phys. Lett. A, **150**, 262, (1990).
- [198] N.J. Zabusky and M.D. Kruskal. *Interaction of Solitons in a Collisionless Plasma and the Recurrence of Initial States*. Phys. Rev. Lett., **15**, 240, (1965).
- [199] J. Zinn-Justin. *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*. Oxford Science Publication, (1996).

Publications

Revue à comité de lecture

- P1** J. Tailleur, S. Tănase-Nicola, J. Kurchan, *Kramers Equation and Supersymmetry*, J. Stat. Phys. **122**, 557-595 (2006)
- P2** J. Tailleur, J. Kurchan, *Probing rare physical trajectories with Lyapunov-Weighted Dynamics*, Nature Phys., **3**, 203-207, (2007)
- P3** V. Lecomte, J. Tailleur *A numerical approach to large deviations in continuous time*, J. Stat. Mech., P03004, (2007)
- P4** J. Tailleur, J. Kurchan, V. Lecomte, *Mapping out of equilibrium into equilibrium : the macroscopic fluctuations of simple transport models*, Acceptée pour publication dans Phys. Rev. Lett, Preprint arxiv/0705.4033

Actes de conférences

- P5** J. Tailleur, S. Tanase-Nicola, J. Kurchan, *Mapping Separatrix in Phase Space*, Int. J. Mod. Phys. B, **20** : 5254 (2006)
- P6** J. Tailleur, J. Kurchan, *Grandes déviations et chaoticité : étude à l'aide d'une dynamique biaisée*, Comptes-rendus de la 10^e Rencontre du Non-Linéaire. Institut Henri Poincaré. (NL Pub.)